

LIBRO DE RESÚMENES



QUIEMA-25

II Congreso de Química aplicada a la Energía y al Medio Ambiente

Campus de Rabanales, Universidad de Córdoba

3 y 4 de septiembre de 2025



Colaboran:



UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA



Patrocinan:



PROGRAMA DE DOCTORADO EN QUÍMICA FINA
POR LA UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA



DON FOLIO®



Equipo de dirección

Presidente: Vicente Montes Jiménez

Secretaria: Susana Ramos Terrón

Vocal: Francisco Javier López Tenllado

Director IQUEMA: Luís Sánchez Granados

Subdirector IQUEMA: Gustavo de Miguel Rojas

Secretaria IQUEMA: María del Carmen Gutiérrez Martín

Comité Científico

Álvaro Caballero Amores

María Teresa Martín Romero

Francisco José Urbano Navarro

María de los Ángeles Martín Santos

Manuel Yusta Cruz

María Soledad Cárdenas Aranzana

Araceli García Núñez

Carlos Augusto Ledesma Escobar

Comité Organizador

Antonio Aparicio Ibáñez

José Luis Aranda Hidalgo

José Balbuena Hidalgo

Valentín García Caballero

María de los Ángeles González Millán

Irene Humanes Pérez

Irene López Sicilia

Andrea Lucena de Opazo

Laura Marín Toral

Jaime Millán Santiago

Remedios Montenegro Elvira

Luis Muñiz Bustamante

Rocío Otero Izquierdo

Miguel Ángel Pozo López

Marta Ramírez Prieto

Marina Ronda Leal

Rafaela Ruiz Salguero

Antonio Manuel Ruz Luna

ÍNDICE

Programa	5
Conferencias Plenarias	8
Comunicaciones Orales	11
Comunicaciones tipo Póster	39



II CONGRESO DE QUÍMICA APLICADA A LA ENERGÍA Y AL MEDIO AMBIENTE

Miércoles, 3 – septiembre

08:30 – 09:30h	Entrega de documentación
09:00 – 09:30h	Acto de Apertura
Conversión de la energía solar Moderador: Francisco José Romero Salguero	
09:30 – 10:15h	P1. Dr. Antoni Llobet. Molecular catalysts on surfaces for energy applications.
10:15 – 11:00h	O1. Marta Estrada Ruiz. Composites de carbono funcionalizados con HDLS de Co/Al: nuevos fotocatalizadores para la conversión eficiente de CO ₂ . O2. José Estrada Pomares. Estudio fotocatalítico de la perovskita (CH ₃ NH ₃) ₂ AgInBr ₆ y el material compuesto formado por un hidróxido doble laminar de Mg-Al-Ti para la purificación del aire. O3. Alejandro Ariza Pérez. Influencia del tratamiento térmico en materiales de WO ₃ aplicados a la (foto)acetalización de glicerol con acetona.
11:00 – 11:30h	Café (aula SUM1)
Materiales para baterías y supercondensadores Moderador: Juan Luis Gómez Cámer	
11:30 – 12:15h	P2. Dra. María Gimenez. Sustainable energy solutions through materials and electrolyte research.
12:15 – 13:30h	O4. Jesús Manuel Blázquez Moreno. Poliisopreno sulfurizado como material catódico covalente para baterías de sodio-azufre de alto rendimiento. O5. Miguel López León. Electrocatalytic oxygen reduction activity of vitamin B12 conjugated to carbon nanotubes. O6. Adrián Licari Pedraza. Vacantes en análogos de Azul de Prusia: ¿La clave para la intercalación de cationes multivalentes? O7. Sergio Lavela Blázquez. Mejora de la estabilidad de Na ₃ VFe(PO ₄) ₃ mediante el recubrimiento con óxido de zinc para baterías de ion sodio. O8. Jesús Píriz Tercero. Desarrollo de nuevas plataformas electroquímicas impresas 3D para aplicaciones energéticas.
13:30 – 14:15h	P3. Dra. M^a Rebeca Marcilla. Baterías orgánicas basadas en polímeros redox.
14:15 – 15:45h	Comida (Cafetería Paraninfo)
Estrategias analíticas para evaluar la calidad del medioambiente Moderador: Juan Manuel Fernández Romero	

15:45 – 16:30h	P4. Dr. Ignacio Sirés Sadornil. Hydrogen peroxide as a key e-chemical for modern advanced wastewater treatment.
16:30 – 17:30h	O9. Ana María Pedraza Soto. Micropartículas de gel de sílice como pre-modificadores superficiales de láminas de acero inoxidable: un nuevo enfoque para la inmovilización sencilla de nailon-6. O10. Ángela Écija Arenas. Sistemas inteligentes de imagen para análisis microfluídico automatizado. O11. Luís Muñiz de Bustamante. Evaluación preliminar de la presencia y el riesgo de exposición a contaminantes emergentes en agua de grifo de doce países mediante microextracción con disolventes supramoleculares y espectrometría de masas de alta resolución O12. Carlos Calero Cañuelo. Desarrollo de una metodología sin disolventes para el análisis directo de sólidos particulados mediante espectrometría de masas.
17:30 – 19:00h	Café y Sesión de Posters (Aula SUM1)

Jueves, 4 – septiembre

Uso y valoración de residuos, sub-productos y co-productos

Moderador: María de los Ángeles Martín Santos

09:00 – 09:45h	P5. Dr. Jorge Bedia. Los residuos como reto y oportunidad.
09:45 – 10:45h	O13. Bryan Rivadeneira Mendoza. Control de la selectividad mediante flujo continuo: estudio en la valorización del ácido levulínico. O14. Cristina Hermoso Mendoza. Valorización de biomasa para producir material carbonoso para aplicaciones energéticas. O15. Andrea Lucena de Opazo. A Prebiotic-Probiotic Strategy for Functional Food Development Using Avocado Crop Residues. O16. Ana Castillo Luna. Aprovechamiento de subproductos del olivar en panificación: evaluación del metabolismo fenólico en humanos tras el consumo de pan enriquecido.
10:45 – 11:30h	Café (aula SUM1)
11:30 – 12:00h	O17. Alejandro López Chías. LiFePO₄: Un cátodo de baterías Li-ion para reciclar litio procedente de baterías gastadas. O18. Miguel Henares Oliva. Sustainable extraction of bioactive compounds from agro-industrial biomass for the development of dual packaging systems.

Materiales, biomateriales y tecnologías para reducir el impacto ambiental

Moderador: Manuel Cruz Yusta

12:00 – 12:45h	P6. Dra. María Luisa Marín. Photocatalysts for environmental applications.
----------------	---

12:45 – 14:15h	O19. David Caballero Armenteros. Sensores metálicos para la monitorización remota de la eficacia de tratamientos impermeabilizantes en materiales de base cemento
	O20. Yeray Yuri Plasencia Cerdeña. Eco-Friendly biopolymer coatings for corrosion resistance in offshore applications
	O21. Raúl Rojas Luna. Integrated electrocatalytic upcycling of plastic waste with CO ₂ reduction.
	O22. Beatriz Ledesma Cano. HTC para la síntesis de carbones activados a partir de caña común y su aplicación en la eliminación de herbicidas.
	O23. José Romero López. Sensores electroquímicos basados en tecnologías 3D para la monitorización de plaguicidas.
	O24. Carlos Navarro Laguna. Volatile organic compounds emitted by bacterial biocontrol agents of the genus <i>Pseudomonas</i> retard spore germination of <i>F. oxysporum f. sp. lycopersici</i> .
14:15 – 15:45h	Comida (Cafetería Paraninfo)
Biocombustibles Moderador: Rafael Estévez Toledano	
15:45 – 16:30h	P7. Dr. Manuel López Granados. Furfuraloquímica y Biorrefinería: Producción de monómeros C4 desde biomasa lignocelulósica.
16:30 – 17:15h	O25. Marina Ronda Leal. Producción de γ -valerolactona en flujo continuo con catalizadores Al ₂ O ₃ -ZrO ₂ /C derivados de MOFs.
	O26. Carmen María Álvarez Medina. Distribución de productos en la síntesis Fischer–Tropsch catalizada por oxalato de hierro(II) dihidratado: validación del modelo Anderson–Schulz–Flory.
	O27. Francisco Pérez Hidalgo. Uso de microemulsiones para la eterificación del glicerol con tert-Butanol.
17:15 – 17:30h	Comunicación Perkin-Elmer
17:30 – 18:00h	Café (aula SUM1)
18:00 – 18:30h	Entrega de premios 4ª edición de fotografía científica (IQUEMA)
18:30 – 18:45h	Entrega de reconocimientos a la mejor comunicación oral y póster
18:45 – 19:00h	Acto de clausura

CONFERENCIAS PLENARIAS

QUIEMA 25



Dr. Antoni Llobet

Institut Català d' Investigació Química (ICIQ)

Plenaria 1. Molecular catalysts on surfaces for energy applications



Dra. María Giménez

Universidade de Santiago de Compostela

Plenaria 2. Sustainable energy solutions through materials and electrolyte research



Dra. Rebeca Marcilla

IMDEA Energia

Plenaria 3. Baterías orgánicas basadas en



Dr. Ignasi Sirés

Universitat de Barcelona (UB)

Plenaria 4. Hydrogen peroxide as a key e-chemical for modern advanced wastewater treatment



Dr. Jorge Bedia

Universidad Autónoma de Madrid (UAM)

Plenaria 5. Los residuos como reto y oportunidad



Dra. María Luisa Marín

universitat politècnica de valència (UPV)

Plenaria 6. Photocatalysts for environmental applications



Dr. Manuel López Granados

Instituto de Catálisis y Petroleoquímica (ICP)

Plenaria 7. Furfuraloquímica y Biorrefinería:
Producción de monómeros C4 desde biomasa
lignocelulósica

COMUNICACIONES ORALES

QUIEMA 25

COMPOSITES DE CARBONO FUNCIONALIZADOS CON HDLS DE CO/AL: NUEVOS FOTOCATALIZADORES PARA LA CONVERSIÓN EFICIENTE DE CO₂

M. Estrada-Ruiz, D. Cosano, D. Esquivel, F.J. Romero-Salguero, J.R. Ruiz

*Departamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, España
q92esrum@uco.es*

Uno de los grandes problemas de nuestro tiempo es el cambio climático. Como consecuencia de la intensa industrialización y la urbanización global las emisiones de CO₂ han aumentado exponencialmente. En este contexto, los procesos fotocatalíticos se han consolidado como una alternativa prometedora, pudiendo aprovechar la energía solar para transformar CO₂ en productos de alto valor añadido, tales como monóxido de carbono o metano, promoviendo así un modelo de economía circular.

En este trabajo se estudia el diseño y desarrollo de una nueva familia de catalizadores jerarquizados basados en Hidróxidos Dobles Laminares (HDLs) de Co/Al, con el objetivo de mejorar las propiedades fotocatalíticas para la fotorreducción de CO₂. El uso de fibras de algodón calcinadas como plantilla estructural, permite obtener materiales accesibles y de bajo coste. En primer lugar, se realizó una caracterización de las propiedades físico-químicas del algodón pre y post calcinación, incluyendo un estudio de Raman *in situ* a diferentes temperaturas. Posteriormente, se sintetizaron los catalizadores 2D y jerarquizados (3D) siguiendo dos métodos de síntesis, precipitación homogénea e hidrotermal. Los catalizadores obtenidos fueron caracterizados mediante diferentes técnicas, como difracción de rayos X, espectroscopía Raman, porosimetría y microscopía electrónica de barrido, entre otras. Se confirmó un recubrimiento homogéneo y completo de las fibras de algodón para generar los catalizadores jerarquizados.

Para evaluar su actividad en la reducción de CO₂, los materiales se aplicaron en un sistema fotocatalítico con [Ru(bpy)₃]²⁺ como fotosensibilizador y trietanolamina (TEOA) como agente donador de electrones, empleando un fotorreactor Penn PhD. La cuantificación de los productos se realizó por cromatografía de gases. Los resultados obtenidos muestran que los catalizadores jerarquizados triplicaron la actividad catalítica en comparación con sus análogos no jerarquizados. Se observa una evidente sinergia entre la matriz carbonosa y el catalizador.

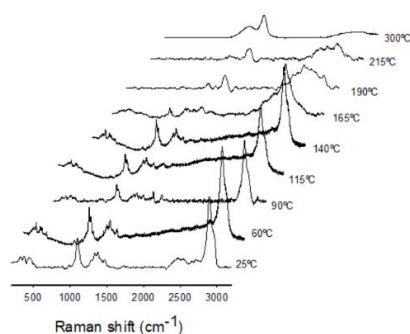


Figura 1. Estudio de Raman *in situ* durante el tratamiento térmico a las fibras de algodón.

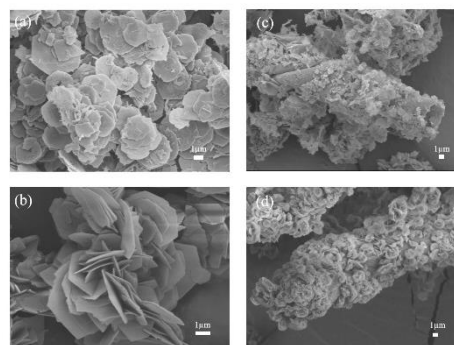


Figura 2. Micrografías SEM de los materiales. convencionales (a y b) y jerarquizados (c y d).

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el aporte financiero a la Junta de Andalucía (Proyecto ProyExcel_00492 y al grupo FQM-346), al Ministerio de Ciencia e Innovación del Gobierno de España (Proyecto PRE2023/PID2022-142657OB-I00).

ESTUDIO FOTOCATALÍTICO DE LA PEROVSKITA $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{AgInBr}_6$ Y EL MATERIAL COMPUESTO FORMADO CON UN HIDRÓXIDO DOBLE LAMINAR DE Mg-Al-Ti PARA LA PURIFICACIÓN DEL AIRE

José Estrada-Pomares^a, María de los Ángeles Oliva^b, Luis Sánchez^b, Gustavo de Miguel^a

^aDepartamento de Química Física y Termodinámica Aplicada, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente, IQUEMA, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Marie Curie, E-14071 Córdoba, Spain

^bDepartamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente, IQUEMA, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Marie Curie, E-14071 Córdoba, Spain
sc2espoj@uco.es

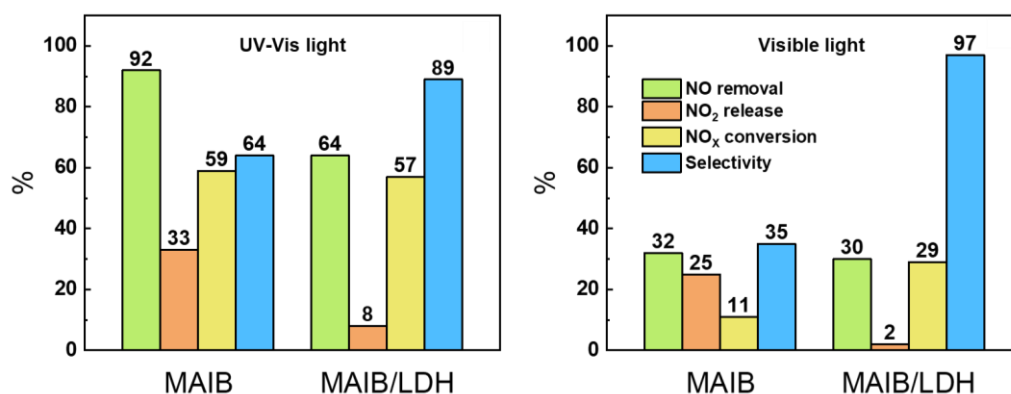
Las perovskitas de haluro metálico (MHPs, por sus siglas en inglés) se han utilizado recientemente en diferentes tipos de aplicaciones fotocatalíticas debido a su alta absorción en la región visible y excelentes propiedades optoelectrónicas. En este trabajo, se ha sintetizado la perovskita libre de plomo $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{AgInBr}_6$ (MAIB) con el fin de evaluar su actividad fotocatalítica en la reacción de eliminación de gases NO_x .

La perovskita se sintetizó sin necesidad de emplear disolventes orgánicos mediante mecanosíntesis con molino de bolas. La estructura y cristalinidad de los polvos de perovskita obtenidos se caracterizaron mediante difracción de rayos (DRX). Mediante espectroscopía de reflectancia difusa UV-Vis se obtuvo una energía de banda prohibida de 3.44 eV, con una cola de absorción que cubre parte de la región visible. Las imágenes de microscopía electrónica de barrido (SEM) mostraron cristales con una distribución de tamaños entorno a 1 micrómetro.

Los experimentos fotocatalíticos mostraron una conversión de NO del 92 % bajo irradiación UV-Vis y del 32 % bajo luz visible. La ciclabilidad de la perovskita se estudió durante seis ciclos, obteniendo un rendimiento prácticamente invariable.

Para compensar la baja selectividad de la perovskita MAIB en el proceso DeNO_x se preparó un composite empleando un hidróxido doble laminar de MgAlTi (LDH), evitando así la liberación de NO_2 durante la oxidación del gas NO.

Finalmente, se empleó resonancia electrónica de spin (ESR) para confirmar la capacidad de los fotocatalizadores para formar radicales superóxido.



AGRADECEDIMIENTOS

Este trabajo ha sido financiado por la Agencia Estatal de Investigación:

(España; proyectos MCIN PID2020–117516 GB-I00/AEI/10.13039/501100011033 y PID2020–119209RB-I00/AEI/10.13039/501100011033).

José Estrada Pomares agradece su contrato a la Unión Europea: (HE-RIA-2021-CL5-D3–101084422 SUNREY).

M^a Ángeles Oliva agradece su contrato al Gobierno de España: (FPU2019/03570).

INFLUENCIA DEL TRATAMIENTO TÉRMICO EN MATERIALES DE WO₃ APLICADOS A LA (FOTO)ACETALIZACIÓN DE GLICEROL CON ACETONA

Alejandro Ariza-Pérez^a, Miguel López^a, M^a Carmen Herrera-Beurnio^a, Francisco Javier López-Tenllado^a, Juan Martín-Gómez^a, Jesús Hidalgo-Carrillo^a, Alberto Marinas^a, Francisco José Urbano^a

^aDepartamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, E-14071 Córdoba, Spain
q82arpea@uco.es

El glicerol, generado en grandes cantidades como subproducto de la producción de biodiésel, es una molécula plataforma con gran potencial para el desarrollo de procesos de valorización [1]. Entre las distintas alternativas disponibles, este trabajo se centra en la reacción de acetalización con acetona para obtener solketal, un compuesto versátil con aplicaciones como disolvente ecológico y aditivo en (bio)combustibles [2]. En este contexto, se evalúa el uso del óxido de wolframio (WO₃) como catalizador bifuncional, aprovechando tanto su acidez superficial como su actividad en fotocatalisis. Para ello, se han estudiado distintos materiales de WO₃ obtenidos por síntesis solvotermal y posteriormente sometidos a tratamientos térmicos con el objetivo de modular sus propiedades ácidas, morfología y optimizar su comportamiento fotocatalítico.

Los materiales, incluidos los tratados térmicamente y el fresco, se caracterizaron mediante SEM, DRX, UV-Vis, XPS y TPD de piridina, realizándose ensayos catalíticos en oscuridad y bajo radiación visible. Se observó que, al aumentar la temperatura de pirólisis, la actividad catalítica ácida va disminuyendo, al igual que decae la acidez superficial, observada a través de los TPD de piridina. Además, el sólido tratado a 500 °C tampoco presentó buenos resultados en fotocatalisis y muestra un alto grado de cristalinidad, al contrario que el resto de materiales, que presentaron muy buenas conversiones a través de la fotocatalisis y grados bajos de cristalinidad (Figura 1). Esta alta cristalinidad podría estar asociada a una menor accesibilidad de los centros activos o a una reducción de defectos beneficiosos para el proceso. La suma de estas experiencias y los resultados encontrados sugiere que el aumento de la temperatura a partir de ciertos grados acompaña una pérdida de centros activos y/o modificaciones estructurales desfavorables para el transcurso de esta reacción.

Este trabajo nos permiten no solo evaluar el rendimiento de los catalizadores, sino también establecer relaciones entre sus propiedades y el desarrollo de la reacción, contribuyendo a profundizar en la comprensión del mecanismo de la acetalización.

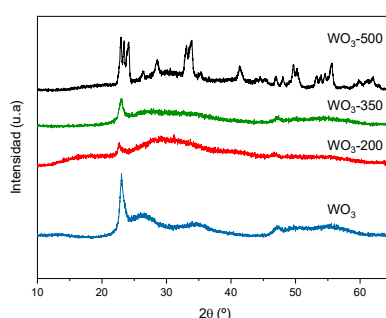


Figura 1. Difractograma de los materiales WO₃ y sus respectivas pirólisis a 200, 350 y 500 °C

Referencias

- [1] Attarbach, T.; Kingsley, M. D.; Spallina, V. *Fuel* **2023**, *340*, 127485.
- [2] Zahid, I.; Ayoub, M.; Abdullah, B. B.; Nazir, M. H.; Ameen, M.; Zulqarnain; Mohd Yusoff, M. H.; Inayat, A.; Danish, M. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2020**, *59*, 20961–20978.

Agradecimientos

Los autores agradecen al proyecto PID2022-142275OB-I00 financiado por MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y FEDER, UE, al proyecto TED2021-132224B-I00 financiado por MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y Unión Europea "NextGenerationEU/PRTR"

POLIISOPRENO SULFURADO COMO MATERIAL CATÓDICO COVALENTE PARA BATERÍAS SODIO-AZUFRE DE ALTO RENDIMIENTO

Jesús M. Blázquez-Moreno,^{a,b} Sadananda Muduli,^a Almudena Benítez,^b Álvaro Caballero,^b Michael R. Buchmeiser^a

^aInstitute of Polymer Chemistry, University of Stuttgart, Pfaffenwaldring 55, D-70569 Stuttgart, Germany

^bDepartment of Inorganic Chemistry and Chemical Engineering. Chemical Institute for Energy and the Environment (IQUEMA). University of Cordoba, Campus of Rabanales, 14014, Cordoba, Spain.
q62blmom@uco.es

En los últimos años, las baterías metal-azufre (Na-S y Li-S), especialmente las de sodio, han ganado interés como alternativa renovable a los combustibles fósiles debido al bajo coste y abundancia del sodio frente al litio. Sin embargo, su desarrollo enfrenta retos importantes, como la baja conductividad del azufre, la disolución de polisulfuros y la lentitud de las reacciones redox, que provocan el efecto “shuttle” y limitan su rendimiento electroquímico.^{1,2}

Para abordar estos desafíos, en el presente trabajo se estudia innovadoramente un polímero conductor, el poliisopreno sulfurizado (SPI), capaz de retener una gran cantidad de azufre unido covalentemente a la cadena polimérica, eliminando así de forma efectiva el efecto “shuttle” (Fig. 1). El polímero, sintetizado por metodología simple a temperatura intermedia, es sometido integralmente a técnicas de caracterización estructural y morfológica, además de ser evaluado como posible material catódico en baterías Na-S (a temperatura ambiente). Desde el punto de vista electroquímico, las celdas muestran un excelente rendimiento, alcanzando velocidades de hasta 3C y una capacidad de 325 mAh g⁻¹. Asimismo, estas baterías presentan una estabilidad excepcional a lo largo de 1000 ciclos de carga-descarga a 1C, lo que evidencia su fiabilidad y durabilidad. Además, se llevó a cabo un estudio cinético mediante la técnica de titulación galvanostática (GITT) junto con el análisis de la contribución de carga capacitiva, revelando altos coeficientes de difusión y una notable contribución capacitiva. Finalmente, se realizó un análisis morfológico post-mortem de los electrodos demostrando la estabilidad de los electrodos tras el ciclaje. En consecuencia, este estudio demuestra la posibilidad de emplear SPI como ultra-eficiente cátodo en celdas Na-S, con un comportamiento electroquímico excepcional.

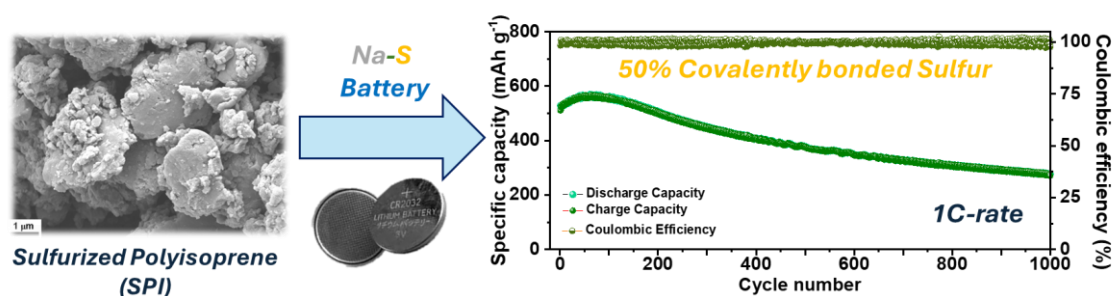


Figura 1. Rendimiento electroquímico del poliisopreno sulfurado (SPI) con un 50% de S enlazado covalente como cátodo de baterías Na-S (funcionando a temperatura ambiente)

Referencias

¹ Blázquez-Moreno, J. M.; Páez Jerez, A. L.; Tesio, A. Y.; Benítez, A.; Caballero, Á. *Batteries & Supercaps*, 2024, 7, 2400640.

² Wang, J.; Yao, Z.; Xu, Z.; Wang, Y.; Chen, L.; Wang, J.; Li, Y.; Zhang, Y.; Zhang, H.; Li, Y. *J. Mater. Chem. A*, 2020, 8, 12748.

Agradecimientos

Investigación financiada por MICIN/AEI/10.13039/501100011033 y la Unión Europea “NextGenerationEU/PRTR” (Proyecto PID2023-147080OB-I00); y ayuda “Juan de la Cierva - Incorporación” (IJC2020-045041-I).

ELECTROCATALYTIC OXYGEN REDUCTION ACTIVITY OF VITAMIN B12 CONJUGATED TO CARBON NANOTUBES

Miguel López Leon^{a,*}, Valentín García-Caballero^a, José M. Rodríguez-Mellado^a, Juan J. Giner-Casares^a, Antonio J. Fernández-Romero^{a,b} and Manuel Cano^a

^a Departamento de Química Física y Termodinámica Aplicada, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Córdoba 14014, Spain.

^b Grupo de Materiales Avanzados para la Producción y Almacenamiento de Energía, Universidad Politécnica de Cartagena, Aulario II, Campus de Alfonso XIII, Cartagena 30203, Spain.
q02lolem@uco.es

The increasing global demand for energy, together with the transition to renewable sources, requires the development of new electrochemical energy storage and conversion systems. A sustainable and efficient approach are the zinc-air batteries (ZAB), which can use atmospheric oxygen as reagent in the air electrode, and provide several intrinsic advantages, such as low cost, high theoretical capacity, low redox potential, and good compatibility with aqueous electrolytes. However, the cathodic oxygen reduction reaction (ORR) is kinetically sluggish and requires catalysts. In this respect, biological molecules can be an interesting alternative to the use of noble metals, which are currently the best catalysts. Herein, we have evaluated the electrocatalytic properties towards ORR of vitamin B12 conjugated to single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) without pyrolysis. The catalytic capacity of pyrolyzed vitamin B12 both for ORR and for carbon dioxide reduction reaction (CO₂R) has already been reported^{1,2}.

The covalent anchoring of vitamin B12 to SWCNTs has been performed following the EDC/NHS crosslinking method (Figure 1) and its correct conjugation has been demonstrated by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and transmission electron microscopy (HR-TEM) characterization. Next, different electrochemical techniques have been used to analyze the catalytic activity of this composite towards ORR. The electrons pathway as well as the nature of the ORR catalytic process has been studied using two different methodologies (i.e. rotating disk-ring electrode (RRDE) and Koutecký-Levich methods). In addition, the electroactive surface area (ECSA) and electrochemical impedance spectroscopy (EIS) analysis have been carried out. Finally, a preliminary experiment has been carried out to test the catalytic performance of vitamin B12 conjugated to SWCNTs in a ZAB prototype, paving the way for the development of more biocompatible and sustainable batteries.

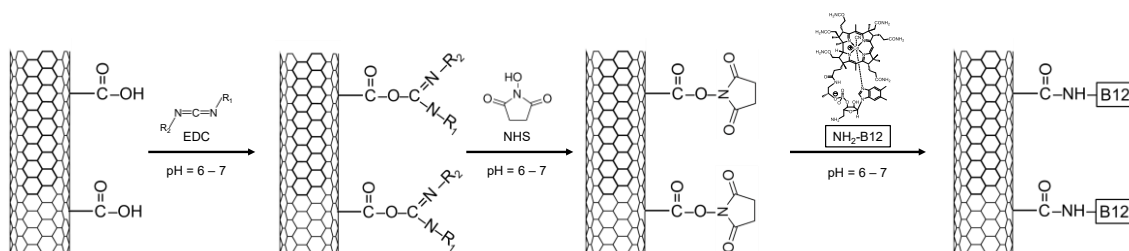


Figure 1. Scheme of modification of SWCNTs with Vitamin B12 via carbodiimide.

Acknowledgements:

To the research group FQM-204 and funding from MICIU/AEI/10.13039/501100011033 and FEDER/EU for the projects: PID2020-112744GB-I00, PID2022-139191OB-C32 and E3TECH-PLUS (RED2022-134552-T). M. López-León thanks the Ministry of Universities for a FPU fellowship (FPU24-03131).

¹ Lee, D.-E.; Moru, S.; Jo, W.-K.; Tonda, S. *J. Alloys Compd.* **2022**, 912, 165118.

² Yesudas K., Y.; Balamurugan, M.; Nam, K. T.; Gopal, B.; Senthil Kumar, A. *J. Mater. Chem. A* **2024**, 12, 31135–31144

VACANTES EN ANÁLOGOS DE AZUL DE PRUSIA: ¿LA CLAVE PARA LA INTERCALACIÓN DE CATIONES MULTIVALENTES?

Adrián Licari^a, Alejandro López-Chías^a, Marta Ramírez^a, Rafael Trócoli^a

^a Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba.
q82lipea@uco.es

La creciente demanda global de soluciones sostenibles para el almacenamiento de energía impulsada por el incremento de la población, la expansión industrial, la implementación acelerada de fuentes renovables y la adopción creciente de vehículos eléctricos, exige el desarrollo de tecnologías de baterías avanzadas. Aunque las baterías de ion-litio dominan actualmente el mercado, diversificar las tecnologías de almacenamiento es fundamental para reducir la dependencia de materias primas escasas.

Entre las químicas alternativas, los sistemas basados en la intercalación de cationes como Mg^{2+} , K^+ , Na^+ , Ca^{2+} , Zn^{2+} y Al^{3+} (baterías post-litio) ofrecen ventajas prometedoras, como una mayor seguridad, menor coste y una elevada densidad energética¹, lo que permitiría superar los desafíos económicos, medioambientales y de rendimiento a los que se enfrenta la transición hacia un sistema energético más sostenible.

En este contexto, los análogos del azul de Prusia (PBAs), caracterizados por su estructura cúbica tipo perovskita (Fm-3m) (Fig. 1a), han emergido como candidatos destacados gracias a su capacidad para incorporar diversos metales en su estructura². La versatilidad en la síntesis de los PBAs permite modular sus propiedades, ya que pequeñas modificaciones en las condiciones de síntesis dan lugar a defectos estructurales, cambios morfológicos y diferentes comportamientos electroquímicos.

En este estudio se analizó el efecto de parámetros clave de síntesis sobre las propiedades

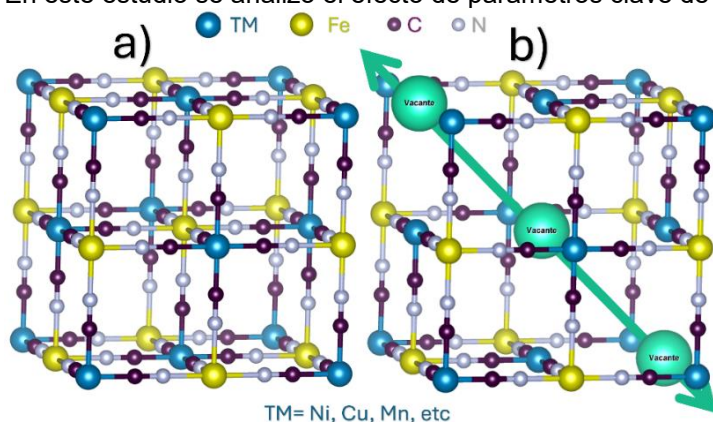


Figura 1: Estructura de los Análogos de Azul de Prusia a) sin vacantes b) con vacantes interconectadas entre sí

estructurales y electroquímicas de los PBA. Destacando el papel crítico de las vacantes estructurales en la modulación de la intercalación catiónica (Fig 1b). Estos hallazgos aportan información valiosa sobre la relación entre la estructura y el rendimiento electroquímico en los PBAs, contribuyendo a su optimización como materiales de almacenamiento energético de próxima generación para baterías más allá del litio.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (MCIN/AEI/10.13039/501100011033 / Proyecto PID2022-142391OA-I00 y TED2021-129314A-100), la Junta de Andalucía (Proyecto ProyExcel_00330), y la Unión Europea a través de NextGenerationEU/PRTR. Los autores agradecen al Ministerio de Universidades la ayuda predoctoral FPU (FPU23/01119) y la ayuda RYC2022-037564.

Referencias

- ¹ Trócoli, R. et al. ChemSusChem, 2024, 17, e202301224.
- ² Wang, R. Y. et al. Advanced Energy Materials, 2015, 5, 1401869.

OPTIMIZACIÓN DEL CÁTODO $\text{Na}_3\text{VFe}(\text{PO}_4)_3$ EN BATERÍAS DE IÓN SODIO: EL PAPEL DEL RECUBRIMIENTO CON ÓXIDO DE ZINC

Sergio Lavela, Carlos Pérez-Vicente, Pedro Lavela, José Luis Tirado

Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química. Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente. Universidad de Córdoba. Edificio Marie Curie. Campus de Rabanales 14071

q62labs@uco.es

Se han preparado tres muestras de $\text{Na}_3\text{VFe}(\text{PO}_4)_3/\text{C}$ recubiertas con ZnO mediante un método sol-gel fácilmente escalable¹. El análisis estructural indica que los parámetros de red de la muestra no recubierta no sufren ningún cambio tras el proceso de recubrimiento. La microscopía electrónica y la espectroscopía Raman identificaron la capa de recubrimiento de ZnO (Figura 1a), así como la fase conductora de carbono, respectivamente. Los diagramas de XRD y espectros de XPS demuestran la reversibilidad del proceso de inserción de los iones sodio en la estructura, con la participación redox del vanadio y del hierro en la reacción de transferencia de carga. Las técnicas galvanostáticas muestran como, para las cinéticas más elevadas, las muestras recubiertas con un 1% y 3% de ZnO poseen una capacidad mayor que la de la muestra sin recubrir (Figura 1b). Esta mejora se atribuye a una menor resistencia al paso de corriente continua e impedancia de celda. Algunas pruebas adicionales de ciclado a 1C y 5C muestran como la muestra con un recubrimiento de un 3% de ZnO presenta una mejor capacidad de retención. Las pruebas de voltametría cíclica indican un incremento en la contribución capacitiva con el aumento del porcentaje de ZnO añadido, lo cual mejora el rápido intercambio de iones Na^+ en la interfase. Además, esta técnica también muestra como la muestra recubierta con un 3% posee mayores coeficientes de difusión en todas las regiones de voltaje. El hecho de que estos coeficientes de difusión se mantengan tras el ciclado enfatiza el efecto beneficioso del recubrimiento para la prevención de la degradación del electrodo durante el ciclado.

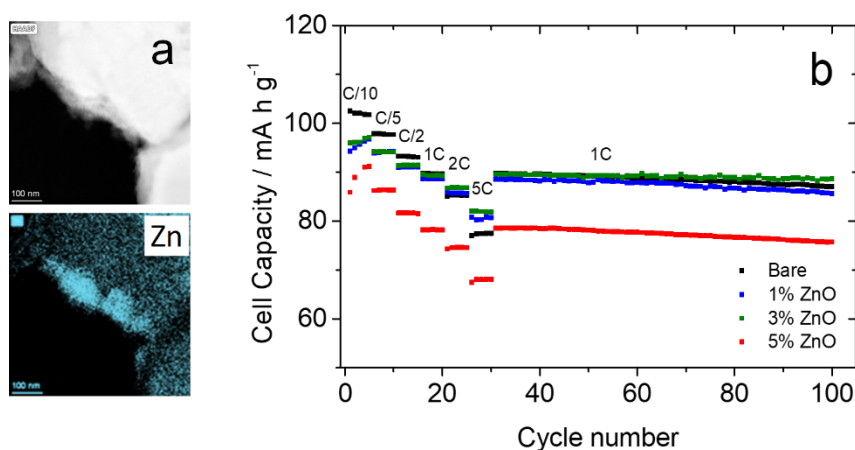


Figura 1. a) Imagen de microscopía electrónica de alta resolución y mapa de fluorescencia de rayos X para el elemento Zn; b) Ciclado galvanostático a diferentes de cinéticas para las muestras estudiadas.

¹ Klee, R.; Wiatrowski, M. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2017**, 9, 2.

DESARROLLO DE NUEVAS PLATAFORMAS ELECTROQUÍMICAS IMPRESAS 3D PARA APLICACIONES ENERGÉTICAS.

Jesús Píriz Tercero, Miriam Chávez, Ángela Fernández-Merino, Manuel Blázquez, Teresa Pineda, Rafael Del Caño

^a Dep. Química Física y Termodinámica Aplicada, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente, Universidad de Córdoba, E-14014, Spain.
z42pitej@uco.es

En el panorama energético actual, marcado por una creciente demanda de electricidad a nivel global y una transición acelerada hacia fuentes renovables, se vuelve imprescindible avanzar en tecnologías de almacenamiento energético capaces de asegurar la continuidad y confiabilidad del suministro. Los supercondensadores destacan entre las tecnologías emergentes de almacenamiento energético gracias a su capacidad para acumular carga mediante procesos como la electrosorción, reacciones redox y mecanismos de intercalación. Esta diversidad en los métodos de carga viene acompañada de la capacidad de liberar cantidades importantes de energía en lapsos muy breves, explicando el atractivo que estos dispositivos presentan para la investigación científica y el desarrollo tecnológico.¹ En este contexto, los polímeros conductores (como la polianilina (PANI)) también están cobrando protagonismo, ya que sus características hacen que sean la opción óptima para la fabricación de supercondensadores con propiedades pseudocapacitivas.²

En este estudio se presentan plataformas electroquímicas mediante impresión 3D (3DPEs) basada en filamentos, combinando un material en el que se integran partículas conductoras para la fabricación de los electrodos, con materiales no conductores para fabricar el soporte estructural. Para optimizar el rendimiento electroquímico de los electrodos, se llevaron a cabo diversas estrategias de modificación superficial, tanto químicas como electroquímicas. Posteriormente, se analizaron las condiciones óptimas para la electropolimerización de polianilina (PANI), un paso esencial para alcanzar el objetivo principal: evaluar el potencial de integración de las 3DPEs como supercondensadores pseudocapacitivos simétricos, ensamblados en una celda *Swagelok* personalizada, también diseñada y fabricada mediante impresión 3D. La caracterización de estas plataformas se realizó utilizando múltiples técnicas electroquímicas, entre ellas voltamperometría cíclica (CV), espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS) y ciclos de carga-descarga a corriente constante (CDCC). Estas pruebas se complementaron con estudios morfológicos mediante microscopía electrónica de barrido (SEM) y microscopía óptica, lo que permitió obtener una visión integral del comportamiento y estructura del sistema propuesto.

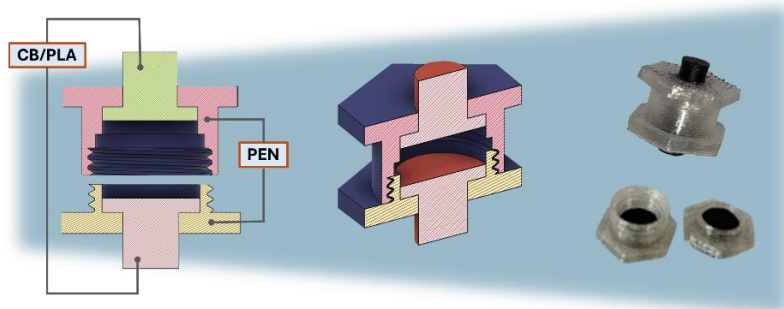


Figura 1. Esquema representativo del proceso de fabricación y desarrollo del supercondensador

Ministerio de Ciencia e Innovación (Project RED2022-134120-T Red de Excelencia de Sensores y Biosensores electroquímicos), Programa FEDER Andalucía 2021–2027, Consejería de Universidad, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía (PP2F_L1_09) y Universidad de Córdoba.

¹ Poonam; Sharma, K.; Arora, A.; Tripathi, S. K. *J Energy Storage* **2019**, 21, 801–825.

² Zhang, M.; Nautiyal, A.; Du, H.; Wei, Z.; Zhang, X.; Wang, R. *Electrochim Acta* **2021**, 376.

MICROPARTÍCULAS DE GEL DE SÍLICE COMO PRE-MODIFICADORES SUPERFICIALES DE LÁMINAS DE ACERO INOXIDABLE: UN NUEVO ENFOQUE PARA LA INMOVILIZACIÓN SENCILLA DE NAILON-6

Ana M. Pedraza-Soto, Rafael Lucena, Soledad Cárdenas.

*Affordable and Sustainable Sample Preparation (AS₂P) research group, Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente IQUEMA, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Marie Curie, E-14071, Córdoba, España.
q82pesoa@uco.es*

Los sustratos metálicos, especialmente el acero inoxidable, han cobrado importancia para el desarrollo de fases adsorbentes planas debido a que presentan propiedades que permiten ampliar el campo de aplicación de los materiales diseñados.¹ Entre ellas destacan la estabilidad mecánica, o la posible modificación con distintas fases adsorbentes, aumentando así la versatilidad del material. Sin embargo, la escasa humectabilidad y área superficial de las láminas pulidas hace que las modificaciones sean complejas, incorporando procesos agresivos de grabado previos a la modificación. Estas limitaciones pueden resolverse fácilmente mejorando las propiedades del propio sustrato, permitiendo la posterior aplicación de técnicas sencillas de síntesis. Para ello, en esta comunicación se propone el uso de micropartículas de gel de sílice como guía superficial del sustrato, utilizando cinta de doble cara como aglutinante, para aumentar el área superficial final. Sobre estas se depositó nailon-6 comercial mediante la técnica *dip-coating*, cubriendo la superficie de las partículas y asegurando la estabilidad mecánica del material. El potencial de las láminas resultantes se evaluó mediante la determinación de opioides (codeína, metadona, oxicodona y naloxona) a partir de muestras de saliva y su análisis por espectrometría de masas mediante infusión directa. Con esta modalidad se elimina la separación cromatográfica, reduciendo el tiempo de análisis a 2 minutos por muestra. Trabajando en condiciones óptimas, los analitos seleccionados se pueden aislar en solo 5 minutos de la matriz, lo que garantiza la viabilidad del método para el procesamiento de muestras a mayor escala. Además, una vez aislados, los analitos se mantienen retenidos de forma estable en el material durante 15 días a temperatura ambiente, permitiendo su fácil almacenamiento y transporte. Esta alternativa abre la puerta a aplicaciones *in-situ*, donde la extracción se realiza en el mismo sitio de toma de muestra (por ejemplo, pequeños hospitales), y después se almacena y transporta a un laboratorio externo para su análisis. Por último, la aplicabilidad del método se demuestra analizando muestras reales de codeína de pacientes sometidos a tratamiento.² Con esto se consigue un método analítico que permite el procesamiento de muestras de forma rápida y eficaz, utilizando para ello un material diseñado a partir de recursos asequibles y ampliamente disponibles, todo ello en consonancia con la química verde.

Agradecimientos:

Se agradece la financiación recibida a través del proyecto PID2023-146313OB-I00, financiado por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (MCIN). Ana M. Pedraza-Soto agradece el contrato predoctoral (FPU22/01752) del MCIN.

¹ Tascon, M.; *et al.* *J Pharm Biomed Anal*, **2017**, *144*, 106-111.

² Pedraza-Soto, A. M.; Lucena, R.; Cárdenas, S. *Anal Chim Acta*, **2025**, *1348*, 343814.

SISTEMAS INTELIGENTES DE IMAGEN PARA ANÁLISIS MICROFLUÍDICO AUTOMATIZADO

Ángela Écija-Arenas, Vanesa Román-Pizarro, Miguel Ángel García-Granados, Juan Manuel Fernández-Romero

*Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Anexo "Marie Curie", E-14071 Córdoba, España
q92ecara@uco.es*

El desarrollo de plataformas microfluídicas inteligentes está contribuyendo de forma significativa al avance de tecnologías aplicadas más sostenibles, eficientes y automatizadas para el análisis químico. La integración de lenguajes de programación científica, como Python, en entornos computacionales aplicados a estos sistemas ha permitido automatizar la adquisición y procesamiento de datos de imagen, lo que reduce el consumo de reactivos y energía, y mejora la precisión de las mediciones.

Entre las aplicaciones destacadas se encuentra la técnica de resonancia de plasmón superficial por imagen (*imaging surface plasmon resonance*, iSPR), que permite el análisis en tiempo real de interacciones moleculares sobre superficies metálicas. Esta tecnología se ha empleado con éxito para detectar compuestos de interés biológico, como purinas, y nanopartículas presentes en muestras ambientales complejas, mostrando su potencial para el monitoreo de contaminantes.

También los sistemas basados en generación de gotas (*droplet-based systems*) representan una herramienta prometedora para minimizar el volumen de residuos y optimizar la eficiencia de procesos analíticos en ámbitos como el control de calidad del agua o la detección de contaminantes. El rápido movimiento de las gotas dentro de microcanales exige algoritmos de tratamiento de señal avanzados, capaces de operar en tiempo real para garantizar resultados fiables.

El uso combinado de cámaras y algoritmos de análisis de imagen RGB permite extraer parámetros cromáticos relacionados con la concentración de analitos, sin necesidad de instrumentación compleja. Este enfoque contribuye al desarrollo de sistemas tipo *lab-on-a-chip* más autónomos y sostenibles, con aplicaciones relevantes en vigilancia ambiental, seguridad alimentaria y gestión de recursos.

La integración de entornos de desarrollo computacional para el análisis digital y tratamiento automatizado de datos mediante lenguajes de programación científica, como Python, en sistemas microfluídicos ha permitido avances clave en la adquisición, gestión y procesamiento de datos de imagen, con aplicaciones relevantes en el análisis de nanopartículas y en bioanálisis.

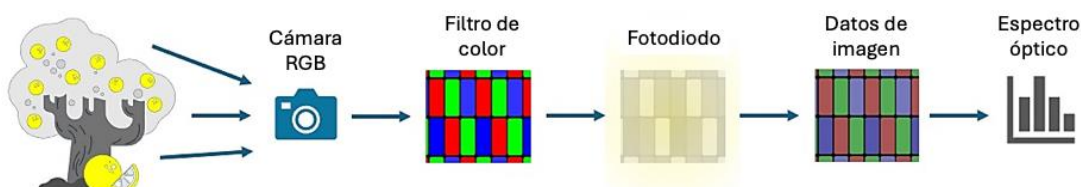


Figura 1. Captura de imágenes a través de las cámaras RGB. Representación del proceso hasta la obtención de los valores numéricos para poder ser tratados quimiométricamente.

Financiación: Este trabajo ha sido financiado por la submodalidad 2.6 "UCOProyecta", del Plan Propio de Investigación "Enrique Aguilar Benítez de Lugo" 2024 y el proyecto "Plan Complementario de I+D+i en el área de Ciencias Marinas" (PCM_00121, ThinkInazul), cofinanciado por la Consejería de Universidades, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía y por la Unión Europea a través de los fondos Next Generation EU del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia. Las opiniones y puntos de vista expresados son exclusivamente de los autores y no reflejan necesariamente los de la Unión Europea ni de la Comisión Europea.

EVALUACIÓN PRELIMINAR DE LA PRESENCIA Y EL RIESGO DE EXPOSICIÓN A CONTAMINANTES EMERGENTES EN AGUA DE GRIFO DE DOCE PAÍSES MEDIANTE MICROEXTRACCIÓN CON DISOLVENTES SUPRAMOLECULARES Y ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE ALTA RESOLUCIÓN

Luis Muñiz-Bustamante^a, Noelia Caballero-Casero, Soledad Rubio

^a*Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente, Universidad de Córdoba, Edificio anexo Marie Curie, Campus de Rabanales, Córdoba 14071, España
t52mubul@uco.es*

La creciente producción de compuestos químicos ha dado lugar a la liberación masiva de sustancias al medioambiente, incluyendo una amplia gama de contaminantes orgánicos detectados en efluentes de aguas residuales. Muchos de estos compuestos carecen de información química y toxicológica, motivo por el cual se agrupan bajo la categoría de contaminantes de preocupación emergente (CECs). Los efluentes de aguas residuales son descargados en diferentes masas de agua, actuando como vía de entrada de los CECs al ciclo hidrológico y favoreciendo su dispersión a escala global. Dado que las plantas de tratamiento de agua potable utilizan esas masas de agua y únicamente cuentan con tratamientos de potabilización diseñados para eliminar contaminantes específicos, la presencia de CECs en agua de grifo debe ser evaluada.

La espectrometría de masas de alta resolución (HRMS), gracias a su elevada exactitud de masa, permite la identificación de compuestos sin requerir estándares analíticos. No obstante, el éxito de las metodologías no dirigidas en HRMS depende de la aplicación de técnicas de extracción capaces de abarcar compuestos con elevada diversidad estructural y amplio rango de polaridad. Las metodologías convencionales, basadas en disolventes orgánicos, presentan limitaciones relacionadas con la selectividad del disolvente y la necesidad de etapas adicionales de purificación.

En este contexto, se propone el uso de disolventes supramoleculares (SUPRAS) como estrategia de microextracción multicomponente previa al análisis LC-HRMS. Se desarrolló un método analítico no dirigido basado en detección de sospechosos para la identificación de CECs en 53 muestras de agua de grifo procedentes de 12 países. Se identificaron 33 contaminantes pertenecientes a diferentes clases químicas, incluyendo productos de cuidado personal, estimulantes, filtros UV, tensioactivos, plastificantes, productos de limpieza y compuestos industriales. Los CECs identificados con nivel de confianza $\geq 2B$ fueron semicuantificados y utilizados para llevar a cabo una estimación del riesgo medioambiental y del riesgo para la salud humana. En algunos casos, se obtuvieron coeficientes de riesgo (RQ) superiores a 1, lo que sugiere un riesgo significativo para el medioambiente. Por el contrario, todos los coeficientes de peligro (HQ) fueron inferiores a 1, indicando la ausencia de peligro para la salud humana.

Estos resultados evidencian que la combinación de la microextracción basada en SUPRAS y el análisis no dirigido mediante HRMS constituye una herramienta eficaz para la identificación de contaminantes no legislados y la evaluación de nuevas vías de exposición en entornos urbanos.

Los autores agradecen la ayuda PID2023-149488OB-I00 financiada por MCIU/AEI/10.13039/501100011033/FEDER, UE. L. Muñiz-Bustamante agrade la ayuda PRE2021-096892, financiada por MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y por FSE Invierte en tu futuro. N. Caballero-Casero agradece la ayuda RYC2023-045005-I financiada por MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y por ESF+.

DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA SIN DISOLVENTES PARA EL ANÁLISIS DIRECTO DE SÓLIDOS PARTICULADOS MEDIANTE ESPECTROMETRÍA DE MASAS

Carlos Calero-Cañuelo^a, Rafael Lucena^a, Soledad Cárdenas^a

^a*Affordable and Sustainable Sample Preparation (AS₂P) reseach group, Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Marie Curie, E-14071, Córdoba, Spain
q62calcc@uco.es*

El análisis directo mediante espectrometría de masas (EM) es una estrategia interesante para la determinación de una gran variedad de compuestos.¹ Dentro de las distintas fuentes de ionización, las fuentes basadas en plasma destacan por su gran versatilidad.² En este trabajo, se ha diseñado una interfase que utiliza elementos comerciales para el análisis directo de muestras sólidas particuladas mediante EM. Se han empleado cintas adhesivas que actuaron como sustratos tanto para el muestreo como para la desorción térmica. Además, su capacidad adhesiva, previno la entrada de partículas a espectrómetro de masas protegiéndolo de posibles obstrucciones. La cinta adhesiva que contiene la muestra, se colocó directamente en la interfase utilizando elementos Swagelok para la posterior desorción térmica utilizando una pistola de aire caliente. Los analitos desorbidos térmicamente pasan al interior de la interfase (Soft Ionization by Chemical Reaction In Transfer, SICRIT) gracias al vacío del equipo donde se ionizan para su posterior análisis mediante EM. Un esquema de la interfase se muestra en la Figura 1. La aplicabilidad del método se demostró utilizando la cuantificación directa de cafeína en muestras de café molido y los resultados se compararon con los obtenidos mediante el método oficial. Finalmente, con el objetivo de extender el campo de aplicación, se preparó una mezcla artificial que contenía cuatro drogas de abuso.

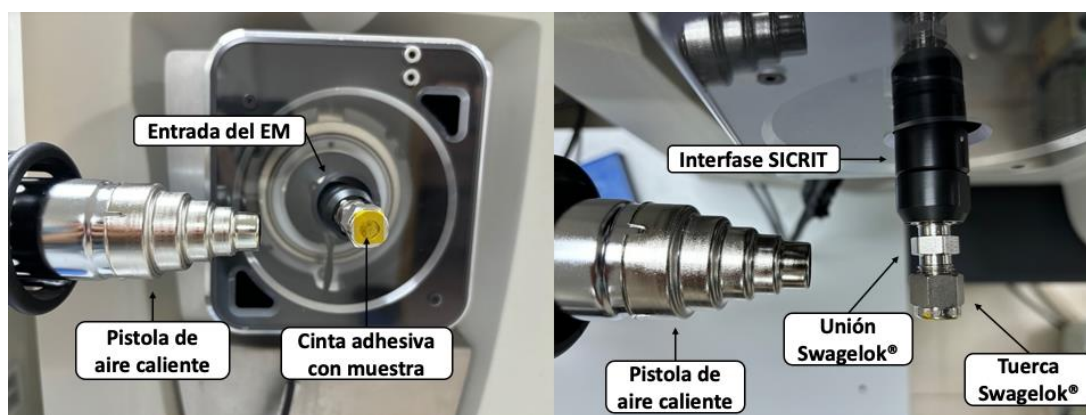


Figura 1. Esquema de la interfase desarrollada desde dos perspectivas diferentes.

Agradecimientos

Se agradece a la subvención PID2023-146313OB-I00, financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033. Carlos Calero-Cañuelo expresa su gratitud al contrato predoctoral (Ref. FPU20/04765) del Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades. Esta comunicación se basa en el trabajo del Grupo de Estudio y Red de Preparación de Muestras apoyado por la División de Química Analítica de la Sociedad Europea de Química.

- (1) Millán-Santiago, J.; Calero-Cañuelo, C.; Lucena, R.; Cárdenas, S. *J Pharm Biomed Anal* 2025, 253, 116535.
- (2) Na, N.; Zhao, M.; Zhang, S.; Yang, C.; Zhang, X. *J Am Soc Mass Spectrom* 2007, 18 (10), 1859–1862.

CONTROL DE LA SELECTIVIDAD MEDIANTE FLUJO CONTINUO: ESTUDIO EN LA VALORIZACIÓN DEL ÁCIDO LEVLÍNICO

Bryan F. Rivadeneira-Mendoza^a, Alina M. Balu^a.

^aDepartamento de Química Orgánica, Universidad de Córdoba, Edificio Marie Curie (C-3), Campus de Rabanales, Ctra. Nnal. IV-A, Km 396, E14014, Córdoba, España
z22rimeb@uco.es

El presente trabajo tiene como objetivo evidenciar las ventajas del uso de sistema en flujo continuo durante la hidrogenación/alquilación del ácido levulínico como reacción modelo. Se desarrolló un catalizador compuesto por nanopartículas de rutenio (Ru) soportadas sobre hidrocarbón funcionalizado con sitios ácidos de Brønsted ($-\text{SO}_3\text{H}$ y $-\text{PO}_3\text{H}_2$). La caracterización mediante espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS) reveló el papel fundamental de las especies O1s y C1s en la dispersión de las nanopartículas metálicas y en el anclaje de los grupos funcionales $-\text{SO}_3\text{H}$ y $-\text{PO}_3\text{H}_2$, respectivamente. La implementación del proceso en condiciones de flujo continuo permitió corroborar que los sitios ácidos de Brønsted favorecen las reacciones de esterificación, mientras que el Ru en estado metálico actúa como centro activo en la etapa de hidrogenación. Bajo estas condiciones, se lograron conversiones superiores al 99% y selectividades mayores al 75% hacia γ -valerolactona, levulinato de metilo y pentanoato de metilo. Los resultados obtenidos ponen de manifiesto la capacidad del sistema de flujo continuo para modular la selectividad del proceso, así como la importancia de la robustez del catalizador para garantizar una producción eficiente y sostenida.

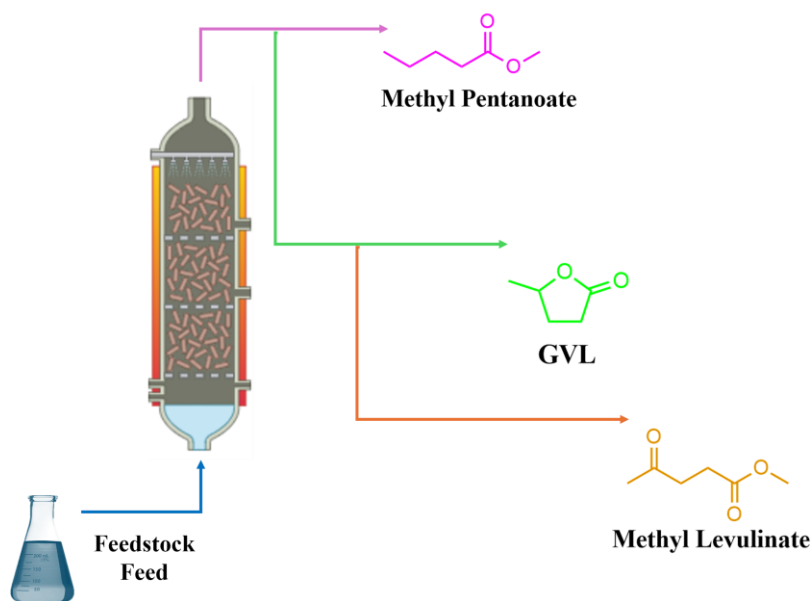


Figura 1. Esquema de valorización del ácido levulínico en reactor de flujo continuo

Agradecimientos

B.F.R-M acknowledges funding from the European Commission's Horizon Europe Research and Innovation program through the Marie Skłodowska-Curie doctoral network (101073089, GreenDigiPharma).

VALORIZACIÓN DE LA BIOMASA VITIVINÍCOLA PARA PRODUCIR MATERIAL CARBONOSO PARA APLICACIONES ENERGÉTICAS

Cristina Hermoso^a, Vicente Montes^b, Ana Rey^c, Andrés Álvarez^d, Juan Félix González^a

^aDepartamento de Física Aplicada, Universidad de Extremadura

^bDepartamento de Química Orgánica, Universidad de Córdoba

^cDepartamento de Ingeniería Química, Universidad de Extremadura

^d Departamento de Didáctica de Ciencias Experimentales y matemáticas, Universidad de Extremadura
chermoso@unex.es

El aprovechamiento de residuos agroindustriales mediante la implantación de una biorrefinería es un proceso con gran literatura científica y comercial. En algunos casos, la biomasa obtenida a partir de diversos procesos productivos en diferentes sectores industriales se destina a su aplicación como compost (biofertilizante) cuyo valor comercial es bajo (50€/toneladas)¹. Por lo que el objetivo de este estudio es explorar la producción de materiales carbonosos como supercondensadores, ya que esta aplicación tiene un valor económico mayor. Estos materiales carbonosos tienen propiedades específicas en términos de conductividad, estabilidad y capacidad de almacenamiento que hace que sean idóneos para aumentar el rendimiento y eficiencia de los sistemas de almacenamiento de energía².

La parte experimental se inició con subproductos del sector vitivinícola, lo que permite extrapolar estos resultados a otros sectores agrícolas. Para obtener materiales carbonosos para aplicaciones energéticas, se emplearon diferentes métodos de producción, como la carbonización hidrotérmica (HTC), pirólisis y activación química con agentes activantes como KOH y CO₂.

Se compararon los rendimientos de los materiales carbonosos y se realizaron diversos análisis para caracterizar su aplicación como supercondensadores mediante análisis elemental, espectroscopia Raman e isoterma de adsorción, concluyendo que los mayores rendimientos corresponden a la carbonización hidrotérmica en comparación con el resto de técnicas. En particular, la pirólisis presenta un aumento de rendimiento a la temperatura de 600°C respecto de las temperaturas más alta (800°C y 1400°C). En cuanto a la activación química, se observan rendimientos muy bajos respecto al resto de métodos.

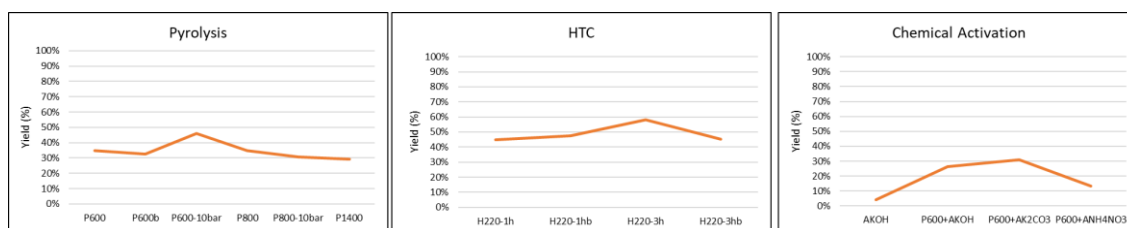


Figure 1. Rendimientos de los materiales carbonosos

Referencias

- (1) Chen, Y.; Wang, X.; Wang, X. Recent Advances in Biomass Waste Derived Carbon Materials for Supercapacitors: A Review. *Energy Technology* **2024**, 12 (6). <https://doi.org/10.1002/ente.202301436>.
- (2) Cesaro, A.; Conte, A.; Belgiorno, V.; Siciliano, A.; Guida, M. The Evolution of Compost Stability and Maturity during the Full-Scale Treatment of the Organic Fraction of Municipal Solid Waste. *J Environ Manage* **2019**, 232, 264–270. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2018.10.121>.

Agradecimientos

The author thanks to ROBOCOOP-EU project, supported by the Circular Bio-based Europe Joint Undertaking and its members, with reference number 101112407. Also to Junta de Extremadura and Feder fund through the project IB20042.

A PREBIOTIC-PROBIOTIC STRATEGY FOR FUNCTIONAL FOOD DEVELOPMENT USING AVOCADO CROP RESIDUES

**Andrea Lucena^{a,b}, Ramón Morcillo-Martín^a, Alejandro Rodríguez^a, Eduardo Espinosa^a,
Fernando Pérez-Rodríguez^b**

^aBioPrEn Group (RNM-940), Chemical Engineering Department, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Faculty of Science, Universidad de Córdoba, 14014 Córdoba, Spain.

^bDepartment of Food Science and Technology, UIC Zoonosis y Enfermedades Emergentes ENZOEM, ceiA3, Universidad de Córdoba, 14014, Córdoba, Spain.
b52luopa@uco.es

Avocado (*Persea americana*) crops generate significant waste streams, including pruning residues and leaves, which represent underutilized sources of bioactive compounds. This study explores the valorisation of avocado agro-waste through the generation of functional food ingredients, based on the synergy between prebiotic substrates, hemicelluloses and polyphenols, and probiotic lactic acid bacteria (LAB) naturally present in these by-products.

Firstly, microwave-assisted extraction (MAE) of avocado leaves yielded polyphenol-rich extracts, which exhibited selective antimicrobial activity against foodborne pathogens (*Listeria monocytogenes* and *Staphylococcus aureus*) without inhibiting LAB growth. This highlights their potential as selective prebiotics, capable of promoting the survival of probiotic LAB strains.

Simultaneously, hemicelluloses extracted from pruning residues using autohydrolysis and subsequently fractionated by tangential flow filtration into four molecular weight ranges (Mw) ranges: <1, 8-1, 50-8 and >50 kDa. These fractions were subjected to fermentability test with LAB strains. The results revealed that the lower Mw fractions (<1, 8-1 and 50-8 kDa) provided higher growth stimulation of LAB, attributed its favourable carbohydrate composition and higher accessibility. Notably, these oligosaccharides were not metabolised by foodborne pathogens reinforcing their potential as selective prebiotics.

These results demonstrate the dual functionality of avocado-derived polyphenols and hemicelluloses as prebiotics acting as selective substrates that stimulate the growth of beneficial and probiotic LAB strains while suppressing undesired microbial competitors.

This study lays the foundation for the design of advanced encapsulation platforms combining both fractions (prebiotics) and selected LAB (probiotics), with the aim of enhancing their stability, targeted intestinal delivery, and overall functional performance in food applications. This strategy aligns with circular bioeconomy principles, promoting waste valorisation, gut health, and sustainable innovation in the agri-food sector.

Keywords: Avocado agro-waste; Hemicelluloses; Polyphenols; Lactic acid bacteria (LAB); Prebiotics; Probiotics; Functional foods; Bioeconomy

APROVECHAMIENTO DE SUBPRODUCTOS DEL OLIVAR EN PANIFICACIÓN: EVALUACIÓN DEL METABOLISMO FENÓLICO EN HUMANOS TRAS EL CONSUMO DE PAN ENRIQUECIDO

Ana Castillo^{a,b,c,d,e}, M^aMar Bueno^{a,b,c,d,e}, Carlos Augusto Ledesma-Escobar^{a,b,c,d,e}, Feliciano Priego^{a,b,c,d,e}

^aDepartamento Química Analítica, Campus Rabanales, Universidad de Córdoba, Córdoba, España.

^bInstituto Químico para la Energía y el Medioambiente (iQUEMA), Campus Rabanales, Universidad de Córdoba, Córdoba, España.

^cInstituto Maimónides de Investigación Biomédica de Córdoba (IMIBIC), Hospital Universitario Reina Sofía, Córdoba, España.

^dCampus de Excelencia Internacional Agroalimentario (ceiA3), Universidad de Córdoba, Córdoba, España.

^eConsorcio de Investigación Biomédica en Fragilidad y Envejecimiento Saludable, CIBERFES, Instituto de Salud Carlos III, España.

t72calua@uco.es; feliciano.priego@uco.es

Actualmente, el aprovechamiento de los subproductos generados en el olivar es considerado fundamental para la industria oleícola. Entre los residuos mayoritarios generados se encuentra el alperujo, una mezcla de residuos obtenidos tras la extracción del aceite de oliva en las almazaras. Debido a su elevado poder contaminante, existe una actual tendencia basada en su aprovechamiento con diferentes fines. Diversas investigaciones han estudiado sus beneficiosas características, destacando entre ellas, su elevado contenido de compuestos bioactivos como es el caso de los compuestos fenólicos. Múltiples estudios han remarcado la importancia de la extracción de estos compuestos con el objetivo de reutilizarlos en la elaboración de otros productos debido a sus propiedades bioactivas.

En este estudio se han elaborado harinas a partir de masa de aceituna obtenida una vez extraído aceite de oliva virgen extra (AOVE) de diferentes cultivares (Arbosana, Koroneiki y Arbequina). Para ello, la masa fue liofilizada inmediatamente para eliminar el contenido en humedad y molturada hasta la obtención de un polvo fino. Esta harina fue mezclada en diferentes proporciones (5, 10 y 20%) con harina de trigo para elaborar pan. Además, se llevó a cabo un estudio de reproducibilidad con un cultivar adicional, Sikitita, para determinar la variabilidad del proceso de panificación sobre el contenido fenólico. El contenido fenólico de los panes elaborados con la harina procedente de diferentes cultivares fue analizado mediante extracción sólido-líquido y LC-QTOF MS/MS. De esta forma, se ha podido establecer el efecto varietal y la influencia del porcentaje de harina de pasta de aceituna utilizada sobre el contenido fenólico. La comparativa entre los perfiles fenólicos de los extractos de harina de pasta de aceituna y de los panes también permitió evaluar el efecto de la temperatura de horneado (180°C).

Los panes elaborados fueron ingeridos semanalmente por un grupo de voluntarios a los que se le recogió la orina a la mañana siguiente a la ingesta. El análisis de la orina mediante LC-QTOF MS/MS ha permitido comprobar el incremento en el contenido de metabolitos derivados de compuestos fenólicos en la orina tras la ingesta de los panes e identificar metabolitos generados a partir de metabolismo en fase I y II, así como metabolitos derivados de la microbiota. Las principales especies encontradas en las muestras de orina fueron derivados glucurónidos y sulfatos, destacando por tanto el metabolismo en fase II.

Referencias:

1. Tirado, D. F., de la Fuente, E., & Calvo, L. *Journal of Food Engineering*, **2019**, 263, 409416.
2. Castillo-Luna, A., Ledesma-Escobar, C. A., Gómez-Díaz, R., & Priego-Capote, F. *Food Chemistry*, **2022**, 395, 133585.

LiFePO₄: UN CÁTODO DE BATERÍAS LI-ION PARA RECICLAR LITIO PROCEDENTE DE BATERÍAS GASTADAS

Alejandro López-Chías^a, Álvaro Caballero^a, Rafael Trócoli^a

^aDepartamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química. Instituto Químico de Energía y Medio Ambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, 14014 Córdoba, España.
q82locha@uco.es

En los últimos años, la producción global de litio ha aumentado de forma significativa impulsada por la creciente demanda de baterías de iones de litio (LIBs), especialmente en aplicaciones relacionadas con la electrónica de consumo y los vehículos eléctricos¹. Este crecimiento ha motivado a la Comisión Europea a establecer objetivos estratégicos en materia de sostenibilidad, entre los cuales destaca la obligación de recuperar al menos el 50% del litio contenido en baterías al final de su vida útil para el año 2027, y su posterior reutilización en la síntesis de materiales catódicos a partir de 2030². En la actualidad, los procesos industriales de reciclaje de LIBs se basan fundamentalmente en métodos pirometalúrgicos e hidrometalúrgicos, orientados principalmente a la recuperación de metales como el níquel y el cobalto, mostrando. Sin embargo, estos métodos presentan importantes limitaciones en cuanto a la eficiencia en la recuperación del litio³. En este trabajo se presenta un método electroquímico innovador, basado en la tecnología de bombeo de iones, para la extracción selectiva de litio a partir de baterías gastadas. El proceso se fundamenta en el uso de materiales catódicos como la olivina LiFePO₄, capaz de intercalar de forma preferente iones litio en su estructura cristalina, permitiendo que el resto de los metales presentes como el níquel y el cobalto permanezcan en disolución. La selectividad del método, así como sus parámetros operativos, fueron analizados mediante medidas galvanostáticas y el análisis cuantitativo por espectrometría de masas de los electrolitos obtenidos (Figura 1). Los resultados alcanzados evidencian que esta tecnología permite recuperar litio con una pureza superior al 98 % en un tiempo de operación de únicamente 120 minutos.

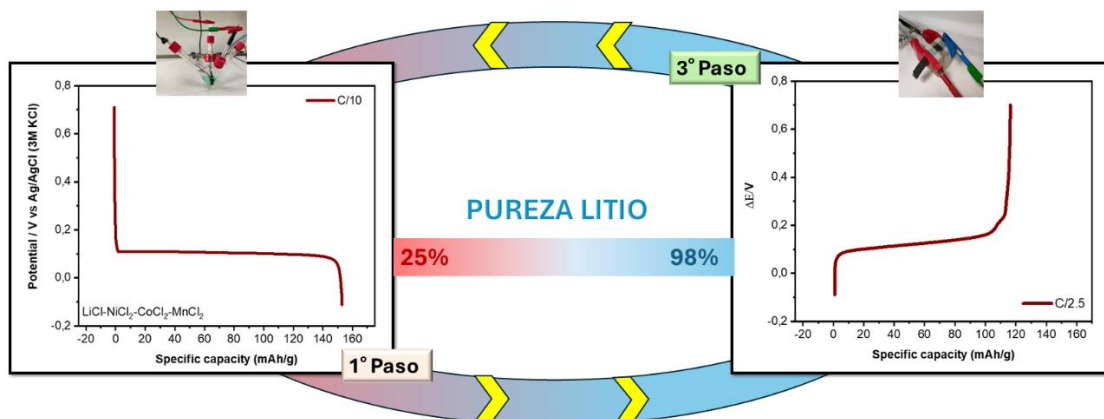


Figura 1. Recuperación de litio de una batería NMC gastada mediante LiFePO₄. (1º paso) Etapa de captura y (3º paso) liberación de litio.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Junta de Andalucía la financiación a través Emergía_0153 y Project Excel_00330, así como al Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades mediante los proyectos "TED20213129314 A-100", PID2022-142391OA-100, y RYC2022-037564 financiadas por el MCI/AEI// 10.13039/501100011033 y European Union NextGenerationEU/ PRTR, FEDER a way of making Europe and the FSE invest in your future.

Referencias

- (1) Dunn, B.; Kamath, H.; Tarascon, J.-M. *Science* **2011**, 334 (6058), 928–935..
- (2) EPRS | European Parliamentary Research Service.
- (3) Kim, S.; Kim, J.; Kim, S.; Lee, J.; Yoon, J. *Environ. Sci.: Water Res. Technol.* **2018**, 4 (2), 175–182.

SUSTAINABLE EXTRACTION OF BIOACTIVE COMPOUNDS FROM AGRO-INDUSTRIAL BIOMASS FOR THE DEVELOPMENT OF DUAL PACKAGING SYSTEMS

Henares, M.^a, Rincón, E.^a, Rodríguez, A.^a, Espinosa, E.^a

^a BioPrEn Group (RNM-940), Chemical Engineering Department, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Faculty of Science, Universidad de Córdoba, 14014 Córdoba, Spain
t82heolm@uco.es

La creciente necesidad de implementar procesos sostenibles en la valorización de residuos agroalimentarios ha impulsado la investigación en tecnologías de extracción respetuosas con el medio ambiente, orientadas a la obtención de compuestos bioactivos con alto valor añadido. En este contexto, los Disolventes Eutécticos Profundos (DES) se han consolidado como una alternativa prometedora a los disolventes orgánicos gracias a su bajo impacto ambiental, su capacidad de ajuste molecular y su eficacia para solubilizar compuestos funcionales.

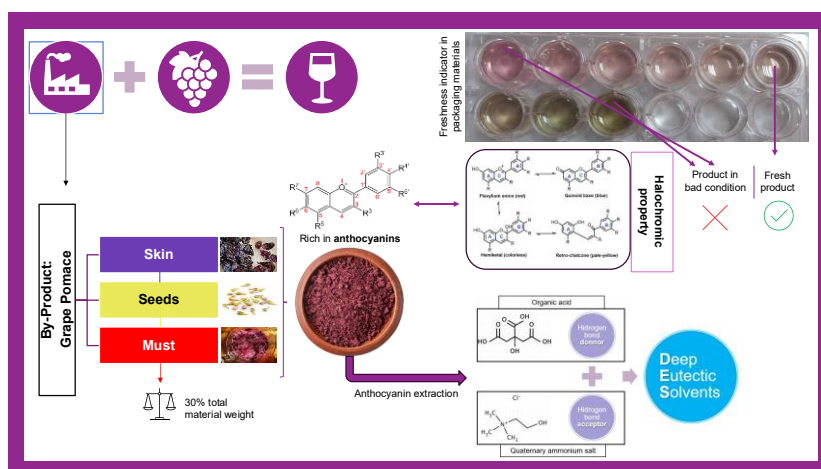
Este trabajo se centra en el desarrollo de sistemas de extracción sostenibles a partir de hollejo de uva, formulando un total de 27 DES mediante la combinación de cloruro de colina como aceptor de enlaces de hidrógeno, con tres ácidos orgánicos—cítrico, oxálico y láctico—como donadores, en distintas proporciones molares (1:1, 2:1, 1:2) y contenidos de agua (25, 50, 70%) cada uno. Tras el proceso de extracción por maceración asistida y aislamiento mediante resinas adsorbentes, los extractos se caracterizaron en términos de contenido fenólico total (TPC), actividad antioxidante (ABTS) y contenido total de antocianinas (TAC), siendo estos últimos compuestos con potencial aplicación en envases activos e inteligentes.

Los resultados fueron comparados con los obtenidos empleando solventes orgánicos.

Con el fin de reforzar la aplicabilidad real de estos sistemas, se incorporaron tres nuevos parámetros de evaluación:

1. Estabilidad de los extractos en condiciones de almacenamiento, analizando la retención de sus propiedades funcionales a lo largo del tiempo;
2. Reusabilidad de los disolventes, valorando la eficiencia extractiva tras sucesivos ciclos de uso, en línea con los principios de economía circular;
3. Comportamiento halocrómico de los extractos, evaluando su respuesta cromática frente a variaciones de pH simuladas, con vistas a su integración como indicadores visuales de frescura.
4. MIC/MBC de los extractos, frente a microorganismos patógenos relacionados con alimentos, tales como *Escherichia coli*, *Salmonella*, *Staphylococcus aureus* y *Listeria monocytogenes*; o alterantes, como ciertas especies de hongos.

Este enfoque integral no solo permite optimizar la eficiencia de extracción y la recuperación de compuestos bioactivos, sino que abre nuevas posibilidades para el diseño de materiales de envasado inteligentes, biodegradables y funcionales, basados en la valorización de residuos vegetales y en el uso de tecnologías limpias.



SENSORES METÁLICOS PARA LA MONITORIZACIÓN REMOTA DE LA EFICACIA DE TRATAMIENTOS IMPERMEABILIZANTES EN MATERIALES DE BASE CEMENTO

D. Caballero, F. Tavares, S. da Rocha Gomes, M. Cruz-Yusta, M. Sánchez

*^aDepartamento de Química Inorgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus Universitario de Rabanales, 14014, Córdoba, España.
Q62caard@uco.es*

El hormigón armado, debido a su naturaleza porosa, permite la penetración de agua procedente del entorno circundante en su matriz interna. Esta infiltración acuosa conlleva una progresiva disminución de las propiedades del material, así como una reducción significativa de su vida útil. La situación se agrava particularmente cuando el agua contiene sustancias disueltas potencialmente agresivas, tales como cloruro, que pueden acelerar el proceso de corrosión de las armaduras metálicas embebidas en el hormigón. Este deterioro no solo afecta negativamente a la integridad estructural, sino que también implica consecuencias económicas y medioambientales relevantes, dado el elevado número de infraestructuras construidas con este material que requieren intervenciones periódicas de mantenimiento y reparación.

Con el objetivo de mitigar los efectos nocivos derivados de la penetración de agua en el hormigón armado, se han desarrollado diversas estrategias, entre las que destaca la incorporación de aditivos hidrofugantes. Estos compuestos, al ser añadidos a la mezcla, actúan reduciendo la absorción de agua y mejorando así la durabilidad del material.

En el presente trabajo se propone una metodología innovadora que combina el uso de dichos aditivos con la integración de sistemas remotos de monitorización en tiempo real, mediante sensores metálicos embebidos en el interior del hormigón y uso de tecnología IoT. Esta aproximación permite no solo el seguimiento continuo del estado del material, sino también la evaluación de la eficacia de los tratamientos hidrofugantes aplicados. La monitorización se llevó a cabo mediante la incorporación de cuatro sensores metálicos por probeta, alojados a diferentes profundidades, lo que permite observar la respuesta independiente de cada uno de ellos frente al avance del agua.

Para la validación experimental de esta propuesta, se evaluó la eficacia de cinco tratamientos hidrofugantes respecto a una formulación de un mortero de referencia convencional. Cuatro de estos aditivos son comerciales (Penetron Admix, Sikatell-250, Sikagard-705 L y Krystaline Add Plus 2.5), mientras que el aditivo basado en un hidróxido doble laminar intercalado con oleato de sodio se sintetizó en laboratorio. Las pruebas de absorción capilar se realizaron sobre probetas cúbicas de pequeño tamaño (4×4×4 cm), elaboradas todas con la misma cantidad de aditivo, así como idéntica relación arena/cemento y agua/cemento. Se elaboraron múltiples probetas por cada formulación, algunas de las cuales fueron sometidas a ensayos convencionales de absorción capilar mediante pesada manual, mientras que el resto, equipadas con sensores internos, fueron expuestas al mismo nivel de agua para evaluar la respuesta de los sensores ante la entrada de humedad.

Asimismo, se llevaron a cabo caracterizaciones del estado fresco de las mezclas mediante ensayos de escurrimiento, penetración con aguja de Vicat y mediciones con un equipo de pulsos ultrasónicos. Tras 28 días de curado, se detuvo el proceso de fraguado de las muestras, las cuales fueron posteriormente analizadas utilizando diversas técnicas de caracterización de materiales. Entre estas se incluyeron la difracción de rayos X (DRX), el análisis termogravimétrico (TGA), la espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FT-IR) y la microscopía electrónica de barrido (SEM). Adicionalmente, se realizaron ensayos de calorimetría isotérmica y porosimetría por intrusión de mercurio, técnica especialmente útil para establecer la correlación entre la distribución de poros y la permeabilidad del material frente al agua.

Agradecimientos: Este trabajo ha sido financiado gracias al Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades mediante la concesión del proyecto TED2021-132610B-I00.

ECO-FRIENDLY BIOPOLYMER COATINGS FOR CORROSION RESISTANCE IN OFFSHORE

Y. Y. Plasencia-Cerdeña^a, E. Hernaez^a, L. Ruiz-Rubio^{a,b}

^a*Innovative Macromolecular Materials (Imacromat), Dpto. de Química Física, Universidad del País Vasco UPV/EHU, 48940 Leioa, Spain.*

^b*Basque Center for Materials, Applications and Nanostructures, UPV/EHU Science Park, 48940 Leioa, Spain.*

yerayyuri.plasencia@ehu.eus

The main objective of this research is the development of sustainable, bio-based epoxy composite coatings aimed at protecting steel structures against corrosion and biofouling in offshore environments. While steel remains one of the most widely used materials in construction and energy infrastructure due to its excellent mechanical strength and cost-effectiveness¹, it is particularly vulnerable to corrosion in marine conditions². Offshore environments are especially aggressive due to the combined presence of high salinity, dissolved oxygen, and electrical conductivity, which together accelerate electrochemical degradation processes³.

To address these challenges, bio-epoxy thermoset resin systems were formulated by reacting epoxidized soybean oil (ESO) with tannic acid (TA) under controlled epoxy-to-hydroxyl molar ratios⁴. These bio-derived components were selected not only for their renewable origin, but also for their intrinsic antioxidant properties and hydrophobic character, which contribute to the formation of an effective passive barrier against moisture and ionic transport. In alignment with circular economy principles, industrial demoulding waste rich in bentonitic clay was incorporated as a low-cost, functional filler, providing both mechanical reinforcement and potential ion-scavenging capacity.

The anticorrosion performance of the developed coatings was assessed using electrochemical impedance spectroscopy (EIS). The results showed impedance moduli ranging from $10^{5.5}$ to $10^9 \Omega \cdot \text{cm}^2$, surpassing the widely accepted threshold of $10^6 \Omega \cdot \text{cm}^2$ for efficient corrosion protection coatings in most formulations. These findings confirm the potential of the system as a durable, bio-based alternative to conventional petrochemical coatings.

Future work is directed toward enhancing the multifunctionality of the coatings by incorporating layered double hydroxides (LDHs) and organically modified montmorillonite, which are known to improve both barrier performance and active corrosion inhibition through ion exchange and controlled release mechanisms. Additionally, lignin and algae-derived polyphenols are being investigated as green curing agents and multifunctional additives, due to their UV-blocking, antioxidant, and chelating properties, which may further stabilize the coating under environmental stress.

- (1) Ramezanzadeh, M.; Bahlakeh, G.; Ramezanzadeh, B.; Rostami, M. Mild Steel Surface Eco-Friendly Treatment by Neodymium-Based Nanofilm for Fusion Bonded Epoxy Coating Anti-Corrosion/Adhesion Properties Enhancement in Simulated Seawater. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry* **2019**, *72*, 474–490.
- (2) Wang, D.; Bierwagen, Gordon. P. Sol–Gel Coatings on Metals for Corrosion Protection. *Prog Org Coat* **2009**, *64* (4), 327–338.
- (3) Speight, J. G. Corrosion. In *Subsea and Deepwater Oil and Gas Science and Technology*; Elsevier, 2015; pp 213–256.
- (4) Teijido, R.; Ruiz-Rubio, L.; Lanceros-Méndez, S.; Zhang, Q.; Vilas-Vilela, J. L. Sustainable Bio-Based Epoxy Resins with Tunable Thermal and Mechanic Properties and Superior Anti-Corrosion Performance. *Polymers (Basel)* **2023**, *15* (20), 4180.

INTEGRATED ELECTROCATALYTIC UPCYCLING OF PLASTIC WASTE WITH CO₂ REDUCTION

Raúl Rojas-Luna^{a,c}, Lewis S. Cousins^b, Rhiannon Germaney^a, Dolores G. Gil-Gavilán^c, Miguel Castillo-Rodríguez^c, Dora-Alicia Garcia Osorio^b, Thomas Doughty^a, Dolores Esquivel^c, Charles E. Creissen^b, Souvik Roy^a

^aDepartment of Chemistry, School of Natural Sciences, University of Lincoln, Green Lane, Lincoln LN6 7DL, U.K.

^bSchool of Chemical and Physical Sciences, Keele University, Staffordshire, ST5 5BG, UK.

^cDepartamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Facultad de Ciencias, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Marie Curie, 14071 Córdoba, Spain
rrojas-luna@lincoln.ac.uk

The escalating energy crisis, environmental degradation, and climate change have intensified the need for sustainable solutions to address global challenges.^{1,2} Developing effective approaches to capture and transform carbon-based waste materials (i.e. plastics, biomass, and carbon dioxide) into valuable chemicals and fuels has become critically important. In this context, electrocatalysis has emerged as a sustainable and promising alternative to alleviate environmental and energy issues. Particularly, the development of coupled electrolyzers combining CO₂ and PET-plastic waste electroreforming represent a powerful tool to produce storable and valuable chemical feedstock as resources by using the electrons derived from the oxidation of an organic substrate, reducing at the same time the higher energy requirements of a less thermodynamically favourable reaction of the conventional oxygen evolution reaction (OER).³ Herein, we present an integrated system for electrocatalytic upcycling of polyethylene terephthalate (PET) plastic hydrolysate, comprising ethylene glycol and potassium terephthalate, coupled with CO₂ reduction in a dual-electrolyser configuration. Ethylene glycol oxidation (EGOR) to formate is driven by cobalt oxyhydroxide species derived from structural reconstruction of a cobalt-based metal-organic framework (Co-MOF-74), lowering the required potential by 0.23 V compared to the conventional OER at a current density of 100 mA cm⁻². A CO₂ electrolyser was assembled by integrating a cobalt-phthalocyanine based cathode, showing combined Faradaic efficiency of 156% at a cell voltage of 1.6 V. The analogous CO₂-fed flow cell, operates at 75 mA cm⁻² current density with a required cell voltage of ~2.3 V. This work demonstrates a viable approach for coupling waste plastic oxidation with CO₂ reduction, highlighting the potential of post-synthetic MOF reconstruction strategies to develop efficient electrocatalysts for waste-to-value chemical upcycling.

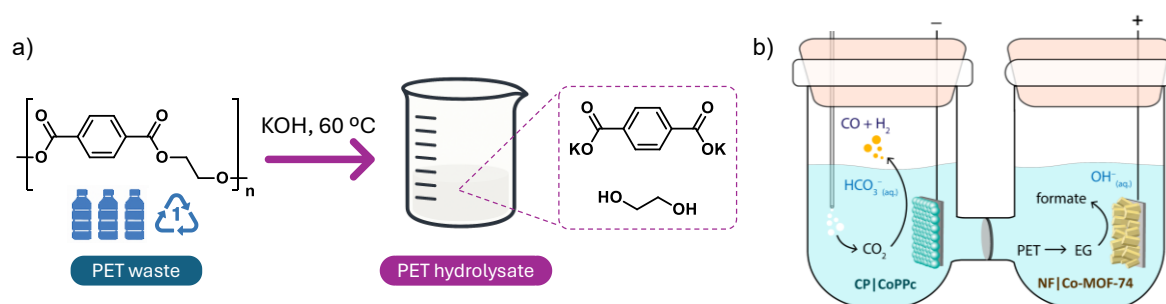


Figure 1. (a) Chemical depolymerisation of PET waste via alkaline hydrolysis. (b) Schematic representation of the CO₂ electrolyser integrated with PET electroreforming.

¹ *Nature*, **2019**, 575 (7781), 87–97

² *Science*, **2021**, 373 (6550), 61–65

³ *Fuel*, **2024**, 367, 131408

HTC PARA LA SÍNTESIS DE CARBONES ACTIVADOS A PARTIR DE CAÑA COMÚN Y SU APLICACIÓN EN LA ELIMINACIÓN DE HERBICIDAS

Beatriz Ledesma Cano^a, Isabel Pestana da Paixão Cansado^{b,c}, Sílvia Román Suero^a, Paulo A.M. Mourão^c

^aUniversidade de Extremadura, Avda. de Elvas s/n, Badajoz, 06006

^bLAQVREQUIMTE, Instituto de Investigação e Formação Avançada, Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho n.º 59, 7000-671 Évora, Portugal.

^cMED, Instituto de Investigação e Formação Avançada, Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho n.º 59, 7000-671 Évora, Portugal.
beatrizlc@unex.es

En el presente trabajo se evalúa el aprovechamiento de la caña común (*Arundo donax*), una especie invasora con alto potencial como biomasa lignocelulósica, para la obtención de carbones activados (CA) mediante un proceso de carbonización hidrotérmica (HTC) y activación térmica con dióxido de carbono (CO₂). Esta propuesta se enmarca en los principios de la economía circular, al permitir valorizar un residuo vegetal abundante y problemático.

La caña fue recolectada, triturada y tamizada (2,38–3,35 mm) antes de someterla a HTC en un reactor cerrado a temperaturas de 200, 220 y 240 °C, generando un sólido carbonoso denominado hidrochar. Este fue posteriormente activado con CO₂ para desarrollar su porosidad y convertirlo en un adsorbente eficaz. El carbón activado resultante fue caracterizado mediante espectroscopía FTIR, punto de carga cero, análisis de adsorción de nitrógeno a 77 K y microscopía electrónica de barrido (SEM), revelando una estructura predominantemente microporosa con superficie específica superior a 1100 m²/g.

El estudio experimental se completó con ensayos de adsorción en disolución acuosa, empleando como contaminantes modelo los herbicidas MCPA (ácido 2-metil-4-clorofenoxiacético) y 2,4-D (ácido 2,4-diclorofenoxiacético), frecuentes en aguas agrícolas. Los resultados demostraron una elevada eficacia del material en la eliminación de ambos compuestos, con isotermas de adsorción que se ajustaron principalmente al modelo de Langmuir (se presenta la adsorción con MCPA a modo de ejemplo), y una cinética que seguía un modelo de pseudo-primer orden. Además, se realizaron estudios dinámicos en columna de lecho fijo, donde las curvas de ruptura obtenidas mostraron un comportamiento consistente con los modelos de Thomas y Yoon-Nelson, permitiendo estimar tiempos de ruptura y capacidad de adsorción útil para futuras aplicaciones a escala piloto.

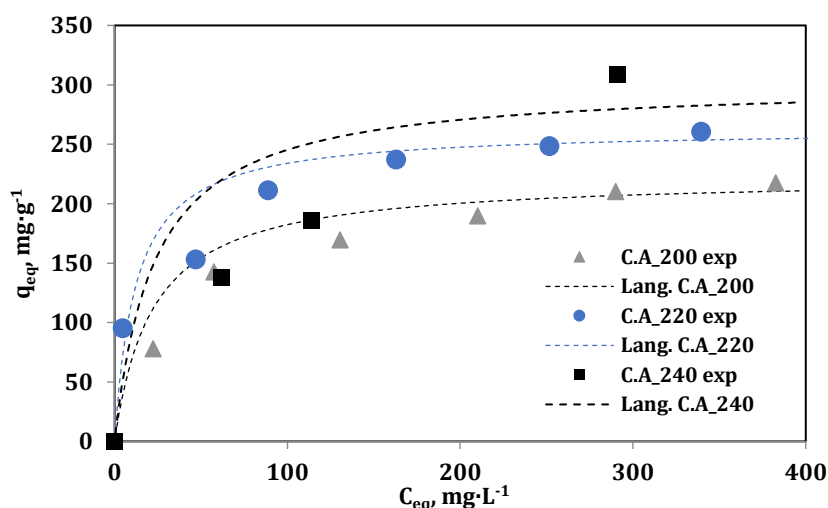


Figura 1. Isotermas de adsorción en fase líquida del compuesto MCPA

Las principales conclusiones que pueden extraerse de que estos resultados posicionan a la caña común como un recurso prometedor para la producción sostenible de materiales adsorbentes, siendo una solución eficiente para la eliminación de contaminantes emergentes en aguas.

SENSORES ELECTROQUÍMICOS BASADOS EN TECNOLOGÍAS 3D PARA LA MONITORIZACIÓN DE PLAGUICIDAS

José Romero López, Miriam Chávez, Ángela Fernández-Merino, Manuel Blázquez, Teresa Pineda, Rafael Del Caño

*Dep. Química Física y Termodinámica Aplicada, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente, Universidad de Córdoba, E-14014, Spain.
f82roloj@uco.es*

La reciente aparición de nuevas variantes de métodos de fabricación basados en impresión 3D ha derivado en la *democratización* de esta tecnología, ya que las máquinas y materiales son cada vez menos costosos, además de aumentar continuamente el catálogo de materiales de partida comerciales. Así, es cada vez más común encontrar impresoras 3D en empresas y en hogares particulares, ya que aportan una solución simple, económica y accesible para el desarrollo de múltiples objetos y dispositivos. De entre las distintas modalidades de impresión, el Modelado por Filamento Fundido (FDM, del inglés Fusion Deposition Modeling) está entre las más atractivas a nivel usuario, encontrando un gran catálogo de filamentos disponibles con múltiples características, como ser eléctricamente conductores, presentar excelentes propiedades mecánicas, biocompatibilidad o resistencia química, entre otras. En base a esto, la FDM ofrece soluciones integrales a múltiples escenarios gracias a su fácil manejo, bajo coste y rapidez, siendo cada vez más popular en la investigación fundamental y aplicada, desarrollando mediante esta tecnología dispositivos atractivos en el ámbito energético, el medioambiente y la salud, entre otros.ⁱ

En este trabajo se diseñan y fabrican mediante impresión 3D FDM dispositivos electroquímicos de uso potencial como sensores para la detección compuestos dañinos para el medioambiente, relacionados con la salud y que afecten al bienestar social. Se desarrollaron plataformas electroquímicas (3DPEs) robustas, demostrando la posibilidad de obtener dispositivos de manera rápida y reproducible, demostrando la eficacia de la tecnología propuesta. La caracterización de estas plataformas se realiza empleando técnicas electroquímicas y de caracterización superficial.

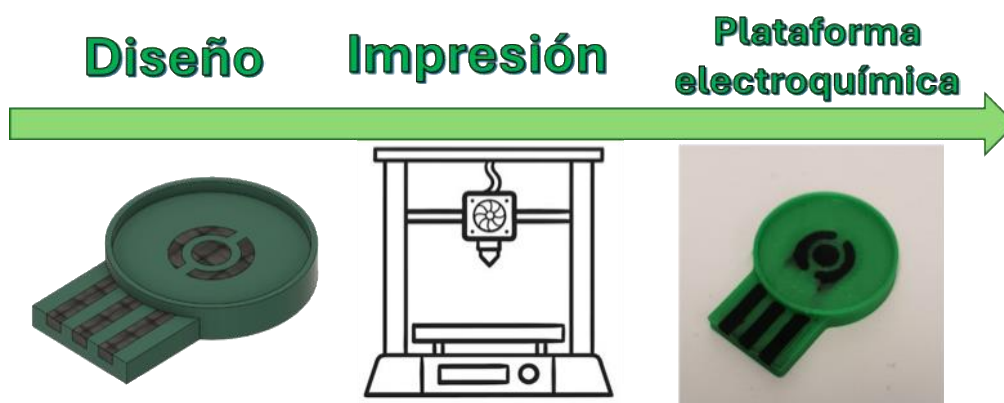


Figura 1. Proceso de diseño, impresión y fabricación de la plataforma electroquímica final.

Ministerio de Ciencia e Innovación (Project RED2022-134120-T Red de Excelencia de Sensores y Biosensores electroquímicos), Programa FEDER Andalucía 2021–2027, Consejería de Universidad, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía (PP2F_L1_09) y Universidad de Córdoba.

ⁱ Referencia Khosravani, M. R.; Reinicke, T. *Sens. Actuators A: Phys* **2020**, 305, 111916.

NEW INSIGHTS ON THE USE OF MICROBIAL VOLATILE ORGANIC COMPOUNDS AS POTENTIAL BIOPESTICIDES AGAINST PLANT PATHOGENS

Carlos Navarro-Laguna^a, María José Cardador^b, Carmen Ruiz-Roldán^a, Lourdes Arce^b.

^aDepartamento de Genética, CeIA3, Campus de Rabanales, Universidad de Córdoba. 14071, Córdoba.

^bDepartamento de Química Analítica, Instituto de Química para la Energía y el Medio Ambiente (IQUEMA), CeIA3, Campus de Rabanales, Universidad de Córdoba. 14071, Córdoba.
b72nalac@uco.es

Plant pathogens are a major threat to global agriculture, responsible for significant yield losses and economic damage. Fungal pathogens are particularly detrimental, accounting for up to 14% of annual crop losses and representing the most prevalent group among plant-infecting organisms. One of the most destructive fungal phytopathogens is *Fusarium oxysporum*, a soil-borne fungus that causes vascular wilt diseases in a wide range of plant species. A well-known forma specialis, *F. oxysporum* f. sp. *lycopersici* (FOL), infects tomato (*Solanum lycopersicum*), a crop of considerable economic importance worldwide.

To manage FOL infections, chemical fungicides are commonly applied, particularly through seed treatment. However, the continuous and intensive use of these synthetic compounds has led to several critical issues, including the emergence of resistant pathogen strains, environmental pollution, food safety concerns, and negative impacts on non-target and beneficial microorganisms. These challenges underscore the pressing need for sustainable and environmentally friendly alternatives for crop protection.

Biological control agents (BCAs) have emerged as promising tools for integrated pest and disease management. BCAs can suppress pathogens through various mechanisms, including the production of volatile organic compounds (VOCs). These low-molecular-weight compounds have demonstrated multiple beneficial effects, such as direct inhibition of pathogenic growth, induction of systemic resistance in plants, and promotion of plant growth. As a result, VOC-mediated biocontrol is gaining attention as a viable alternative to chemical-based strategies.

Pseudomonas simiae PICF7 is a root endophytic bacterium originally isolated from olive (*Olea europaea* L.) roots. This strain has been extensively studied and shown to exert beneficial effects not only in olive but also in other taxonomically unrelated plant species.¹ Notably, several VOCs produced by PICF7 have been previously identified as antifungal agents, making this strain a strong candidate for biological control applications.

In this study, we evaluated the antagonistic effect of VOCs emitted by *P. simiae* PICF7 on the germination and vegetative growth of FOL through in vitro dual-culture assays under sealed conditions. To characterize the volatile profile of PICF7, we employed two complementary analytical techniques: headspace gas chromatography–ion mobility spectrometry (HS-GC-IMS) and headspace solid-phase microextraction gas chromatography–mass spectrometry (HS-SPME-GC-MS). The use of both techniques allowed for a more comprehensive and detailed characterization of microbial VOCs, as their distinct detection principles provide complementary sensitivity and resolution.

Moreover, we explored and optimized new strategies for introducing both bacterial and fungal strains into shared vial systems without direct physical contact, aiming to better simulate natural interaction conditions. This experimental setup is analytically relevant, as it allows for the controlled study of VOC-mediated microbial interactions while minimizing confounding factors. These efforts support the development of more standardized and reliable methods for studying microbial VOC interactions.

Our findings contribute to a better understanding of VOC-based interactions between beneficial microbes and phytopathogens, and highlight the potential of *P. simiae* PICF7 as a sustainable biocontrol agent for managing FOL in tomato crops.

¹ Prieto, P.; Mercado-Blanco, J. *FEMS microbiology ecology*, **2008**, *64*, 297-306.

PRODUCCIÓN DE γ -VALEROLACTONA EN FLUJO CONTINUO CON CATALIZADORES Al_2O_3 - ZrO_2 /C DERIVADOS DE MOFs

Marina Ronda-Leal,^a Francesco Mauriello,^b Alberto Ricchebuono,^{c,d} Antonio A. Romero^a and Emilia Paone^{b,d}

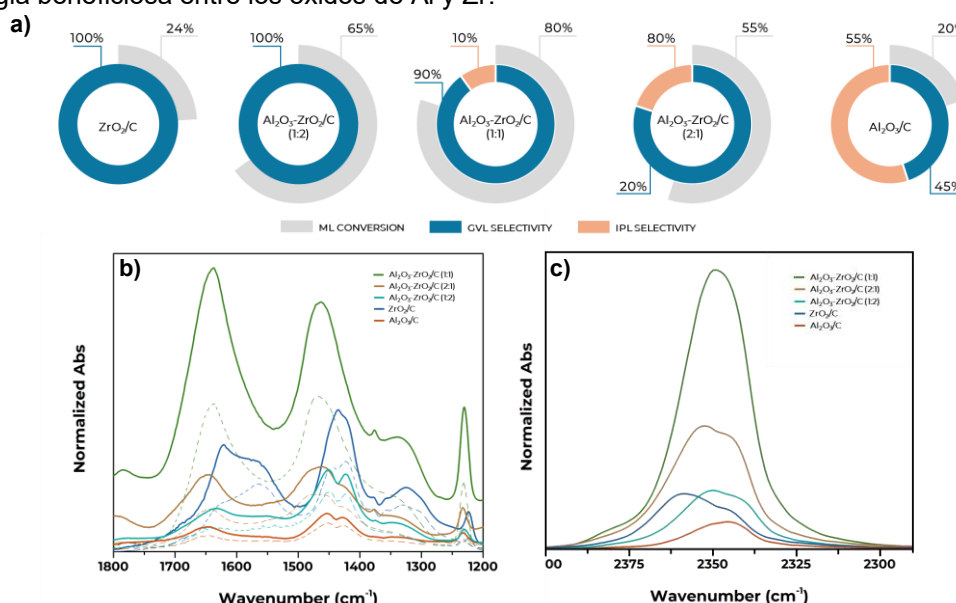
^aDepartamento de Química Orgánica, Universidad de Córdoba, Ctra Nnal IV-A, Km 396, E14014, Córdoba, Spain

^bDipartimento DICEAM, Università degli Studi Mediterranea di Reggio Calabria Loc, Feo di Vito, I-89122 Reggio Calabria, Italy. E-mail: emilia.paone@unirc.it

^cDipartimento di Chimica, INSTM and NIS Centre, Università di Torino, Via Quarellone 15, I-10135 Torino, Italy

^dConsorzio Interuniversitario per la Scienza e la Tecnologia dei Materiali (INSTM), 50121 Firenze, Italy q62rolema@uco.es

Este estudio aborda la transferencia catalítica de hidrógeno (CTH) del levulinato de metilo (ML) hacia γ -valerolactona (GVL), una molécula plataforma clave para la producción de biocombustibles sostenibles, empleando catalizadores bimetalicos Al_2O_3 - ZrO_2 /C derivados de MOFs bimetalicos obtenidos mediante síntesis directa solvotermal. Se sintetizaron una serie de catalizadores con diferentes relaciones molares Al:Zr (1:0, 2:1, 1:1, 1:2, 0:1) y se evaluaron en condiciones de flujo continuo. La caracterización fisicoquímica (STEM, XPS y espectroscopía IR de adsorción de CO_2) evidenció que la incorporación de Al_2O_3 en ZrO_2 incrementa el área superficial y genera una distribución equilibrada de sitios ácidos y básicos, fundamentales para la eficiente hidrogenación de ML. Entre las composiciones estudiadas, el catalizador Al_2O_3 - ZrO_2 /C (1:1) demostró ser el más óptimo, alcanzando un 80% de conversión y un 90% de selectividad (72% de rendimiento) a 200 °C en 30 minutos. El estudio también resalta la relevancia de las condiciones de reacción en la optimización de la producción de GVL, así como la estabilidad y reutilización del catalizador optimizado tras un tratamiento térmico adecuado. En conjunto, los resultados demuestran el potencial de los óxidos mixtos derivados de MOFs como sistemas catalíticos activos y selectivos para la producción continua de GVL, subrayando la sinergia beneficiosa entre los óxidos de Al y Zr.



a) Reacciones en flujo continuo de los catalizadores Al_2O_3 - ZrO_2 /C derivados de MOF. Condiciones: 0,5 mL min⁻¹; ML 0,2 M en 2-propanol; 0,500 g de catalizador; 30 bar; 30 min; 200 °C. b) Espectros IR de adsorción de CO_2 sobre los óxidos. Líneas sólidas correspondientes a la estabilización de 25 mbar de CO_2 y las líneas de puntos a la desgasificación de CO_2 (5×10^{-5} mbar). c) Espectros IR in situ del CO_2 adsorbido en todos los óxidos puros y mixtos registrados a la temperatura del haz.

Agradecimientos

Marina Ronda agradece al Ministerio de Universidades la concesión de ayudas para contratos predoctorales FPU20/03875.

DISTRIBUCIÓN DE PRODUCTOS EN LA SÍNTESIS FISCHER–TROPSC CATALIZADA POR OXALATO DE HIERRO (II) DIHIDRATADO: VALIDACIÓN DEL MODELO ANDERSON–SCHULZ–FLORY

**Carmen María Álvarez-Medina^a, Pedro José Muñoz Acebedo^a, Alejandro Martínez Martín^a,
Celia Tena Pintado^a, Marina A. Pavón Tapia^a**

^a*Departamento de Física Aplicada, Escuela de Ingenierías Industriales, Universidad de Extremadura,
Avda. de Elvas s/n, 06006, Badajoz, España.
carmenmaam@unex.es*

La creciente necesidad de alternativas sostenibles a los combustibles fósiles ha reactivado el interés por la síntesis Fischer–Tropsch (FTS), un proceso catalítico capaz de transformar gas de síntesis ($\text{CO} + \text{H}_2$) en hidrocarburos líquidos. Entre los catalizadores más estudiados, los sistemas basados en hierro destacan por su bajo coste, elevada actividad en la reacción de desplazamiento del gas de agua (WGS) y su capacidad para generar productos en un amplio rango de pesos moleculares. Avances recientes han demostrado que la estructura superficial y la fase activa del hierro influyen directamente en la distribución de productos, regulada por el parámetro α del modelo Anderson–Schulz–Flory (ASF), ampliamente utilizado para describir el crecimiento de cadenas en FTS¹. Su valor teórico oscila entre 0 y 1, donde $\alpha \approx 0$ indica formación de productos muy ligeros (principalmente metano), y $\alpha \approx 1$ refleja una fuerte tendencia hacia hidrocarburos de alto peso molecular, como ceras.

En este estudio se utilizó oxalato de hierro(II) dihidratado comercial ($\text{FeC}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) como catalizador activo en la síntesis Fischer–Tropsch, con el propósito de evaluar cómo las condiciones de operación afectan a la distribución de productos. Se llevaron a cabo experimentos, variando según un diseño planificado la temperatura (278–332 °C), presión (8–17 bar) y relación molar H_2/CO (0,9–2,1). La distribución de productos obtenida se analizó mediante el modelo ASF, determinándose valores del parámetro de crecimiento de cadena α en el rango de 0,843 a 0,964.

Entre las variables estudiadas, la relación molar H_2/CO mostró la influencia más significativa sobre el parámetro α . Valores bajos de esta relación favorecieron el crecimiento de cadenas de hidrocarburos, lo que derivó en una mayor producción de ceras. La presión también ejerció un efecto positivo sobre α , mientras que el incremento de la temperatura provocó una disminución de este parámetro, favoreciendo la formación de productos más ligeros. La combinación de baja relación H_2/CO , alta presión y temperatura moderada se asoció con los valores más elevados de α . Estos resultados evidencian la capacidad del oxalato de hierro(II) dihidratado como catalizador para modular la distribución de productos en función de las condiciones operativas aplicadas. El elevado ajuste estadístico de los datos experimentales al modelo ($R^2 > 0,97$) valida la aplicabilidad del enfoque ASF en este sistema y pone de relieve el potencial del oxalato de hierro (II) dihidratado como catalizador eficaz y selectivo.

Los autores agradecen la financiación recibida del Ministerio de Economía, Ciencia y Agenda Digital y de la Universidad de Extremadura, para la implementación de las líneas de actuación LA4, LA5, LA8, LA9 y LA11 del Programa de I+D+i en el ámbito de la Energía Verde e Hidrógeno, financiado con fondos Next Generation EU. Este programa está incluido en la medida de inversión C17.11 "Planes Complementarios con las Comunidades Autónomas", que forma parte del Componente 17 "Reforma institucional y fortalecimiento de las capacidades del Sistema Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación" del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia.

- (1) Jiang, S.; Liu, Z.; Chowdhury, A. D. Towards Superior Efficiency of the CO_2 -Derived Fischer–Tropsch Synthesis Process over Iron-Based Metal–Organic Framework-Derived Multifunctional Catalytic Materials. *Catal Sci Technol* **2025**, *15* (4), 1096–1112. <https://doi.org/10.1039/D4CY01508H>.

USO DE MICROEMULSIONES PARA LA ETERIFICACIÓN DEL GLICEROL CON TERT-BUTANOL

Francisco Pérez^a, Vicente Montes^a, Felipa María Bautista^a, Rafael Carlos Estévez^a

^a *Departamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario CeIA3, Edificio Marie Curie, E-14014, Córdoba, España*
q82pehif@uco.es

En los últimos años, el consumo de los combustibles fósiles ha incrementado considerablemente, conllevando una serie de problemas relacionados con su escasez e impacto ambiental. Por ello, para reducir la utilización de estos, se están investigando nuevas fuentes de energía, siendo la biomasa una de las alternativas más prometedoras. La explotación de la biomasa ha tenido una especial relevancia en las últimas décadas, debido principalmente a la producción de biodiésel. En la reacción de formación del biodiésel se genera glicerol como subproducto, un 10% en peso del total del biodiésel producido. La búsqueda de diferentes estrategias que permitan transformar el glicerol en compuestos de alto valor añadido supone un paso importante para evitar la drástica devaluación de su precio. Tanto es así que se ha convertido en una de las principales moléculas plataforma procedentes de la biomasa en la actualidad.¹ La reacción de eterificación del glicerol con terc-Butanol tiene un gran interés debido a que rinde diferentes éteres, los di y tri-tert-butil éteres del glicerol, conocidos como “high-éteres” (h-GTBEs), que pueden ser empleados como aditivos al diésel, mejorando su rendimiento y disminuyendo la emisión de partículas. Esta reacción requiere de catálisis ácida y se encuentra controlada en el equilibrio, presentando una limitación para conseguir altos rendimientos a los productos deseados, ya que el agua que se genera en cada paso de la reacción puede, a su vez, hidrolizar los enlaces éter formados.^{2,3}

En el presente trabajo se ha estudiado el empleo de una microemulsión como método para evitar la hidrólisis de los h-GTBEs formados, mediante la difusión de estos a la fase apolar, evitando su contacto con el agua. La fase polar de la microemulsión está constituida por glicerol, tert-Butanol, acetonitrilo, H₂O y un catalizador ácido (H₂SO₄); la fase apolar está formada por diésel y finalmente como surfactante se ha empleado uno no iónico, el Synperonic 91/6. Se ha evaluado la estabilidad de la microemulsión en el rango de temperaturas 25-85 °C y se ha variado la proporción de los distintos componentes para la obtención del diagrama de fase terciario (agua y surfactante). Asimismo, se han optimizado las condiciones de la reacción de eterificación (temperatura, cantidad de catalizador) y se intentó reducir lo más posible la cantidad de surfactante empleada. Además de esto, se ha desarrollado un método de análisis cuantitativo por Cromatografía de Gases Espectrometría de Masas para la cuantificación de los éteres formados en base a su porcentaje en volumen con respecto al diésel.

La microemulsión preparada fue estable hasta los 84 °C, a temperaturas más altas comenzó a desestabilizarse. La cantidad óptima de catalizador para la conversión de glicerol y la selectividad a high-éteres fue de 7.5%, ya que cantidades mayores disminuyeron la eficiencia debido a la pérdida de estabilidad de la microemulsión. Además, se ha corroborado que la presencia de agua reduce la conversión y selectividad, dificultando que la reacción de eterificación tenga lugar dentro de la microemulsión. En cuanto al surfactante, se logró minimizar su uso sin perjudicar la estabilidad de la microemulsión al emplear cantidades entre 0,9 y 1,9 gramos. Sin embargo, con cantidades inferiores a 0,9 gramos, comenzó a desestabilizarse la microemulsión.

Agradecimientos

Investigaciones financiadas por los proyectos TED2021-132224B-I00 (financiado por MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y Unión Europea "NextGenerationEU/PRTR") y PID2022-142275OB-I00 (financiado por MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y FEDER, UE). Agradecer a la Sociedad española de catálisis (SECAT) por la financiación para la realización de este proyecto.

- (1) Estevez, R.; López, M. I.; Jiménez-Sanchidrián, C.; Luna, D.; Romero-Salguero, F. J.; Bautista, F. M. *Appl Catal A* Gen 2016, 526, 155–163.
- (2) Dominguez, C. M.; Romero, A.; Santos, A. *Catalysts* 2019, 9 (4).
- (3) Çakmak, A.; Özcan, H.. *SN Appl Sci* 2020, 2 (10).

COMUNICACIONES TIPO PÓSTER

QUIEMA 25

VALORIZACIÓN DEL ALPEORUJO EN FORMA DE CARBÓN POROSO FUNCIONAL PARA CÁTODOS DE BATERÍAS SOSTENIBLES NA-S

A. Cardoso-Almoguera^a, H. Martínez-Alvarenga^b, M.C. Gutiérrez^b, M.A. Martín^b, A. Caballero^a, A. Benítez^a

^a Universidad de Córdoba, Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, FQM-175, IQUEMA, Córdoba.

^b Universidad de Córdoba, Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, RNM-271 UCO-Greening, IQUEMA, Córdoba.
q72caala@uco.es

El creciente interés por tecnologías energéticas sostenibles ha impulsado el desarrollo de baterías de sodio-azufre (Na-S) operativas a temperatura ambiente como alternativa viable a las comerciales de ion-litio. Estas prometedoras baterías Na-S destacan por su bajo coste, la abundancia y disponibilidad de materias primas (sodio y azufre), así como por su reducido impacto ambiental, lo que las convierte en una opción especialmente positiva para el almacenamiento energético a gran escala en un contexto de transición hacia fuentes renovables. En este estudio, se propone una estrategia innovadora basada en el aprovechamiento del alpeorujo, un residuo agroindustrial generado en elevadas cantidades por la industria olivarera en España¹. Mediante un proceso no-complejo de activación química y pirólisis, se obtuvieron carbones porosos de alta superficie específica, que fueron empleados como soporte de azufre en el cátodo de celdas Na-S. Esta arquitectura permitió un anclaje eficiente del azufre y la mitigación de la disolución de polisulfuros de sodio durante los ciclos de carga y descarga, mejorando así la estabilidad electroquímica del sistema². Los dispositivos desarrollados exhibieron capacidades específicas superiores a 350 mAh/g incluso tras numerosos ciclos de uso, lo que demuestra su viabilidad técnica y su potencial como solución energética sostenible y económicamente asequible.

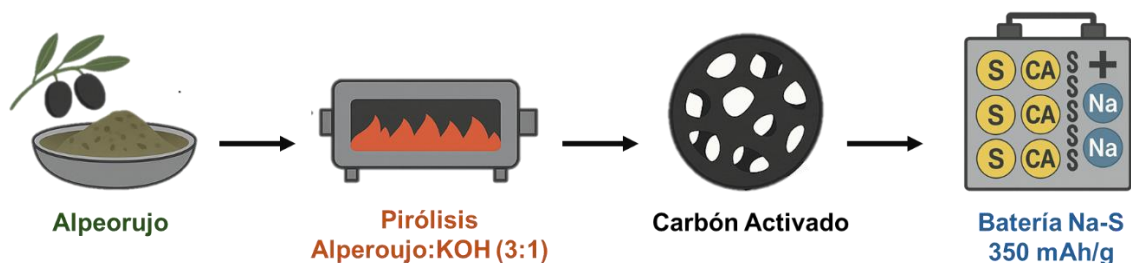


Figura 1. Esquema del aprovechamiento del alpeorujo como precursor de carbono poroso para cátodos en baterías sostenibles de sodio-azufre (Na-S).

Agradecimientos:

Esta investigación ha sido financiada por el Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2023-147080OB-I00 y PID2020-113931RB-I00), la Junta de Andalucía (GOPO-CO-23-0006 y AEI) y la Universidad de Córdoba (Plan Propio de Investigación 2023, UCOLIDERA). Además, A. Cardoso-Almoguera agradece al Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades la concesión de una ayuda FPI (PRE2021-097150), y A. Benítez cuenta con el apoyo de un contrato Juan de la Cierva – Incorporación (IJC2020-045041-I).

¹ Ma, Q. et al., ACS Appl. Mater. Interfaces, 13 (2021): 11852–11860.

² Sun, X. et al., ACS Appl. Energy Mater., 5 (2022): 11825–11834.

ESTUDIO DE MUV-10 COMO MATRIZ CATÓDICA EN BATERÍAS METAL-AZUFRE

Omar Saad-Molina^a, Álvaro Bonilla^a, Larisha Cisneros^b, Juan Luis Gómez-Cámer^a, Álvaro Caballero^a, Carlos Martí-Gastaldo^b.

^aDpto. De Química Inorgánica e Ingeniería Química, Instituto Química para la Energía y el Medio Ambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, 14014 Córdoba, España

^bInstituto de Ciencia Molecular (ICMol), Universitat de València, Catedrático José Beltrán-2, Paterna, 46980 España
q92samoo@uco.es

En los últimos años han destacado las tecnologías metal-azufre (Li/Na-S) debido a la alta capacidad específica que presenta el azufre (1675 mAh g^{-1}). Sin embargo, su aplicación práctica se ve limitada por una rápida degradación de la capacidad del sistema, causada principalmente por la disolución de los polisulfuros metálicos, fenómeno conocido como “*shuttle effect*”. Para la mitigación de este problema se ha propuesto el uso de materiales porosos avanzados como lo son los “*Metal Organic Framework*” (MOF), los cuales presentan varias características atractivas para su uso en sistemas metal-azufre.^{1,2}

En este trabajo se propone el uso de dos variantes del MOF “MUV-10”³ como matrices catódicas. Se sintetizaron composites con azufre del tipo MUV-10@S mediante el método de “*melt diffusion*” con un contenido en azufre del 70% en peso. Se evaluó una caracterización exhaustiva del composite y los materiales de partida, y se estudió su comportamiento electroquímico en celdas de tipo botón (CR2032). Los resultados muestran capacidades superiores a 500 mAh g^{-1} durante más de 300 ciclos de carga y descarga a 1C y cercanas a 550 mAh g^{-1} a altas densidades de corriente como serían 3C, dejando en evidencia el gran potencial del material.

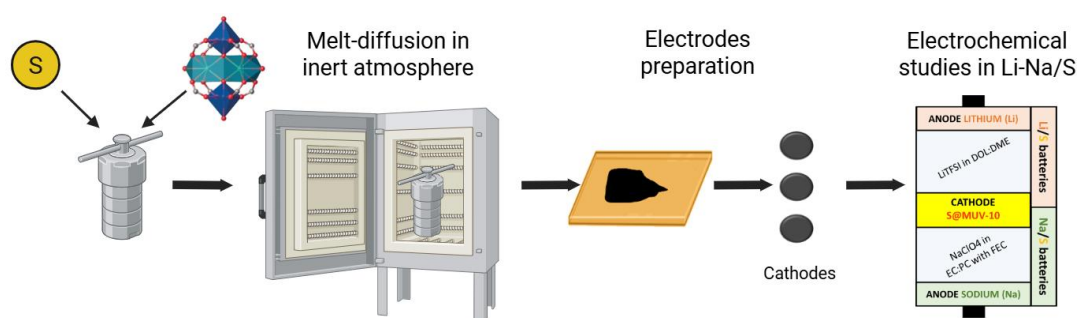


Figure 1. Esquema del proceso de formación de los cátodos basados en MUV-10.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (Proyectos PID2020-113931RB-I00 y PID2023-147080OB-I00), y por la Junta de Andalucía (FQM-175). A. B. agradece al Ministerio de Universidades la concesión de ayudas para contratos predoctorales (FPU20/02673).

¹ Bonilla, Á.; Ortega-Moreno, G. A.; Bernini, M. C.; Gómez-Cámer, J. L.; Barbosa, L. I.; Caballero, Á. *J. Power Sources* **2024**, *608*, 234613.

² Chen, Y.; Lin, J.; Jia, B.; Wang, X.; Jiang, S.; Ma, T. *Adv. Mater.* **2022**, *34* (39), 2201796.

³ Castells-Gil, J.; Padial, N. M.; Almora-Barrios, N.; Alberio, J.; Ruiz-Salvador, A. R.; González-Platas, J.; García, H.; Martí-Gastaldo, C. *Chem. Int. Ed Engl.* **2018**, *57* (28), 8453–8457.

BATERÍAS METAL-AZUFRE AVANZADAS BASADAS EN EL EMPLEO SINÉRGICO DEL MXENO $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ COMO CÁTODO Y SEPARADOR

Alvaro Bonilla^{a,b}, Antonio Gentile^b, Chiara Ferrara^b, Juan Luis Gómez-Cámer^a, Riccardo Ruffo^b, Álvaro Caballero^a

^a Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, 14014, Córdoba, España

^b Dipartimento di Scienza dei Materiali Università degli Studi di Milano Bicocca, via Cozzi 55, Milano 20125, Italy
q62botoa@uco.es

Las baterías metal-azufre destacan por la alta capacidad del azufre, pero sufren una rápida degradación por el efecto “shuttle”, que implica la disolución y migración de polisulfuros hacia el ánodo. Esto provoca pérdida de material activo y vida útil reducida.¹ Aunque se han probado cátodos modificados y separadores de carbono, su eficacia es limitada.² Los MXenes, materiales 2D altamente conductivos con superficies polares, ofrecen una solución prometedora al anclar los polisulfuros y mitigar este efecto, mejorando así el rendimiento y la estabilidad de las baterías.³

Este estudio explora el uso dual de MXene $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ como huésped de azufre en el cátodo y como separador funcionalizado en baterías metal-azufre. El análisis electroquímico revela una interacción sinérgica que mejora el transporte de iones litio, acelera la cinética de reacción y reduce la polarización. Como resultado, la batería alcanza un rendimiento mejorado y una notable estabilidad, superando los 1000 ciclos a 0.5C. A 5C, mantiene una capacidad cercana a 600 mAh g^{-1} con una retención del 85%. Además, con una alta carga de azufre (9 mg cm^{-2}), ofrece una capacidad inicial superior a 8 mAh cm^{-2} , lo que demuestra su potencial para aplicaciones de alta densidad energética y larga vida útil.

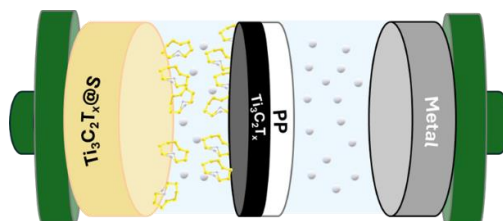


Figura. Representación esquemática de la celda Metal-Azufre empleada.

Agradecimientos

Esta investigación ha sido financiada por el Ministerio de Ciencia e Innovación MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (Proyectos PID2020-113931RB-I00 y PID2023-952147080B-I00), y por la Junta de Andalucía (FQM-175). Álvaro Bonilla agradece al Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades la concesión de ayudas para contratos predoctorales (FPU20/02673) y ayudas de movilidad para estancias breves en centros extranjeros (EST24/00283).

Referencias

- (1) Bonilla, Á.; Jiménez-Blasco, U.; Gómez-Cámer, J. L.; Garaio, E.; Pérez-Landazábal, J. I.; Caballero, Á. *Journal of Power Sources* **2025**, 628, 235856.
- (2) Huang, Y.; Lin, L.; Zhang, C.; Liu, L.; Li, Y.; Qiao, Z.; Lin, J.; Wei, Q.; Wang, L.; Xie, Q.; Peng, D. *Advanced Science* **2022**, 9 (12), 2106004.
- (3) Wang, Y.; Guo, T.; Alhajji, E.; Tian, Z.; Shi, Z.; Zhang, Y.; Alshareef, H. N.. *Advanced Energy Materials* **2023**, 13 (4), 2202860.

CARBONES BASADOS EN POLIDOPAMINA DOPADOS CON DIFERENTES METALES DE TRANSICIÓN PARA BATERIAS ZINC-AIRE

Valentín García-Caballero^a, Juan J. Giner-Casares^a, Antonio J. Fernández-Romero^{a,b} and Manuel Cano^a

^a Departamento de Química Física y Termodinámica Aplicada, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Córdoba 14014, España.

^b Grupo de Materiales Avanzados para la Producción y Almacenamiento de Energía, Universidad Politécnica de Cartagena, Aulario II, Campus de Alfonso XIII, Cartagena 30203, España.
g32gacav@uco.es

Los carbones derivados de polidopamina (PDA) han emergido como materiales prometedores para electrodos en baterías de Zn–aire (ZAB) gracias a su alta conductividad eléctrica, granularidad controlada y versatilidad química. En este trabajo, se ha investigado la síntesis y caracterización de carbones de alta entropía basados en PDA, dopados individualmente con Co, Mn y Ni, así como en su combinación ternaria (Co–Mn–Ni), con el fin de mejorar el rendimiento global de las ZAB.

Para la preparación de los precursores, se realizó la polimerización de dopamina en presencia de sales metálicas (Co^{2+} , Mn^{2+} , Ni^{2+}) en proporciones estequiométricas, controlando el pH y la temperatura para favorecer la incorporación homogénea de los iones en la matriz polimérica (Figura 1). Tras secar las muestras utilizando un rotavapor, los materiales obtenidos fueron sometidos a una calcinación en atmósfera de aire a 550 °C, produciendo carbones dopados con alta dispersión de óxidos metálicos¹. El carbón dopado con los tres metales fue sintetizado introduciendo las tres sales metálicas simultáneamente durante la polimerización, buscando maximizar la heterogeneidad atómica y minimizar la segregación de fases.

Para la optimización de este método, se realizaron diferentes mediciones electroquímicas, como la voltamperometría cíclica en condiciones estáticas y dinámicas, la espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS) y la superficie electroquímica (ECSA).

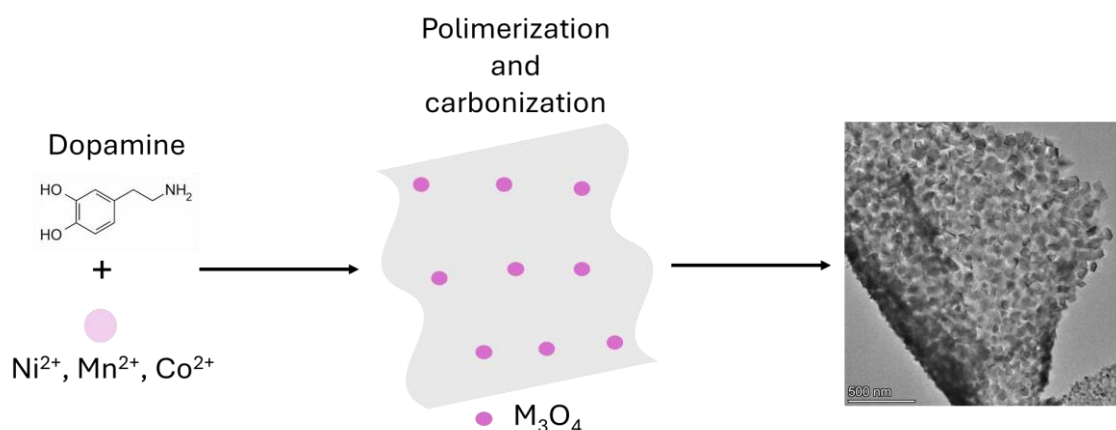


Figura 1: Esquema del proceso de polimerización y dopaje de la PDA para obtener carbones dopados con diferentes metales.

Agradecimientos

Agradecemos a el proyecto PID2020-112744GB-I00. VGC por el contrato "2.2 Contratos predoctorales UCO - Plan Propio". AJFR por el proyecto PID2022-139191OB-C32 y la excelente red E3TECH-PLUS.

¹Yoshii, T., Tamaki, K., Kuwahara, Y., Mori, K., Yamashita, H. *Journal of CO₂ Utilization*, **2021**, 52, 101691.

PROCEDIMIENTOS DE MEJORA DEL COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE $\text{Na}_4\text{A}_x\text{Mn}_{9-x}\text{O}_{18-y}\text{B}_y$ PARA CÁTODO DE BATERÍAS DE ION-SODIO.

Rafaela Ruiz^a, Christian Álvarez^a, Carlos Pérez-Vicente^a, Ricardo Alcántara^a.

^aUniversidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio C3, IQUEMA, Departamento de Química Inorgánica, 14071 Córdoba (España).
q62arrur@uco.es

Las baterías deberían estar basadas en elementos abundantes, de bajo coste económico y de bajo impacto medioambiental. Así, elementos como el sodio y/o manganeso son más adecuados que otros como el cobalto y el litio. Lo que convierte las baterías de iones de sodio en una opción atractiva para diversas aplicaciones. La estructura tipo túnel de ciertos óxidos de manganeso facilita la difusión de iones de sodio en la estructura.¹ El compuesto $\text{Na}_4\text{Mn}_9\text{O}_{18}$ (o $\text{Na}_{0.44}\text{MnO}_2$) tiene estructura tipo túnel (grupo espacial Pbam)², y puede usarse como electrodo positivo. Para mejorar su comportamiento electroquímico, el Mn puede ser parcialmente sustituido por otros elementos metálicos, y el oxígeno por otro elemento no metálico, como se estudia en este trabajo. Las muestras se sintetizaron usando el método cerámico. Mediante microscopía electrónica se observa que las muestras están formadas por partículas con morfología de barras y los difractogramas confirman la formación de la estructura tipo túnel (Figura 1). Los resultados electroquímicos son prometedores y permiten diseñar nuevas rutas para mejorar su comportamiento. Los cálculos teóricos usando el método DFT nos permiten modelizar su estructura.

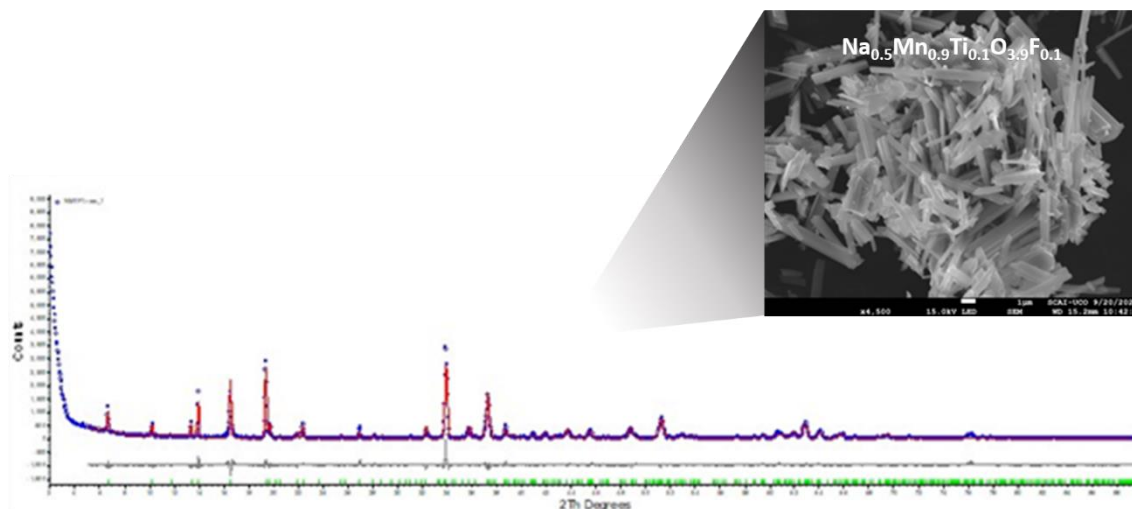


Figura 1. Fotografía de microscopio electrónico de barrido de muestra con estructura tipo túnel y diagrama de difracción de rayos-X ajustado.

Agradecimientos

Este trabajo fue subvencionado por la Junta de Andalucía (grupo PAIDI FQM288 y Proyecto_0001020).

¹ Alcántara, R.; Pérez-Vicente, C.; Lavela, P.; Tirado, J.L.; Medina, A.; Stovanova, R. *Materials*, **2023**, *16*, 6970.

² Ruiz, R.; Pérez-Vicente, C.; Alcántara, R. *Dalton Trans.*, **2024**, *53*, 4814-4822.

ANÁLOGOS DE AZUL DE PRUSIA: EFECTOS DEL TIEMPO DE ENVEJECIMIENTO EN LA SÍNTESIS POR COPRECIPITACIÓN

Marta Ramírez-Prieto,^a Alejandro López-Chías,^a Victoria Carnero-Roldan,^a Adrián Licari,^a Ángela Fernández-Merino^b and Rafael Trócoli^a.

^a Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, Instituto Químico para la Energía y el Medio Ambiente (IQUEMA)

^b Departamento de Química Física y Termodinámica Aplicada, Instituto Químico para la Energía y el Medio Ambiente (IQUEMA)
z32raprm@uco.es

El aumento sostenido en el consumo energético global, junto con las previsiones de crecimiento futuro, ha impulsado la búsqueda y desarrollo de nuevos materiales funcionales para tecnologías de almacenamiento de energía, particularmente en el campo de las baterías. Entre las alternativas más prometedoras destacan los análogos del Azul de Prusia (PBAs), que han demostrado tener la capacidad de intercalar distintos cationes (Na^+ , K^+ , Mg^{2+} ...) dentro de su estructura cristalina (pervoskita doble, Fm-3m, Fig. 1A). Esta propiedad los posiciona como prometedores materiales catódicos en baterías más sostenibles, que podrían reemplazar a las tecnologías de ion-litio.¹

Diversos estudios han evidenciado que variables del proceso de síntesis, tales como la velocidad de goteo de reactivos durante la coprecipitación o la concentración y tipo de precursores empleados,² influyen de manera determinante en la composición, morfología y comportamiento electroquímico del PBA obtenido. En este trabajo, se investiga específicamente cómo el tiempo de envejecimiento ("aging", tiempo de reposo tras el proceso de adición de reactivos) afecta a características clave del PBA hexacianoferrato de níquel (NiHCF). Para ello, se utilizan técnicas de caracterización estructural como la difracción de rayos X o la microscopía electrónica de barrido, y pruebas de ciclados galvanostáticos demostrando un alto impacto en parámetros tales como tamaño de partículas, presencia de vacantes o capacidad suministrada en celdas de sodio (Fig. 1B).

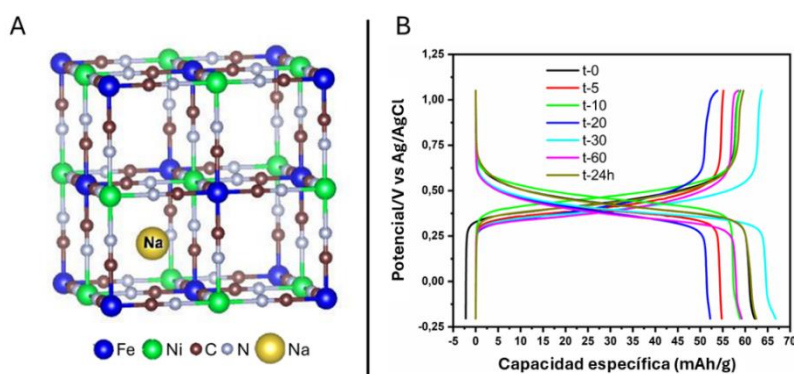


Figura. 1 Estructura cúbica del $\text{K}_x\text{Ni}[\text{Fe}(\text{CN})_6]_y \cdot z\text{H}_2\text{O}$ (A) y medida galvanostática a diferentes "Aging" (B)

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Junta de Andalucía la financiación a través del programa EMERGIA (Emergía_0153) y proyectos de excelencia (Project Excel_00330), así como al Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades a mediante los proyectos "TED20213129314 A-100", PID2022-142391OA-100, y RYC2022-037564 financiadas por el MCI/AEI//10.13039/501100011033 y European Union NextGenerationEU/ PRTR, FEDER a way of making Europe and the FSE invest in your future.

¹Ma, L.; Cui, H.; Chen, S.; Li, X.; Dong, B.; Zhi, C. *Nano Energy* **2021**, *81*, 105632.

²Trocoli, R.; Houdeville, R.; Frontera, C.; Vincent, S.; García Lastra, J. M.; Palacin, R. *ChemSusChem* **2023**.

DESARROLLO DE MATERIALES APLICABLES A FOTOCONDENSADORES DE DIFERENTES TECNOLOGÍAS

F. Martín^a, M.C. López-Escalante^{a*}

^aInstituto de Materiales y Nanotecnología (IMANA), Universidad de Málaga y Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Málaga.
mclopez@uma.es

El crecimiento de las necesidades energéticas actuales, junto con las exigencias de descarbonización y reducción de la huella de carbono, ha puesto de manifiesto la falta de unidades eficientes, compactas, sostenibles y versátiles que puedan utilizarse en sistemas remotos. Los fotocondensadores (PSC), también conocidos como supercondensadores fotorrecargables, son dispositivos que combinan la tecnología solar, principalmente de tecnologías emergentes [1,2], con los supercondensadores (SC). Cada uno de ellos desempeña un papel fundamental en el rendimiento de los PSC [3]. Por lo tanto, resulta especialmente interesante estudiar cada uno de ellos y su integración.

En esta comunicación se presenta una comparación justificada entre dispositivos de dos y tres electrodos, así como de los componentes básicos que los integran. Se prestará especial atención al sistema de generación de energía, que puede ser una célula solar, generalmente de tecnología emergente, o bien un fotoánodo, un electrolito acuoso o gel polimérico y un electrodo de almacenamiento. Por último, también se presentará la caracterización eléctrica que se recomienda para determinar su rendimiento.

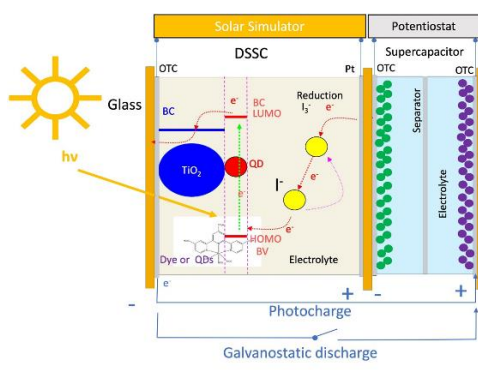


Figura 1. Esquema de un fotocondensador de tres electrodos con una unidad de generación de energía mediante célula de colorante y una unidad de almacenamiento de energía formado por un supercondensador asimétrico (ZnMn₂O₄/PVP:LiClO₄/LiFe₅O₈)

Los autores agradecen la ayuda recibida por el Ministerio de Ciencia e Innovación mediante el Proyecto: PID2020-117832RB-100; así como a la Junta de Andalucía y fondos FEDER, por el proyecto: PEC y PV-PEC para la fotoelectrolisis solar del agua FQM192-G-FEDER 2023–2025.

¹ Z. Pan, H. Rao, I. Morá-Seró, J. Bisquert, X. Zhong, Chem. Soc. Rev., **2018**, 47, 7659-7702.

² A. Chakraborty, G. Lucarelli, J. Xu, Z. Skafi, S. Castro-Hermosa, A.B. Kaveramma, R. Geetha Balakrishna, T. M. Brown.. Nano Energy 128, **2024**, 109932.

³ J.J. Peinado-Pérez, M. Cruz López-Escalante, F. Martín., Nanomaterials **2023**, 13(23), 3017.
<https://doi.org/10.3390/nano13233017>.

NANOCOMPUESTOS DE GRAFENO: SÍNTESIS VÍA PLASMA DE MICROONDAS A PRESIÓN ATMOSFÉRICA

**Rocío Pérez-Portero^a, Antonio Cobos-Luque^a, Franciso J. Morales-Calero^a, José Muñoz^a,
Andrés M. Raya^a y Rocío Rincón^a.**

^aLaboratorio de innovación en plasmas, Dpto. de Física, Universidad de Córdoba.
f82pepor@uco.es

Los nanomateriales, con propiedades específicas impensables en los materiales usuales, juegan un papel fundamental en el desarrollo de estrategias frente a los desafíos actuales, tales como la emergencia climática. Sin embargo, a menudo no son implementados en la industria debido a la baja tasa de producción, el coste de los procesos y/o su alto impacto ambiental. Por ello, es fundamental el desarrollo de procesos de síntesis sostenibles y escalables de nuevos materiales. La tecnología de plasmas de microondas a presión atmosférica ha demostrado su capacidad para la síntesis de grafeno curvo en polvo de pocas capas y alta calidad [1]. Se trata de un proceso respetuoso con el medio ambiente, con bajo coste económico y una tasa de producción del orden de cientos mg/h. El grafeno obtenido ha mostrado buenos resultados en la producción de baterías de litio azufre, aumentando su ciclo de vida [2]. Sin embargo, para poder cubrir un mayor rango de aplicaciones, necesitamos establecer nuevas vías que permitan sintetizar diferentes nanocompuestos. Para ello se ha diseñado un novedoso sistema de introducción de precursores compatible con el montaje experimental existente [1] que permite introducir los precursores necesarios para la síntesis en un solo paso de nanocompuestos basados en grafeno. Como resultado, en este trabajo se presenta por primera vez la síntesis de un nanocompuesto grafeno-TiO₂ mediante plasma de microondas. La espectroscopía Raman y microscopía electrónica de transmisión (TEM) confirmaron la formación de un nanocompuesto de grafeno y nanopartículas de TiO₂. El análisis de la espectroscopía fotoelectrónica de rayos X y Raman revelaron que el grafeno conserva su alta calidad estructural. Las imágenes de TEM (Figura 1) mostraron nanoestructuras de TiO₂ con diferentes morfologías ancladas a las láminas de grafeno. Este método de síntesis supone las bases en la producción eficiente y escalable de otros nanocompuestos funcionales basados en grafeno, como grafeno-oro, con potencial para diversas aplicaciones tecnológicas.

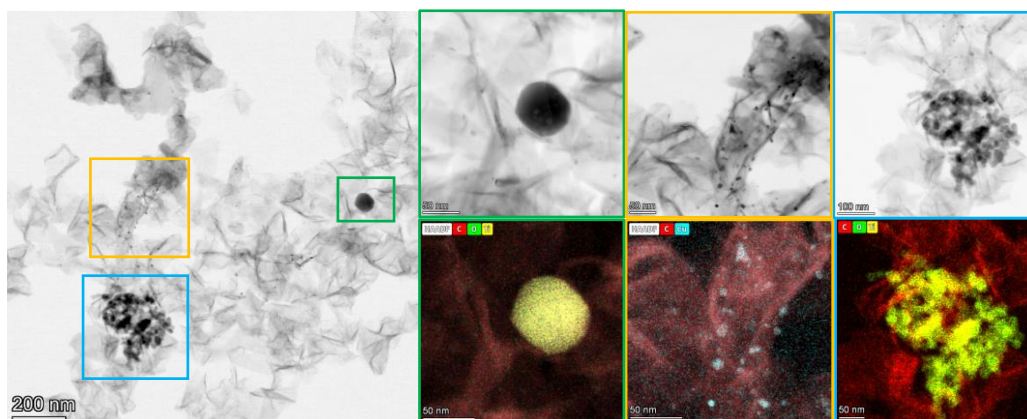


Figura 1. Imagen HRTEM de un nanocompuesto grafeno-TiO₂ obtenido mediante plasmas de microondas a presión atmosférica.

Referencias:

- [1] Morales-Calero, F.J., et al, *Chemical Engineering Journal*, **2024**, 498, 155088.
- [2] Blázquez-Moreno, J.M., et al, *Journal of Power Sources*, **2025**, 630, 236173.

Agradecimientos:

Este trabajo ha sido financiado por el Proyecto TED2021-129261A-I00 (MICIU/AEI/10.13039/501100011033) y la UE NextGeneration EU/PRTR. Agradecemos al Prof. Álvaro Caballero y su equipo por cedernos el precursor para el TiO₂.

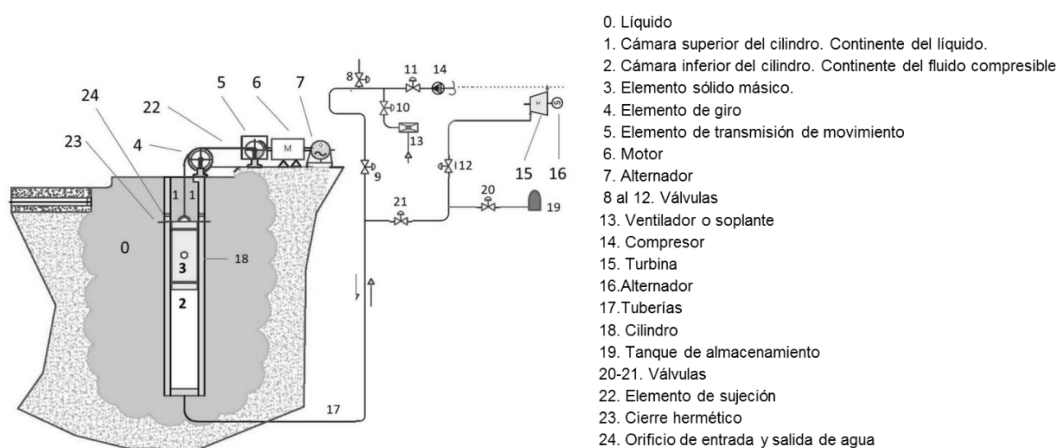
DISPOSITIVO DE ALMACENAMIENTO TRIENERGÉTICO TRIFÁSICO COMO ALTERNATIVA SOSTENIBLE PARA LA GESTIÓN DE ENERGÍA RENOVABLE

Jose Luis Aranda Hidalgo^a.

^aUniversidad de Córdoba. Rectorado. Av. Medina Azahara, nº 5 14071-Córdoba, Spain.

josemanuel.aranda@uco.es

En esta comunicación se presenta un dispositivo de almacenamiento energético desarrollado y registrado por el autor como modelo de utilidad (202200123), basado en un sistema trienergético trifásico capaz de almacenar y devolver energía eléctrica renovable. El término trienergético alude a la acumulación de energía en tres formas: gravitacional másica, potencial hidráulica y por compresión de un fluido. A su vez, se denomina trifásico por emplear las tres fases de la materia como medios de almacenamiento: sólido (émbolo), líquido (columna de agua) y gas (aire o gas comprimido).



El sistema está concebido específicamente para integrarse en entornos con generación renovable, y en particular, para aprovechar los excedentes de energía solar fotovoltaica que se producen durante las horas centrales del día. Esta energía se utiliza para accionar un motor eléctrico que eleva el émbolo dentro del cilindro, permitiendo así almacenar esa electricidad en forma de energía potencial (gravitacional e hidráulica) y energía de presión.

Cuando el sistema eléctrico demanda energía —por ejemplo, al atardecer, cuando cesa la producción solar y aumenta el consumo— el dispositivo puede devolver la energía acumulada mediante alternadores acoplados, ya sea aprovechando el descenso del sólido másico o la expansión controlada del fluido comprimido a través de una turbina. El sistema permite una gestión flexible y eficiente, pudiendo activar la descarga de forma conjunta o independiente según las condiciones del mercado eléctrico.

Este modelo de utilidad ofrece una solución síncrona, modular, replicable y ambientalmente sostenible frente a las tecnologías de almacenamiento convencionales. Se construye con materiales reciclables y de bajo impacto ambiental, no contiene elementos peligrosos, y es fácilmente escalable para aplicaciones distribuidas o industriales.

Según simulaciones recogidas en una publicación científica desarrollada en colaboración con otros investigadores¹, el sistema puede escalarse fácilmente. Por ejemplo, nueve unidades de 2,5 m de diámetro y 40 m de altura podrían almacenar 1 MWh, suficiente para abastecer a 100 hogares durante cinco horas. Este avance proporciona una alternativa eficiente a las baterías electroquímicas, facilitando una conversión y gestión efectiva de la energía solar.

¹ Martín-Alcántara, A.; Aranda-Hidalgo, J. L.; Jiménez-Solano, A.; Sarsa-Rubio, A. J. Analysis and Design of an Inverted Oscillating Water Column under Choked Flow Condition. Energy 2023, 285, 129356. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2023.129356>.

FROM LINES, DOTS, AND HOLES TO 3D ARCHITECTURES: HIERARCHICAL NANOPATTERNING VIA BLOCK COPOLYMER ASSEMBLY

Pablo G. Argudo^{a,b}, Nils Demazy^a, Guillaume Fleury^a

^aUniv. Bordeaux, CNRS, Bordeaux INP, LCPO, UMR 5629, F-33600, Pessac, France

^bUniversidad de Córdoba, iQUEMA, 14014, Córdoba, Spain
qf2goarp@uco.es

Block copolymers (BCPs) possess the intrinsic ability to self-assemble into nanoscale periodic structures, making them valuable for fabricating functional surfaces in fields such as electronics, energy, and information technologies.¹ The resulting morphologies, however, are typically governed by interfacial energy minimization, favoring geometries that reduce domain boundaries. In this study, we demonstrate how thin films of PS-*b*-PMMA BCPs can be sequentially layered to construct a diverse set of multiscale morphologies.² By employing an iterative assembly approach utilizing basic pattern elements—such as holes, lines, and dots—the morphology of each additional layer is influenced by the one beneath it, through confinement effects and modulation of interfacial energies. This strategy enables the generation of complex three-dimensional nanostructures in alumina.

To support the experimental observations, we employ Dissipative Particle Dynamics (DPD) simulations, which provide insight into the layer-by-layer assembly behavior. We further introduce a reparametrized DPD model tailored to predict the final 3D morphologies based on prior studies. When integrated with directed self-assembly techniques such as graphoepitaxy, this methodology offers a versatile platform for designing nanostructured materials, with potential applicability beyond PS-*b*-PMMA to other block copolymer systems.³

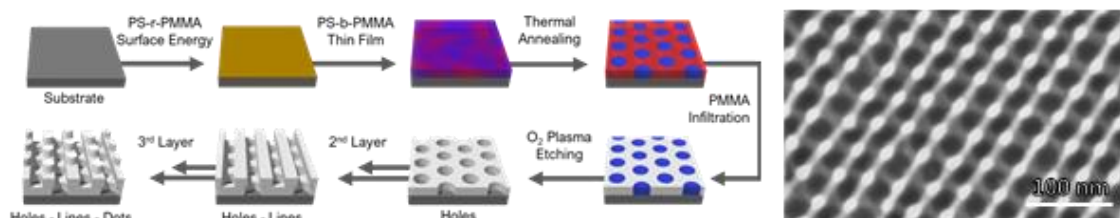


Fig. 1: Stacking protocol of BCP thin films (left) and SEM image of a final Holes-Lines-Dots trilayer (right)

¹Demazy, N.; Cummins, C.; Aissou, K.; Fleury, G.; *Adv. Mater. Interfaces* **2020**, 7, 1901747.

²Argudo, P.G.; Demazy, N.; Fleury, G.; *Adv. Mater. Interfaces* **2023**, 10, 2202493.

³Demazy, N.; Argudo, P.G.; Fleury, G.; *Small* **2022**, 19, 2205254.

CATALIZADORES BASADOS EN HIDRÓXIDOS DOBLES LAMINARES DE Zn-Cr PARA LA FOTORREDUCCIÓN DE CO₂ CON LUZ VISIBLE: EFECTO DE LA RELACIÓN METÁLICA Y EL ANIÓN INTERLAMINAR

Dolores G. Gil-Gavilán^a, Raúl Rojas-Luna^b, Juan Amaro-Gahete^c, Daniel Cosano^a, Miguel Castillo-Rodríguez^d, Dolores Esquivel^a, José R. Ruiz^a, **Francisco J. Romero-Salguero^a**.

^aDepartamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Facultad de Ciencias, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Marie Curie, 14071 Córdoba, Spain.

^bSchool of Chemistry, University of Lincoln, Green Lane, Lincoln LN6 7DL, U.K.

^cMateriales Polifuncionales Basados en Carbono (UGR-Carbon), Departamento de Química Inorgánica- Unidad de Excelencia Química Aplicada a Biomedicina y Medioambiente-Universidad de Granada (UEQ-UGR), ES18071-Granada, Spain.

^dDepartamento de Física Aplicada, Radiología y Medicina Física, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, 14071 Córdoba, Spain.
qo2rosaf@uco.es.

Debido al aumento de las emisiones de CO₂ y su impacto climático, la fotorreducción de CO₂ (CO₂PR) surge como una alternativa sostenible para generar productos químicos de valor añadido a partir de luz visible y agua, imitando la fotosíntesis. En este contexto, los hidróxidos dobles laminares (LDHs) destacan como catalizadores por su alta capacidad de adsorción de CO₂, propiedades redox y flexibilidad composicional.^{1,2} En este trabajo se sintetizaron LDHs de Zn-Cr, variando la relación molar Zn/Cr (2, 3 y 4) e intercalando diferentes aniones (puntos cuánticos de grafeno –GQD–, dodecilsulfato de sodio –SDS– y desoxicolato de sodio –SDC–), con el fin de evaluar su actividad en la reducción fotocatalítica de CO₂ bajo luz visible.

La caracterización estructural mediante difracción de rayos X (XRD) confirmó la formación de LDH, evidenciada por la presencia de las reflexiones características de los planos (003), (006) y (009). Los aniones GQD, SDS y SDC se intercalaron entre las láminas, incrementándose el espaciado interlaminar, de acuerdo con el desplazamiento hacia menor valor de ángulo en la señal correspondiente al plano (003). La incorporación de los aniones interlaminares y la estructura de LDH fueron corroboradas mediante espectroscopia Raman y FTIR. Las propiedades texturales de los catalizadores se evaluaron mediante isoterma de adsorción-desorción de nitrógeno. Los materiales con GQD y SDC presentaron mayores áreas superficiales, volúmenes y diámetros de poro, lo que podría facilitar la difusión de los reactivos hacia los centros activos durante el proceso fotocatalítico. El tamaño de partícula se determinó mediante difracción láser, observándose que los materiales con menor tamaño de partícula correspondieron a aquellos con mayor proporción de Zn ($M^{2+}/M^{3+} = 4$) y con SDC como anión interlaminar.

Los materiales fueron evaluados como fotocatalizadores en un sistema de tres componentes con [Ru(bpy)₃]²⁺ como fotosensibilizador (PS) y trietanolamina como donador sacrificial de electrones (ED), bajo irradiación con luz visible ($\lambda = 450$ nm). Después de 24 horas de reacción, los catalizadores LDH2-Cl, LDH3-Cl, LDH4-Cl, LDH3-GQD, LDH3-SDS y LDH3-SDC alcanzaron producciones de CO de 4922, 7052, 7620, 6671, 5471 y 10977 $\mu\text{mol g}^{-1}$, respectivamente. Todos los materiales mostraron una elevada selectividad hacia CO (aproximadamente 90%) considerando los productos en fase gaseosa (CO y H₂).

Agradecimientos

Los autores agradecen las ayudas recibidas por parte del Ministerio de Ciencias, Innovación y Universidades por los Proyectos PID2022/142657OB-I00 y PDC2022_133973_I00 y la Ayuda “Juan de la Cierva” (JDC 2022-048903-I), Consejería de Universidad, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía (Proyecto ProyExcel_00492 y grupo FQM-346), Universidad de Córdoba (PPIT-2022E-025786), fondos Feder y Fundación Ramón Areces por la Ayuda BEVP36S17981. También se agradece al Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA) y a los Servicios Centrales de Apoyo a la Investigación (SCAI) de las Universidades de Córdoba y Málaga por las medidas realizadas.

(1) Xu, X. Liu, Z. Zhou, L. Deng, L. Liu, y M. Xu. *Chemical Engineering Journal*, **2022**, 442, 136148.

(2) M. Premila Jerome, F. Ahmed Alahmad, M. Taleb Salem, y M. Tahir. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, **2022**, 10, 108151.

ORGANOSÍLICES PERIÓDICAS MESOPOROSAS BASADAS EN FTALOCIANINA DE COBALTO Y GRUPOS AMINOS PARA LA ADSORCIÓN Y FOTORREDUCCIÓN DE CO₂

M. A. Pozo López^a, R. Rojas Luna^b, S. Roy^b, J. R. Ruiz Arrebola^a, F. J. Romero Salguero^a,
D. Esquivel Merino^a

^aDepartamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA),
Facultad de Ciencias, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, 14071 Córdoba, España.

^bSchool of Natural Science, University of Lincoln, Green Lane, Lincoln LN6 7DL, UK.
q12esmem@uco.es

El dióxido de carbono (CO₂) es uno de los gases de efecto invernadero más relevante, cuya concentración atmosférica se ha incrementado significativamente como consecuencia del uso de combustibles fósiles como principal fuente energética. Este fenómeno está provocando graves efectos en el planeta, por lo que, durante los últimos años, las investigaciones se están centrando en la búsqueda de procesos que mitiguen el aumento de este gas. Entre todas ellas, la reducción fotocatalítica¹, capaz de convertir este gas en otros productos químicos utilizando la luz visible, y la captura mediante materiales porosos conteniendo grupos amino², han demostrado ser las estrategias más prometedoras.

En este trabajo se han combinado ambas estrategias con el fin de conseguir organosílices periódicos mesoporosos³ (PMOs) que contengan unidades de ftalocianina de cobalto, activas en la reducción fotocatalítica de CO₂, y diferentes diaminas, capaces de adsorber dicho gas. El procedimiento seguido se muestra en la Figura 1. En una primera etapa, los precursores organosilícicos 1,2-bis(trietoxisilil)etano (BTÉE), (3-cloropropil)trietoxisilano (CIPTS) y ftalocianina de cobalto tetraalcoxisilano (CoPc(SiOEt)₄) se condensaron alrededor del surfactante Pluronic P123 en medio ácido. Tras la eliminación del surfactante, los grupos cloruro fueron modificados con dos diaminas, dando lugar a los materiales mesoporosos ordenados CoPc-DAH-PMO y CoPc-APBDA-PMO, que presentan contenidos de diaminas de 0,515 mmol g⁻¹ y 0,565 mmol g⁻¹, respectivamente.

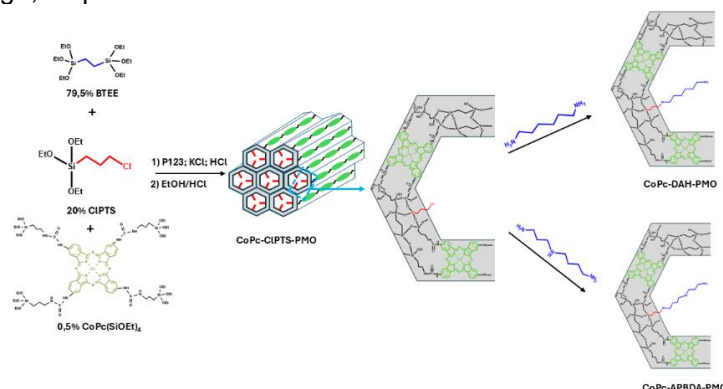


Figura 1. Síntesis de materiales PMOs.

Agradecimientos

Los autores agradecen las ayudas recibidas por parte del Ministerio de Ciencias, Innovación y Universidades por los Proyectos PID2022/142657OB-I00 y PDC2022-133973-I00 y beca FPI (PREP2022-000024), Consejería de Universidad, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía (Proyecto ProyExcel_00492 y grupo FQM-346), y Fondos Feder.

¹ Angeles Navarro, M.; Sain, S.; Wünschek, M.; Pichler, C. M.; Romero-Salguero, F. J.; Esquivel, D.; Roy, S. *Nanoscale* **2023**, 15, 2114–2121.

² De Canck, E.; Ascoop, I.; Sayari, A.; Van Der Voort, P. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2013**, 15, 9792 – 9799.

³ Van Der Voort, P.; Esquivel, D.; De Canck, E.; Goethals, F.; Van Driessche, I.; Romero-Salguero, F. J. *Chem.Soc.Rev.*, **2013**, 42, 3913 – 2955.

FOTOCATALIZADORES BASADOS EN HIDRÓXIDOS DOBLES LAMINARES DE Zn Y Cr Y ÓXIDO DE GRAFENO PARA LA CONVERSIÓN EFICIENTE DE CO₂ CON LUZ VISIBLE

Dolores G. Gil-Gavilán^a, Raúl Rojas-Luna^b, Juan Amaro-Gahete^c, Daniel Cosano^a, Miguel Castillo-Rodríguez^d, Dolores Esquivel^a, Souvik Roy^b, José R. Ruiz^a, Francisco J. Romero-Salguero^a.

^a*Departamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Facultad de Ciencias, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Marie Curie, 14071 Córdoba, Spain.*

^b*School of Chemistry, University of Lincoln, Green Lane, Lincoln LN6 7DL, U.K.*

^c*Materiales Polifuncionales Basados en Carbono (UGR-Carbon), Departamento de Química Inorgánica- Unidad de Excelencia Química Aplicada a Biomedicina y Medioambiente-Universidad de Granada (UEQ-UGR), ES18071-Granada, Spain.*

^d*Departamento de Física Aplicada, Radiología y Medicina Física, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, 14071 Córdoba, Spain.
q52gigad@uco.es.*

La transformación directa de la energía solar en energía química constituye uno de los grandes desafíos científicos actuales. El incremento continuo en los niveles de dióxido de carbono (CO₂), impulsa la búsqueda de estrategias sostenibles para mitigar el calentamiento global. En este contexto, la utilización de la luz solar como fuente renovable para la conversión fotocatalítica de CO₂ (CO₂PR) a monóxido de carbono (CO) representa una vía prometedora, dado que el CO puede emplearse como precursor en la obtención de productos químicos de valor añadido.¹

En este contexto, los hidróxidos dobles laminares (LDH) actúan como catalizadores prometedores por sus propiedades redox y flexibilidad composicional.² Asimismo, el óxido de grafeno (GO), por su alta conductividad electrónica, ha sido incorporado en composites con LDH para mejorar la eficiencia catalítica.³

En este trabajo, se sintetizaron LDH de Zn-Cr (LDH-Cr) y composites con distintas cantidades de GO (LDH-GO1, LDH-GO2 y LDH-GO3) mediante el método de coprecipitación. La caracterización estructural y morfológica se realizó por ICP-MS, XRD, Raman, TEM, SAED y EDS, confirmando la presencia de ambos componentes y la relación metálica del LDH. El análisis elemental mostró un incremento progresivo de la cantidad de carbono en los composites. El tamaño de partícula, estudiado por difracción láser, fue menor en LDH-GO2, lo que podría favorecer la actividad catalítica al facilitar el acceso a los sitios activos.

Los materiales se evaluaron como fotocatalizadores en un sistema de tres componentes con Ru(bpy)₃²⁺ como fotosensibilizador (PS) y trietanolamina como agente de sacrificio de electrones (ED) bajo luz visible ($\lambda = 450$ nm). Tras 24 h, la producción de CO fue de 7052, 12830, 13933 y 3913 $\mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}$ para LDH-Cr, LDH-GO1, LDH-GO2 y LDH-GO3, respectivamente. La mayor eficiencia de LDH-GO2 se atribuye a su menor tamaño de partícula y mejor transferencia electrónica. Estudios de fotoluminiscencia revelaron un mecanismo de *quenching* oxidativo, indicando una transferencia de electrones desde el PS hacia los centros activos del LDH, facilitando la reducción de CO₂.

Agradecimientos

Los autores agradecen las ayudas recibidas por parte del Ministerio de Ciencias, Innovación y Universidades por los Proyectos PID2022/142657OB-I00 y PDC2022_133973_I00 y la Beca "Juan de la Cierva" (JDC 2022-048903-I), Consejería de Universidad, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía (Proyecto ProyExcel_00492 y grupo FQM-346), Universidad de Córdoba (PPIT-2022E-025786), fondos Feder y Fundación Ramón Areces por la Beca BEVP36S17981. También se agradece al Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA) y al Servicio Central de Apoyo a la Investigación (SCAI) de la Universidad de Córdoba y Málaga por las medidas realizadas.

- (1) Roy, S.; Reisner, E. *Angew. Chemie Int. Ed.* **2019**, *58* (35), 12180.
- (2) Jerome, M. P.; Alahmad, F. A.; Salem, M. T.; Tahir, M. *J. Environ. Chem. Eng.* **2022**, *10* (5), 108151.
- (3) Lan, M.; Fan, G.; Yang, L.; Li, F. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2014**, *53* (33), 12943.

SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y ESTUDIO CATALÍTICO DE NANOPARTÍCULAS DE PMO PARA LA FOTOREDUCCIÓN DE CO₂

M. A. Pozo López^a, Sara Garrido Fernández^a, R. Rojas Luna^b, D. G. Gil Gavilán^a, S. Roy^b, J. R. Ruiz Arrebola^a, F. J. Romero Salguero^a, D. Esquivel Merino^a

^a Departamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Facultad de Ciencias, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, 14071 Córdoba, España.

^b School of Natural Science, University of Lincoln, Green Lane, Lincoln LN6 7DL, UK.
qa2gafes@uco.es

Ante el desafío ambiental que suponen los elevados niveles de CO₂ en la atmósfera, la comunidad científica ha dirigido sus esfuerzos hacia el desarrollo de tecnologías capaces de convertir el CO₂ en compuestos de mayor valor añadido. Entre las opciones más prometedoras se encuentra la reducción fotocatalítica de CO₂, un enfoque que imita la fotosíntesis natural mediante el aprovechamiento de la energía solar. En este contexto, las nanopartículas de PMOs (organosílices periódicas mesoporosas), materiales híbridos formados a partir de precursores trialcoxiororganosilano del tipo (R'O)₃Si-R-Si(OR')₃, han despertado un gran interés.

En este trabajo se han sintetizado distintas nanopartículas de PMOs (PMO NPs), con unidades de ftalocianina de cobalto y puentes etano en su estructura, en presencia de OTAB como surfactante y en diferentes medios básicos de reacción: trietanolamina (PMO NPs-1), hidróxido de sodio (PMO NPs-2) y amoníaco (PMO NPs-3)¹⁻³. Las nanopartículas fueron caracterizadas por diversas técnicas y estudiadas en la fotorreducción del CO₂ a CO (**Figura 1**).

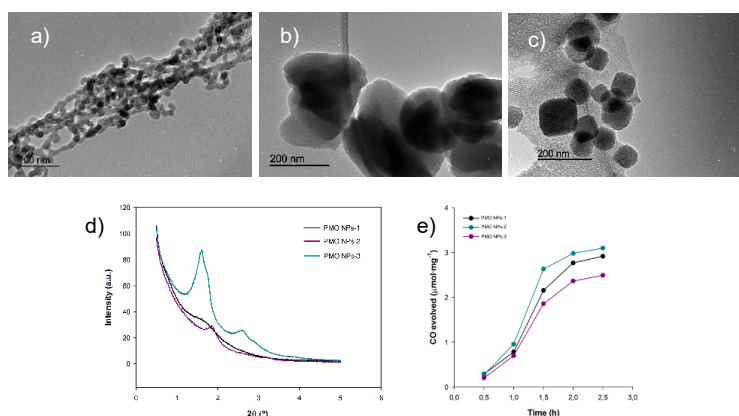


Figura 1. (a)-(c) Imágenes de Microscopía de Transmisión Electrónica de las PMO NPs 1, 2 y 3 respectivamente. (d) Difractograma de Rayos X de las PMO NPs. (e) Actividad catalítica de las PMO NPs en la fotorreducción de CO₂.

Agradecimientos

Los autores agradecen las ayudas recibidas por parte del Ministerio de Ciencias, Innovación y Universidades por los Proyectos PID2022/142657OB-I00 y PDC2022-133973-I00 y beca FPI (PREP2022-000024), Consejería de Universidad, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía (Proyecto ProyExcel_00492 y grupo FQM-346), Universidad de Córdoba (PPIT-2022E-025786) y Fondos Feder.

¹ Tham, H.; Xu, K.; Lim, W.; Chen, H.; Zheng, M.; Thng, T.; Venkatraman, S.; Xu, C.; Zhao, Y. *ACS Nano*, **2018**, 12, 11936-11948.

² Aggad, D.; Jimenez, C.; Dib, S.; Croissant, J.; Lichon, L.; Laurencin, D.; Richeter, S.; Maynadier, M.; Alsaiari, S.; Boufatit, M.; Raehm, L.; Garcia, M.; Khashab, N.; Gary-Bobo, M.; Durand, J. *ChemNanoMat*, **2018**, 4, 46-51.

³ Kaczmarek, A.; Abednatanzi, S.; Esquivel, D.; Krishnaraj, C.; Jena, H.; Wang, G.; Leus, K.; Van Deun, R.; Romero-Salguero, F.; Van Der Voort, P. *Microporous Mesoporous Mater.*, **2020**, 291, 109687.

MATERIALES ORGANOSILÍCICOS PERIÓDICOS MESOPOROSOS CON FTALOCIANINA DE COBALTO Y FOTOSENSIBILIZADORES DE RU/IR PARA LA REDUCCIÓN FOTOCATALÍTICA DE CO₂

M. A. Pozo López^a, R. Rojas Luna^b, S. Roy^b, J. R. Ruiz Arrebola^a, F. J. Romero Salguero^a, D. Esquivel Merino^a

^a Departamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Facultad de Ciencias, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, 14071 Córdoba, España.

^b School of Natural Science, University of Lincoln, Green Lane, Lincoln LN6 7DL, UK.
q52polom@uco.es

Actualmente, uno de los principales desafíos medioambientales es el incremento de las concentraciones de CO₂ en la atmósfera, lo cual intensifica el efecto invernadero. Una estrategia prometedora para enfrentar este problema y, al mismo tiempo, transformar el CO₂ en productos de mayor valor añadido es la reducción fotocatalítica, un proceso que imita la fotosíntesis natural de las plantas. Los PMOs (organosilícicos mesoporosos periódicos) son materiales híbridos orgánico-inorgánicos obtenidos a partir de precursores trialcxiorganosilanos con la fórmula general (R'O)₃Si-R-Si(OR')₃. Estos materiales poseen elevadas áreas superficiales y tamaño de poro ajustable. Además, permiten la incorporación de complejos metálicos moleculares en su estructura ordenada, lo que los convierte en candidatos ideales para la síntesis de catalizadores heterogéneos aplicados a la reducción fotocatalítica del CO₂.^{1,2}

En este trabajo, se presenta la síntesis de materiales PMOs multifuncionales que integran, dentro de su estructura, tanto las unidades catalíticas como las fotosensibilizadoras necesarias para llevar a cabo la fotorreducción del CO₂. Estos materiales fueron preparados mediante la co-condensación del precursor 1,2-bis(trietoxisilil)etano (BTEE) con dos precursores funcionales: uno que contiene unidades de ftalocianina de cobalto (CoPc(SiOEt)₄) y otro con un ligando nitrogenado (ndppz).³ A través del ligando ndppz, se logró anclar complejos fotosensibilizadores del tipo [Ru(bpy)₃Cl₂]²⁺ o [Ir₂(ppy)₄Cl₂]³⁺ al material CoPc-ndppzPMO.

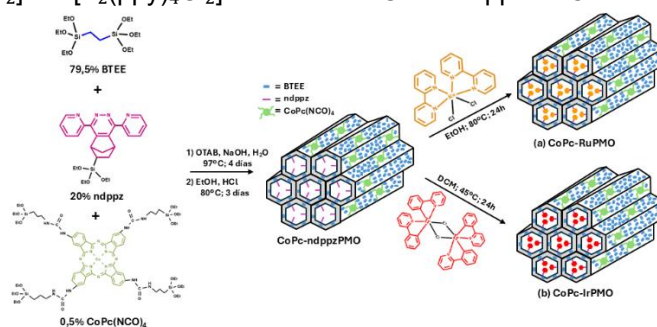


Figura 1. Procedimiento de síntesis de materiales PMO con unidades catalíticas y fotosensibilizadoras.

Agradecimientos

Los autores agradecen las ayudas recibidas por parte del Ministerio de Ciencias, Innovación y Universidades por los Proyectos PID2022/142657OB-I00 y PDC2022-133973-I00 y beca FPI (PREP2022-000024), Consejería de Universidad, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía (Proyecto ProyExcel_00492 y grupo FQM-346), y fondos Feder.

¹ Angeles Navarro, M.; Sain, S.; Wünschek, M.; Pichler, C. M.; Romero-Salguero, F. J.; Esquivel, D.; Roy, S., *Nanoscale*, **2023**, 15, 2114 – 2121.

² Rojas-Luna, R.; Romero-Salguero, F. J.; Esquivel, D.; Roy, S., *ACS Appl Energy Mater* **2024**, 7, 5924 – 5936.

³ Rojas-Luna, R.; Castillo-Rodríguez, M.; Ruiz, J. R.; Jiménez-Sanchidrián, C.; Esquivel, D.; Romero-Salguero, F. J., *Dalton Transactions* **2022**, 51, 18708 – 18721.

PREPARACIÓN DE CATALIZADORES DE C_3N_4 A PARTIR DE PLA PARA EL FOTOREFORMADO DE ÁCIDO LÁCTICO

**F.J. López-Tenllado¹, D. Ortega-Domínguez, D. Casamayor¹, A. Ariza-Pérez¹,
M.C. Herrera-Beurnio¹, J. Hidalgo-Carrillo¹, F.J. Urbano¹, A. Marinas¹**

¹Departamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA),
Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, 14014 Córdoba, España.
b42lotef@uco.es

El nitruro de carbono ($g-C_3N_4$) es un excelente fotocatalizador, gracias a su capacidad para aprovechar la radiación visible, su alta estabilidad, bajo coste y sencilla síntesis. No obstante, para mejorar sus propiedades texturales y químicas se buscan métodos para modificar sus propiedades. Una estrategia sostenible para mejorar sus propiedades y, al mismo tiempo, abordar la problemática ambiental de los plásticos consiste en usar residuos plásticos como precursores. Esta ruta permite valorizar desechos que se acumularían en el medioambiente. El uso de plásticos, como el PET, como precursor ha demostrado su capacidad para reducir el bandgap, aumentar el área superficial y mejorar la actividad del $g-C_3N_4$ en la degradación de colorantes. Asimismo, la introducción de especies químicas derivadas de otros plásticos, como el polietileno (PE) o el ácido poliláctico (PLA), podrían favorecer una separación de cargas más eficiente, reforzando su potencial en procesos fotocatalíticos. Estudios previos han explorado la modificación del $g-C_3N_4$ mediante la adición de ácido láctico durante la síntesis [1].

El $g-C_3N_4$ es un excelente catalizador en el fotoreformado de compuestos orgánicos, promoviendo la generación de H_2 verde y contribuyendo a la transición energética. Para maximizar estos beneficios, lo mejor es usar agentes de sacrificio que sean residuos, por lo que los plásticos son excelentes candidatos para mitigar la contaminación y producir combustibles limpios. En este sentido, el fotoreformado de diferentes plásticos (PET, PE, PLA) y de sus derivados (el ácido láctico) ha permitido alcanzar producciones de H_2 de hasta 20 mmol/h·g [2].

En este trabajo, se han preparado siete catalizadores de $g-C_3N_4$ a partir de melamina como precursor y distintas proporciones de PLA (0–25% en peso) como aditivo, denominados C_3N_4 -PLA. Para aumentar el área superficial y la incorporación del ácido láctico en la estructura, el PLA fue pretratado con una disolución de NaOH para su despolimerización antes de la mezcla con la melamina. Posteriormente, la fue calcinado a 520 °C. Posteriormente se les incorporó platino en un 0.4% en peso por fotodeposición e impregnación. Los sólidos fueron caracterizados mediante XPS, XRD, TEM, SEM, porosimetría de adsorción/desorción de N_2 , espectroscopía UV-visible y espectroscopía infrarroja. Finalmente, todos ellos fueron evaluados en el fotoreformado del ácido láctico (10% v/v) o PLA en un reactor con flujo de argón y radiación solar simulada. Las producciones de H_2 y CO_2 fueron monitorizadas por espectroscopía de masas.

Los resultados indicaron que la incorporación de PLA en los catalizadores provocó un aumento en la absorción de radiación visible, lo que podría mejorar su fotoactividad. El análisis por espectroscopía infrarroja reveló una mayor presencia de grupos funcionales oxigenados provenientes del PLA, mientras que la estructura cristalina del $g-C_3N_4$ se mantuvo. No obstante, al incrementar la cantidad de PLA, la cristalinidad se redujo progresivamente, siendo esta pérdida notable en la muestra con un 25% de PLA. Respecto su actividad, se alcanzó una producción de H_2 de hasta 1300 $\mu\text{mol/h}\cdot g_{\text{cat}}$, cuando se empleaba ácido láctico, mientras que para el fotoreformado del PLA se llegó hasta una producción de H_2 de 1000 $\mu\text{mol/h}\cdot g_{\text{cat}}$.

Agradecimientos

Proyectos PID2022-142275OB-I00 financiado por MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y FEDER, UE, TED2021-132224B-I00 financiado por MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y Unión Europea "NextGenerationEU/PRTR" y proyecto PP2F_L1_21 financiado por Universidad de Córdoba, Junta de Andalucía y FEDER, UE

Referencias

- [1] Xinhe Wu, Duoduo Gao, Huogen Yu and Jiaguo Yu, *Nanoscale*, **11**, 9608-9616 (2019)
- [2] Yaqin Wang, Xinxin Xu, Wei Lu, Yuqiu Huo y Lijun Bian, *Dalton Transitions*, **47**, 4219-4227 (2018)

ESTUDIO DE MEZCLAS DIÉSEL/SOLKETAL TERT-BUTIL ÉTER COMO BIOCOMBUSTIBLES PARA MOTORES DE COMBUSTIÓN

Clara Hernández^a, Rafa Estévez^a, Ana Granados^a, Vicente Montes^a

^a *Departamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario CeIA3, Edificio Marie Curie, E-14014, Córdoba, España.
email: q02heluc@uco.es*

El solketal, también llamado 2,2-dimetil-4-hidroximetil-1,3-dioxolano, es el principal producto de reacción de cetilización entre el glicerol y la acetona, y dicho producto se puede utilizar, como aditivo para combustibles [1]. Bien es cierto, que este aditivo presenta algunas desventajas al adicionarlo al diésel, como es su alto punto de ebullición que puede afectar a la volatilidad del combustible, o su elevado contenido en oxígeno, lo que promueve un bajo valor calorífico. Además, los grupos hidroxilo libres hacen que tenga un gran carácter hidrofílico, lo que impide su mezcla con el diésel en proporciones superiores al 5%.

Una alternativa es su transformación en solketal tert-butil éter (STBE), disponible comercialmente y del que no se encuentra mucha información en bibliografía desde su obtención [2]. Este trabajo tiene como objetivo la síntesis del STBE a partir de la reacción de cetilización del 1-mono glicerol tertbutil éter (1-m-GTBE) con acetona y su posterior aislamiento del resto de productos de reacción. Además, se lleva a cabo el estudio de las propiedades fisicoquímicas a tener en cuenta para su uso como aditivo, pues debe de cumplir con diferentes normativas, y se analiza el comportamiento de diferentes mezclas diésel/STBE en un motor de combustión interna.

La reacción de cetilización entre el 1-m-GTBE y la acetona se realiza en un reactor batch con calefacción convencional, con unas condiciones previamente optimizadas por nuestro Grupo de Investigación: Relación molar 1-m-GTBE/Acetona: 10; T: 40 °C; Peso de catalizador: 5% respecto del 1-m-GTBE, que es el reactivo limitante; Tiempo de reacción: 30 minutos y Agitación: 900 rpm. El aislamiento del STBE se ha llevado a cabo por Cromatografía de Columna.

Para el estudio del comportamiento en el motor, se han preparado mezclas directas de STBE en diésel, desde el 1 al 7.5% en volumen, nombradas como D1, D5 y D7.5, donde el número hace referencia al porcentaje de STBE en diésel, y se han medido sus propiedades reológicas: viscosidad, densidad, punto de nube y de fluidez. Estas mismas mezclas son las que se han evaluado en el motor diésel, variando la demanda energética de 1 a 5 kW, obteniéndose valores de potencia generada, consumo y emisión de gases contaminantes.

Los resultados de las mediciones de las propiedades fisicoquímicas mostraron que todas las mezclas cumplen la normativa sobre los requisitos para gasóleo en vehículos de automoción (UNE-EN 590:2022), cuya viscosidad debe estar entre 2,5 – 4,0 cSt. Respecto al punto de nube y de fluidez, todas las mezclas presentaron valores inferiores a los -24 °C, lo que implica una mejora de las mezclas respecto al comportamiento del diésel en climas fríos.

Mediante el estudio en el motor de combustión, se pudo observar como los valores de potencia obtenidos con las mezclas son similares a los del diésel, aunque la mezcla D5 muestra una mejoría respecto del diésel sobre todo a la potencia intermedia (3 kW). Respecto a los valores de opacidad, todas las mezclas exhibieron unos valores inferiores a los obtenidos con el diésel, lo que podría estar relacionado con la mayor cantidad de oxígeno en las mezclas que contienen STBE. Centrándonos en los valores de emisión de NO_x, CO y CO₂, todas las mezclas exhibieron menores emisiones que el diésel, a excepción de los valores obtenidos a 1 kW, donde son similares o ligeramente superiores. Una vez comprobado el buen funcionamiento del STBE como aditivo, se pretende optimizar su síntesis con la finalidad de hacer el proceso lo más económico y beneficioso con el medio ambiente.

[1] A. Cornejo, I. Barrio, M. Campoy, J. Lázaro, B. Navarrete, *Renew Sust Energ Rev*, 79 1400–1413 (2017).

[2] V.O. Samoilov, D.N. Ramazanov, A.I. Nekhaev, A.L. Maximov, L.N. Bagdasarov, *Fuel*, 172 310-319 (2016).

OBTENCIÓN DE SOLKETAL TERT-BUTIL ÉTER MEDIANTE CATÁLISIS HETEROGÉNEA ÁCIDA

A. Granados^a, R. Estevez^a, C. Hernández^a, V. Montes^a

^a Departamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario CeIA3, Edificio Marie Curie, E-14014, Córdoba, España
q02grloa@uco.es

Una de las reacciones de valorización del glicerol (G), subproducto en la obtención del biodiésel, más estudiada es la acetalización con acetona (ACE), en presencia de un catalizador ácido. Esta reacción conduce principalmente al compuesto 2,2-dimetil-4-hidroximetil-1,3-dioxolano, conocido como solketal que se utiliza como aditivo para los combustibles, reduciendo la emisión de partículas, mejorando la estabilidad de los carburantes líquidos y las propiedades en flujo¹. Asimismo, se emplea como disolvente verde en la obtención de fármacos, productos de limpieza, pesticidas, etc.². Al proteger el grupo hidroxilo del solketal por alquilación o esterificación se puede aumentar el carácter hidrófobo de la molécula y una mayor estabilidad frente a la oxidación, ampliando sus posibles aplicaciones, incluido el de los aditivos. El objetivo de este trabajo es la síntesis del compuesto 2,2-dimetil-4-tertbutoximetil-1,3-dioxolano o solketal tertbutil éter (STBE), a partir de la reacción de cetalización del 1-mono tertbutil éter de glicerol (1-m-GTBE) con acetona. Para ello, se optimizaron inicialmente las condiciones de reacción empleando un catalizador comercial ácido, Amberlita 15 (A-15). Posteriormente, se evaluaron diferentes tipos de catalizadores heterogéneos, tanto sintéticos como comerciales, con diferentes propiedades texturales y ácidas, con el objetivo de determinar las características adecuadas para obtener un mayor rendimiento a STBE.

La reacción de acetalización se ha llevado a cabo empleando calefacción convencional en un multirreactor de la marca Syrris-Orbit. El análisis cualitativo y cuantitativo de los productos se ha realizado por CG-EM. Dado que el STBE no se encuentra disponible comercialmente y carece de número CAS, ha sido previamente aislado por Cromatografía de Columna e identificado por ¹H y ¹³C RMN. Los catalizadores sintéticos empleados en dicha reacción están basados en sílice, tanto amorfa como estructurada, funcionalizada con grupos sulfónicos incorporados mediante distintas metodologías, *grafting* y *one pot*³. Además, se utilizaron distintas zeolitas comerciales, entre ellas HZSM-5 (50), HZSM-5 (30) y HY-5.2, donde el número entre paréntesis representa la relación molar SiO₂/Al₂O₃. A partir de los resultados obtenidos en la optimización utilizando Amberlita-15 (A-15) como catalizador, se determinan que las condiciones óptimas para la reacción son: 30 minutos de tiempo de reacción; 900 rpm; Temperatura de 40 °C; relación molar acetona:1-MTBG de 10:1; y un 2.5% en peso de catalizador respecto a la cantidad de 1-MTBG. En base a los resultados obtenidos se pudo observar que los catalizadores con grupos sulfónicos en su estructura presentaron un mayor rendimiento hacia el STBE que las zeolitas, observándose una relación directa entre la acidez y la reactividad en estos sólidos. En el caso de las zeolitas, para explicar su comportamiento es necesario considerar las propiedades texturales, y su influencia sobre la densidad de centros ácidos. En este sentido, con estos sólidos existe una relación directa entre la densidad de centros ácidos y la capacidad de producir STBE. Las zeolitas tipo HZSM-5 presentan densidades de centros ácidos similares entre sí, mientras que la zeolita HY presenta una densidad ligeramente menor, lo que se refleja en los valores de rendimiento obtenidos en estos catalizadores sin considerar el área superficial: 74% con ambas zeolitas tipo HZSM-5 y 55% para la HY.

Tras este estudio se profundizará en la estabilidad de los catalizadores más activos en la reacción, realizando diferentes ciclos consecutivos para observar su desactivación catalítica.

[1] A. Cornejo, I. Barrio, M. Campoy, J. Lázaro, B. Navarrete, *Renew Sust Energ Rev*, **79** 1400–1413 (2017).

[2] J.I. García, H. García-Marín, E. Pires, *Green Chemistry*, **16** 1007–1033 (2014).

[3] M.L. Testa, V. La Parola, A.M. Venezia, *Catal. Today* **223** 115–121 (2014).

Agradecimientos

Investigaciones financiadas por los proyectos TED2021-132224B-I00 (financiado por MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y Unión Europea "NextGenerationEU/PRTR") y PID2022-142275OB-I00 (financiado por MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y FEDER, UE).

TECHNO-ECONOMIC EVALUATION OF DIRECT BIOGAS METHANATION IN POWER-TO-GAS SYSTEMS

Uxía Mata Rivas^a, María José Martín Alfonso^a, Francisco José Martínez Boza^a.

^aCentro de Investigación en Tecnología de Productos y Procesos Químicos
Escuela Técnica Superior de Ingeniería. Universidad de Huelva
Huelva
martinez@uhu.es

Anaerobic digestion of sewage sludge in Wastewater Treatment Plants (WWTPs) has proven to be an effective strategy for waste management, contributing to environmental sustainability and energy recovery. This process generates a stabilized biosolid, suitable for agricultural use, and biogas, a renewable energy source primarily composed of methane (CH_4) and carbon dioxide (CO_2).

Traditionally, biogas is used for heat and power generation or upgraded to biomethane for injection into the natural gas grid. Biomethane also serves as an alternative vehicle fuel and a feedstock for the chemical industry, thus supporting fossil fuel displacement. However, conventional upgrading methods involve CO_2 removal, which typically results in direct emissions or requires additional carbon capture steps.

An innovative alternative is the Power-to-Gas (PtG) approach, where surplus renewable electricity is converted into green hydrogen, which is then reacted with the CO_2 present in biogas to produce additional methane. This route enhances methane yield while valorizing CO_2 and reducing emissions at WWTPs.

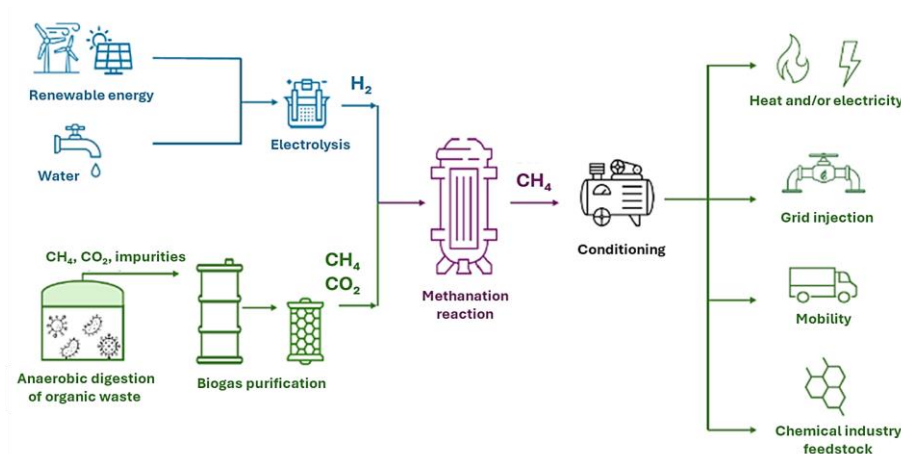


Figure 1. Diagram of the proposed process for renewable methane production.

This study presents a techno-economic feasibility analysis of catalytic direct methanation of a 340 Nm^3/h biogas stream, representing a medium-scale WWTP. The process (Fig. 1) was modeled using Aspen Plus with the goal of producing grid-compliant biomethane. Key challenges identified include catalyst deactivation due to sulfur compounds in the biogas and the need for efficient thermal management, given the exothermic nature of the methanation reaction. Economic viability was found to be sensitive to hydrogen production costs and system integration. Ongoing work focuses on overcoming these limitations to enable scalable deployment of PtG systems in wastewater treatment infrastructures.

Keywords: Power-to-Gas, biogas methanation, WWTP, green hydrogen, CO_2 valorization, energy transition.

Acknowledgements

This work was made possible thanks to the Aspen license provided by the University of Huelva, funded by the Moeve organization.

THERMAL TRANSFORMATION OF FINE-GRAINED MINE RESIDUES TO ENHANCE POZZOLANIC REACTIVITY FOR CEMENTING APPLICATIONS

Manuel Ruíz-Rodríguez^{a,b}, Manuel A. Caraballo^{a,b}, Antonio Diosdado-Aragón^{a,b}, María José Martín-Alfonso^c, Francisco José Martínez-Boza^c.

^aDepartment of Mining, Mechanic, Energetic and Construction Engineering, Higher Technical School of Engineering, University of Huelva, Huelva, Spain.

^bDepartment of Water, Mining and Environment, Scientific and Technological Centre of Huelva, University of Huelva, Huelva, Spain.

^cResearch Center on Chemical Product and Process Technology, Pro2TecS, Higher Technical School of Engineering, University of Huelva, Huelva, Spain.
mcaraballo@dimme.uhu.es

Thermal treatment of fine-grained mine residues is a promising strategy to enhance their pozzolanic reactivity and promote their reuse as supplementary cementitious materials, aligning with circular economy principles. This study investigates the thermal behavior of four representative mining wastes: three tailings (from IOCG, carbonatite, and massive sulfide stockwork deposits) and one filtration sludge from an acid mine drainage treatment plant. The samples underwent chemical, mineralogical, and thermogravimetric analyses, as well as controlled muffle furnace treatments (ranging from 40 to 950 °C), followed by characterization through X-ray diffraction (XRD) and scanning electron microscopy with energy-dispersive spectroscopy (SEM-EDS).

The results reveal several thermally induced mineral transformations with strong implications for reactivity: (1) dehydration of gypsum to bassanite and its subsequent transformation into anhydrite; (2) formation of hematite at 950 °C in iron-rich residues; (3) dehydroxylation of chlorites into a disordered "meta-chlorite" phase, analogous to metakaolinite formation; and (4) thermal decomposition of calcite and dolomite in carbonatite tailings, leading to the formation of lime (CaO) and periclase (MgO). These transformations significantly increase the pozzolanic activity of the residues by raising internal alkalinity and generating reactive amorphous phases.

Overall, the study demonstrates that thermal activation can effectively enhance the cementation potential of mine residues, offering a viable and sustainable alternative to reduce Ordinary Portland Cement (OPC) consumption in mine backfilling operations. The valorization of such waste materials through controlled thermal processing not only contributes to waste reduction but also supports the development of more circular and low-impact mining practices.

Keywords: Thermal activation, mine tailings, pozzolanic activity, circular economy, cementation, mineral transformation, backfilling.

Acknowledgements

This research was developed as part of the project PID2021-124259OA-I00 funded by MICIU/AEI /10.13039/501100011033. M.A.C. was financially supported by the Spanish Ministry of Science and Innovation through the Program Ramon y Cajal 2019, Grant RYC2019-026496 funded by MICIU/AEI /10.13039/501100011033.

TRATAMIENTO DE AGUA RESIDUAL, CONTAMINADA CON ANTIBIÓTICO, VIA PROCESO ANAEROBIO AUTOTÉRMICO

M.J. San José, R. López, S. Alvarez

*Universidad del País Vasco UPV/EHU, Departamento de Ingeniería Química, Bilbao
mariajose.sanjose@ehu.eus.*

El aumento de la presencia de residuos de fármacos en aguas residuales urbanas e industriales representa un problema medioambiental debido al aumento en el uso de medicamentos [1]. Existen tecnologías convencionales en las instalaciones de depuración de aguas residuales (EDAR) no eliminan por completo estos contaminantes emergentes [2]. El Real Decreto 3/2023 establece criterios de calidad de las aguas de consumo humano y recoge ciertos contaminantes emergentes que puedan presentar un riesgo para la salud, recogida por la Unión Europea entre los que se encuentran los fármacos, con previsión de eliminación para 2035 [3]. El Plan de Acción Circular 2020 de la Unión Europea detalla los contaminantes que deben ser eliminados del agua [4].

La digestión anaerobia podría contribuir a lograr los objetivos de neutralidad energética de la Unión Europea con generación de energía renovable, biogás [5].

La tecnología de Spouted Bed se basa en el movimiento cíclico de las partículas del lecho en surtidor y se ha aplicado en el tratamiento térmico de biomásas residuales para obtención de energía por combustión [6-7] y estudio de transferencia de calor [6].

En este trabajo se ha realizado un tratamiento anaerobio de agua residual con contenido de antibiótico, amoxicilina, utilizando inóculo proveniente de una planta de tratamiento de aguas residuales. El proceso anaerobio se ha llevado a cabo en reactor de 2 litros encamisado calorifugado a 36°C, utilizando los gases salientes procedentes del tratamiento térmico de residuos alimentarios, realizado en un reactor spouted bed cónico, diseñado al efecto, de alta transferencia de calor y materia [6-7].

Durante el proceso se ha monitorizado el pH y se han realizado medidas periódicas de los sólidos totales y volátiles mediante muestreo. Además, se ha dispuesto de bolsas Tedlar para la recogida del gas producido, cuyo volumen se ha determinado mediante un gasómetro y su composición mediante el analizador Biogas 5000 y mediante cromatografía de gases.

Como resultado se ha obtenido una buena eliminación de sólidos volátiles y sólidos totales del fármaco contaminante del agua residual y una producción de biogás con una concentración significativa de metano.

En conclusión, la digestión anaerobia realizada en el agua contaminada con el medicamento, se puede considerar un proceso autotérmico, ya que la energía necesaria para llevarlo a cabo se obtiene a partir del valorización térmica de residuos domésticos. Por lo que este proceso tiene potencial para promover la economía circular de los residuos, y contribuir a la descarbonización del Medio Ambiente y a alcanzar el objetivo de la Ley 7/2022 de Residuos en vigor. que promulga residuo cero [8].

Agradecimientos. Esta publicación es parte del proyecto de I+D+i PID2021-126331OB-I00 financiado por MCIU/AEI/10.13039/501100011033/ y por FEDER Una manera de hacer Europa y del proyecto TED2021-130150B-I00 financiado por MCIU/AEI/10.13039/501100011033/ y por EU NextGenerationEU/PRTR.

Referencias

- [1] Fernández C, González-Doncel M, Pro J, et al. Sci. Total Environ 408, 543 (2010).
- [2] Rout PR, Zhang TC, Bhunia P, Surampalli RY Science of Total Environment, 753, 141990(2021).
- [3] Real Decreto 3/2023. Calidad del agua de consumo. BOE, 9, 4253(2023).
- [4] Comisión Europea. Nuevo Plan de Acción sobre la Economía Circular. (COM(2020) 98 final.
- [5] Directiva 2024/3019. Diario Oficial de la Unión Europea.
- [6] San José MJ, Alvarez S, López R. (2023). Fuel Process. Technol., 239, 107543.
- [7] San José MJ, Alvarez S, López R. Catal Today, 305, 13-18(2018).
- [8] Ley 7/2022 de residuos y suelos contaminados para una economía circular. BOE 85, 48578.

PLATAFORMA SENSORIZADA INTELIGENTE PARA LA CUANTIFICACIÓN DEL IMPACTO ODORÍFERO ASOCIADO A LA DEPURACIÓN DE AGUAS RESIDUALES URBANAS

M. Salinas^a, J.A. Siles^a, M.C. Gutiérrez^a, M. Toledo^a, E. Muñoz^c, F. Tavares^b, A.F. Chica^a, M.A. Martín^a

^aDepartamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química.

^b Departamento de Mecánica de Medios Continuos y Teoría de Estructuras

^c Departamento de Física

^{a,c} Edificio Marie Curie. ^b Edificio Leonardo da Vinci. Campus Universitario de Rabanales, Carretera N-IV, km 396

maria.salinas@uco.es

Las Estaciones Depuradoras de Aguas Residuales (EDARs) son instalaciones de tratamiento de aguas residuales donde se producen malos olores debido a la materia orgánica biodegradable presente en las aguas y en los lodos generados. Dicha materia orgánica genera emisiones de compuestos sulfurados volátiles, los cuales, incluso en concentraciones muy bajas, son fácilmente perceptibles debido a su bajo umbral olfativo. En este contexto, las emisiones odoríferas generadas por los principales focos de una EDAR urbana se pueden cuantificar aplicando la técnica de olfatometría dinámica. La línea de fangos suele ser la principal fuente de emisión global de olores (>90%), registrándose altas tasas de emisión de olor (OER, ouE/s) asociadas a diversas operaciones unitarias. La estacionalidad influye en la emisión de compuestos odoríferos, ya que la cinética de degradación de materia orgánica, dependiente de la temperatura, varía a lo largo del año. Muchas plantas disponen de sistemas de control de olores y, por lo tanto, pueden intensificar su funcionamiento en función de la necesidad. Esta decisión suele depender, en gran medida, de las quejas vecinales. Por ello, disponer de sistemas de medición on-line de la concentración de olor o de los compuestos responsables del mal olor es cada vez una estrategia más perseguida por los operadores en aras de evitar episodios puntuales de olor.

El objetivo de este estudio ha sido el desarrollo de una plataforma sensorizada, diseñada expresamente como dispositivo de cuantificación en tiempo real del impacto oloroso. Para ello, se ha buscado una solución sencilla, robusta y sensible basada en microelectrónica con tecnología de semiconductores, de fácil manejo, lectura rápida y, sobre todo, de bajo coste, con el fin de garantizar la sostenibilidad en su utilización. Se trata de un prototipo inteligente y sensorizado que permite evaluar el impacto oloroso mediante un algoritmo que integra la respuesta de sensores para detectar las familias de compuestos químicos más representativas y responsables del mal olor en las EDARs. Paralelamente a su uso, se han realizado análisis semicuantitativos (TD-GC/MS y GC/FPD), que han permitido detectar la presencia de diversas familias de compuestos olorosos en la zona de cabecera de planta, desarenador-desengrasador, espesado y deshidratación de fango, tales como terpenos, hidrocarburos alifáticos, compuestos aromáticos y sulfurados. Una vez identificada la problemática en los puntos críticos de la instalación, el uso de una plataforma sensorizada permite detectar concentraciones coincidentes con la superación de umbrales de olor/concentración que podrían resultar problemáticos desde el punto de vista social y ambiental. Como complemento, se ha empleado la olfatometría dinámica para cuantificar la concentración de olor, siendo esta la técnica analítica normalizada a nivel europeo y aceptada mundialmente.

El sistema consta de un módulo de transmisión LoRa-LoRaWAN que envía la respuesta de los sensores a un servidor para toma de decisiones, además de batería, panel solar y microcontrolador. Como novedad respecto a las narices electrónicas, se realiza la conversión de la respuesta del sensor a concentración de olor. A fecha de hoy, se está trabajando en una red de detectores en los puntos críticos en EDAR. La existencia de una red de detección permitiría optimizar su funcionamiento, ajustándose a necesidades variables, mejorando la calidad del aire y optimizando el uso de recursos.

Agradecimientos: La financiación se ha obtenido a través del PDC2023-145916-I00, Ministerio de Ciencia e Innovación.

DESARROLLO DE NUEVOS MATERIALES FUNCIONALES DESTINADOS A LA CONSTRUCCIÓN A PARTIR DE SUBPRODUCTOS AGRÍCOLA LOCALES

Marina Rodríguez^{a,b}, Esther Rincón^{a,b}, María Pinillos^{a,b}, Luis Serrano^{a,b*}

^a*Inorganic Chemistry and Chemical Engineering Department, BioPrEn RNM 940 Research Group, University of Córdoba, Marie Curie (C-3) Building, Ctra. Nnal. Km 396, 14014 Córdoba, Spain. 2 Faculty of Science*

^b*Instituto Químico Para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), University of Córdoba, Marie Curie (C-3) Building, Ctra. Nnal. Km 396, 14014 Córdoba, Spain.
q92roarm@uco.es*

El crecimiento experimentado en la producción de polímeros plásticos, especialmente desde finales del siglo pasado, ha generado impactos medioambientales de gran escala, incentivando la búsqueda de alternativas sostenibles, tanto en su origen como en el proceso de fabricación. Entre los materiales más utilizados en las últimas décadas se encuentra el poliuretano, el cual enfrenta grandes críticas en cuanto a su origen petroquímico y a los desafíos asociados con su reciclaje. Sin embargo, su gran versatilidad y amplio rango de aplicaciones hace a este material difícilmente reemplazable. En este escenario, la biorrefinería se perfila como un modelo tecnológico prometedor para convertir recursos vegetales (especialmente, residuos) en productos de alto valor añadido, de forma que se favorezca la economía circular y una producción menos dependiente de los recursos fósiles.

Este trabajo presenta una estrategia de valorización integral de un residuo agrícola mediante la formación de poliols de origen biológico, diseñados para reemplazar parcialmente los componentes tradicionales usados en la fabricación de espumas de poliuretano. Se desarrollaron dos tipos de biopoliols: uno a partir de lignina aislada de paja de cebada y otro obtenido directamente de la biomasa sin separación previa, lo que permitió comparar su desempeño en cuanto a eficiencia de síntesis y calidad del producto final. Además, para valorizar al completo la fuente de materia prima y reducir al mínimo los residuos generados en el proceso, se incorporó un refuerzo estructural de lignonanofibras de celulosa (LNFC), con el objetivo de mejorar el comportamiento mecánico y térmico de las formulaciones, aspectos requeridos para materiales aislantes destinados al sector de la construcción. Por otra parte, para el estudio del proceso de crecimiento de la espuma, se reprodujeron las formulaciones consideradas óptimas en molde cerrado, con el fin de provocar un aumento en la densidad de la estructura y una mejora del comportamiento de estos polímeros.

Se realizó una espuma de referencia con cada tipo de biopoliol y cuatro espumas reforzadas con distintos porcentajes en peso de LNFC (1, 3, 5 y 7 %). Los resultados obtenidos evidenciaron que el biopoliol obtenido de la materia prima sin fraccionamiento fue óptimo para la síntesis de espumas de poliuretano con mayor resistencia mecánica en comparación con el biopoliol sintetizado a partir de lignina, cuyas espumas mostraron una mayor flexibilidad y una estructura celular más abierta. Además, la incorporación de LCNF provocó un aumento significativo de la resistencia a la compresión y módulo de Young de estos materiales logrando, en algunos casos, mejoras de más del 100 % con la adición de un 3% de LCNF. En cuanto a las espumas crecidas en molde cerrado, sintetizadas con el biopoliol llevado a cabo sin fraccionamiento de la biomasa, se observó una ligera caída de las propiedades mecánicas debida al curado más lento del material que produjo la formación de una red más homogénea. Sin embargo, en este caso, los materiales resultantes mostraron una mejora significativa de la resistencia térmica, especialmente con la adición de un 5 % de LCNF, cuyos picos máximos de degradación sufrieron un desplazamiento hacia mayores temperaturas de más de 40 grados.

EFECTO DE LA INCORPORACIÓN DE NANOFIBRAS DE CELULOSA A MATERIALES COMPUESTOS POLIMÉRICOS DEDICADOS A LA IMPRESIÓN 3D

**J.M. Luque¹, P. Ortega-Columbrans^{2,3}, G. Estrella¹, A. Lucena¹, B. Ferrari^{2,4}, R. del Caño⁵,
A. Rodríguez¹, Z. González¹**

¹ BioPrEn Group (RNM-940), Chemical Engineering Department, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Faculty of Science, Universidad de Córdoba, Córdoba 14014, Spain

² Instituto de Cerámica y Vidrio, CSIC, Campus de Cantoblanco, c/ Kelsen 5, Madrid, 28049, Spain

³ COLFEED4Print S.L. Avenida de los Encuartes, 19, Tres Cantos, Madrid, 28760, Spain

⁴ Unidad Asociada CSIC-UCO. Fabricación aditiva de materiales compuestos basados en celulosa funcionalizada, obtenida de residuos de biomasa, Spain

⁵ Department of Physical Chemistry and Applied Thermodynamics, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Faculty of Science, Universidad de Córdoba, Córdoba 14014, Spain
q92luloj@uco.es

En los últimos tiempos, las nanofibras de celulosa (CNF) han disfrutado de gran relevancia en el ámbito científico por sus excelentes propiedades, como son su baja densidad, elevada resistencia a la tracción y gran superficie específica, habiendo sido utilizadas en multitud de áreas. En este contexto, su incorporación a materiales poliméricos compuestos de cara a la impresión 3D aún ha sido escasamente explorada, por lo que estudiar la influencia que su adición tiene en las propiedades del filamento con el que imprimir y en la pieza final obtenida puede arrojar luz a su utilidad en nuevas formulaciones.

En este trabajo, la CNF se ha obtenido a través de un proceso integral de biorrefinería en el cual se parte de un subproducto agroalimentario local, como es la paja de trigo. Tras un sencillo proceso de fraccionamiento de dicha biomasa y un pretratamiento químico con el catalizador TEMPO, seguido de una homogeneización a alta presión, se alcanza la valorización de dicho subproducto, la cual culmina con su incorporación a una matriz termoplástica de ácido poliláctico (PLA) funcionalizada con nanopartículas semiconductoras (TiO₂, CuO, etc.) con la que procesar filamentos destinados a ser utilizados en procesos de manufactura aditiva, concretamente bajo la tecnología FFF (Fused Filament Fabrication). En este contexto, la incorporación de la CNF a la matriz polimérica se destina a modificar sus propiedades microestructurales, como por ejemplo, disminuyendo el grado de hidrofobicidad, alterando sus propiedades mecánicas o aumentando su porosidad, lo cual incrementaría significativamente su área superficial expuesta y, por tanto, aumentando la capacidad funcional que aportan las nanopartículas incorporadas.

De cara al abordaje de la fabricación de los filamentos funcionales formados a partir de una matriz polimérica, nanopartículas y nanofibras de celulosa, existen multitud de metodologías capaces de llevarla a cabo. Sin embargo, estas adolecen de prescindir de una distribución adecuada de las diferentes fases a lo largo de la matriz, creándose dominios de diferente composición en esta, lo cual repercute negativamente en las propiedades finales. En este trabajo se apuesta por hacer uso de una estrategia coloidal, la cual permite modular fácilmente la distribución de las diferentes fases que confluyen en las suspensiones de cara a lograr un grado de homogeneización elevado en los filamentos y, consecuentemente en las piezas. Además de esto, el procesado coloidal es económicamente poco demandante, rápido y sostenible con el medio ambiente, convirtiéndolo en una metodología clave que poner en valor.

VALORIZACIÓN DEL ALPEORUJO MEDIANTE CARBONIZACIÓN HIDROTÉRMICA

Beatriz Ledesma Cano^a, Isabel Pestana da Paixão Cansado^{b,c}, Silvia Román Suero^a, Paulo A.M. Mourão^c

^aUniversidade de Extremadura, Avda. de Elvas s/n, Badajoz, 06006

^bLAQVREQUIMTE, Instituto de Investigação e Formação Avançada, Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho n.º 59, 7000-671 Évora, Portugal.

^cMED, Instituto de Investigação e Formação Avançada, Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, Rua Romão Ramalho n.º 59, 7000-671 Évora, Portugal.
beatrizlc@unex.es

El alpeorujo, un subproducto generado en grandes cantidades por las almazaras durante el proceso de extracción del aceite de oliva, representa un serio problema medioambiental debido a su elevada humedad, su consistencia pastosa y su carga orgánica.

En el marco de un proyecto de investigación desarrollado en la Universidad de Évora, se exploró la posibilidad de valorizar este residuo mediante la tecnología de carbonización hidrotermal (HTC), una técnica que permite transformar biomasa húmeda en materiales carbonosos útiles sin necesidad de un secado previo. A través de esta metodología, el alpeorujo fue sometido a procesos a 200 y 220 °C durante 2 horas en condiciones controladas, obteniéndose un producto sólido conocido como hidrochar, con un rendimiento del 20% en ambos casos. Los hidrochars obtenidos mostraron un poder calorífico elevado, alcanzando los 25,69 MJ/kg a 200 °C y hasta 27,59 MJ/kg a 220 °C. Este incremento energético resulta especialmente significativo si se compara con los valores del alpeorujo original: en estado húmedo, su poder calorífico inferior (LHV) es de tan solo 3,14 MJ/kg, y el superior (HHV), de 6,93 MJ/kg, debido al altísimo contenido en humedad (72,73 %). Incluso tras el secado, el alpeorujo seco presenta un poder calorífico inferior de 21,53 MJ/kg, y un poder calorífico superior de 23,17 MJ/kg. En contraste, la HTC no solo evita el proceso de secado previo, sino que también incrementa el contenido energético del material tratado, mejorando notablemente su potencial como biocombustible sólido. Este aumento en el poder calorífico se debe a la concentración de carbono y a la eliminación de componentes volátiles e inertes durante el proceso, lo que mejora sustancialmente su eficiencia energética.

Además del análisis energético, se evaluó la posibilidad de activar estos hidrochars para su uso como bioadsorbentes en la limpieza de aguas contaminadas. Para ello, se ensayó una activación física con dióxido de carbono a 800 °C, con el objetivo de desarrollar su porosidad interna. Sin embargo, los resultados obtenidos mostraron que, bajo las condiciones ensayadas, el alpeorujo no desarrolló una estructura porosa significativa, lo que limita, de momento, su capacidad como adsorbente. Estos primeros ensayos apuntan a la necesidad de modificar las condiciones del proceso de activación, explorando otras temperaturas, tiempos de residencia o agentes activantes, para aprovechar el potencial del alpeorujo más allá de su uso energético.

Desde una perspectiva ambiental y económica, el aprovechamiento del alpeorujo mediante HTC presenta importantes ventajas. Al tratarse de un residuo agrícola sin valor comercial, su transformación en un producto útil contribuye a reducir los costes de gestión y a minimizar el impacto ambiental asociado a su acumulación o eliminación. Además, el uso del hidrochar como biocombustible puede sustituir parcialmente a combustibles fósiles, aportando beneficios en términos de reducción de emisiones de CO₂.

En definitiva, este estudio pone de relieve el potencial del alpeorujo como recurso en una economía circular, ofreciendo una vía sostenible para su valorización energética y, con futuras mejoras, también para su aplicación como material funcional en la protección ambiental.

INTENSIFICACIÓN DE LA (FOTO)ACETALIZACIÓN DE GLICEROL CON COMPUESTOS CARBONÍLICOS

Alejandro Ariza-Pérez^a, Juan Martín-Gómez^a, M. Carmen Herrera-Beurnio^a, Francisco J. López-Tenllado^a, Jesús Hidalgo-Carrillo, Alberto Marinas^a, Francisco J. Urbano^a

^a Departamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, E-14071 Córdoba, Spain
b52hebem@uco.es

El solketal es un acetal cíclico ampliamente usado como bioaditivo oxigenado en combustibles, o disolvente a nivel industrial. Estos acetales cíclicos se pueden obtener por acetalización del glicerol con compuestos carbonílicos, siendo la reacción con acetona, que conduce a solketal y DMDO, una reacción bastante estudiada tanto por catálisis ácida como por fotocatalisis¹. Se ha demostrado que el oxígeno presenta un papel fundamental en la fotoacetalización, al observarse una disminución significativa de la conversión de glicerol cuando la reacción se lleva a cabo en atmósfera inerte.

En trabajos previos de nuestro grupo de investigación se observó que en ausencia de oxígeno no se formaron las especies radicalarias necesarias para obtener una conversión notable a solketal. Además, se comprobó que la *p*-benzoquinona (BQ), incluso en condiciones subestequiométricas, promovía la reacción mediante la producción de nuevas especies radicalarias que contribuyen de forma beneficiosa al proceso de fotoacetalización².

Los resultados obtenidos en este trabajo apuntan a una concentración óptima de BQ de 55.5 mM, observándose que la BQ se reduce en un 90% a hidroquinona (H₂Q), molécula que podría presentar un papel relevante como fotoácido en el proceso de acetalización. El mecanismo de reacción apuntaría, por tanto, a la intervención del radical superóxido en el proceso de formación del hemiacetal, y de la H₂Q, actuando como fotoácido, en la posterior formación del acetal cíclico.

Finalmente, el papel de la BQ en la reacción fotocatalítica se ha evaluado en condiciones estáticas (batch, 15 mL, radiación UV) y en un reactor de flujo (2 L, radiación UV), de cara a la intensificación del proceso para un posible escalado a nivel industrial.

Cuando la reacción se ha llevado a cabo en el reactor de flujo continuo, se ha alcanzado una conversión del glicerol superior al 60% en 48 horas, con una selectividad a solketal de en torno al 50%. Además, el uso de una membrana selectiva para eliminar el agua producida durante la reacción permitió aumentar los valores de selectividad a solketal hasta casi un 80% (Figura 1). La reacción se ha estudiado en las mismas condiciones con otros compuestos carbonílicos como cinamaldehído y benzaldehído dando lugar a acetales cíclicos, empleados en la industria como pro-fragancias o pro-fármacos, con resultados muy prometedores desde el punto de vista del escalado industrial.

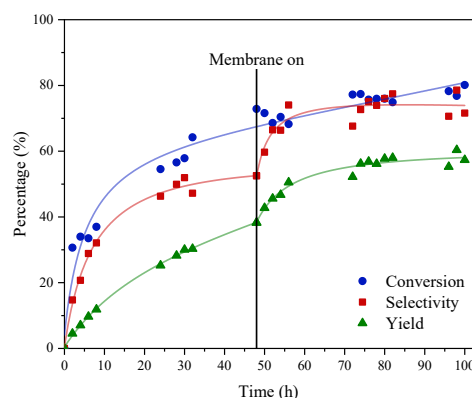


Figura 1. Comportamiento de la fotoacetalización de glicerol con acetona en un reactor de flujo continuo. Efecto del uso de una membrana selectiva para retirar el agua formada como subproducto.

Agradecimientos

Investigaciones financiadas a través de los proyectos TED2021-132224B-I00 (MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y Unión Europea "NextGenerationEU/PRTR") y PID2022-142275OB-I00 (MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y FEDER, UE); JMG agradece a la Consejería de Transformación Económica, Industria, Conocimiento y Universidades de la Junta de Andalucía su beca postdoctoral (convocatoria 2021)

¹ Hidalgo-Carrillo, J., Estevez-Toledano, R.C., Lopez-Tenllado, F.J., Bautista, F.M., Urbano, F.J., Marinas, A. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers* 125 (2021) 297-303.

² Martín-Gómez, J.; Pérez-Losada, M.; López-Tenllado, F.J.; Hidalgo-Carrillo, J.; Herrera-Beurnio, M.C.; Estévez, R.; Marinas, A.; Urbano, F.J. *Catalysis Today*, **2024**, **429**, 11450603.

HIDROGENACIÓN DE FURFURAL A FURFURIL ALCOHOL: ALTA SELECTIVIDAD MEDIANTE CATALIZADORES DE Ru-Co/ASC EN SISTEMAS BATCH Y FLUJO CONTINUO

Jennifer María Navia-Mendoza^a, Alina M. Balu^a, Claudia Espro^b, Joan Manuel Rodríguez-Díaz^c

^aDepartamento de Química Orgánica, Universidad de Córdoba, Edificio Marie Curie (C-3), Campus de Rabanales, Ctra. Nnal. IV-A, Km 396, E14014, Córdoba, España

^bDepartamento of Engineering, University of Messina, Messina, Italy.

^c Departamento de Procesos Químicos, Facultad de Ciencias Matemáticas, Físicas y Químicas, Universidad Técnica de Manabí, Portoviejo, Manabí, Ecuador
z22namej@uco.es

El presente trabajo tiene como objetivo demostrar la eficiencia catalítica de nanopartículas de rutenio (Ru) y Cobalto soportadas sobre Aluminio Silicato (ASC) en la hidrogenación selectiva de furfural hacia furfuryl alcohol. La síntesis del material Ru-Co/ASC se realizó mediante impregnación húmeda, seguida de tratamientos térmicos controlados. La caracterización por análisis termogravimétrico (TGA) evidenció una alta estabilidad térmica del catalizador, mientras que la espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) permitió confirmar la presencia de grupos funcionales en la superficie del soporte, esenciales para la interacción metal-soporte. En condiciones de operación por lote, se alcanzó una conversión superior al 99% y una selectividad del 98% hacia furfuryl alcohol. Además, se implementó un sistema de flujo continuo que permitió evaluar el desempeño del catalizador en condiciones más exigentes, obteniéndose una conversión mayor al 80% y una selectividad del 100%. Estos resultados destacan el potencial del sistema Ru/SC como plataforma catalítica robusta y eficiente para la valorización de compuestos derivados de biomasa bajo condiciones sostenibles y escalables.

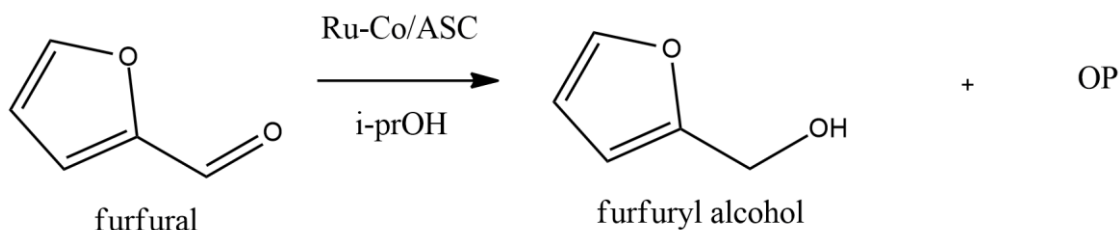


Figura 1. Esquema de obtención furfuryl alcohol a partir de furfural mediante hidrogenación.

Agradecimientos

J.M.N-M gratefully acknowledges funding by the European Union Health and Digital Executive Agency (HADEA), SusPharma project grant agreement No 101057430.

SUSTAINABLE ACETALIZATION OF FURFURAL BY HEAVY ALCOHOLS IN SOLVENT-FREE MEDIUM CATALYZED BY Fe- AND Co-OXALATES

Alexander Pokutsa^a, Alina M. Balu^a, Rafael Luque^{b,c}

^aDepartamento de Química Orgánica, Universidad de Córdoba, Edificio Marie Curie (C-3), Campus de Rabanales, Ctra. Nnal. IV-A, Km 396, E14014, Córdoba, España

^bUniversidad ECOTEC, Km. 13.5 Samborondón, Samborondón, EC092302, Ecuador; orcid.org/0000-0003-4190-1916;

^cDepartment of Bioresources and Polymer Science, Advanced Polymer Materials Group, Faculty of Chemical Engineering and Biotechnologies National University of Science and Technology Polytechnica Bucharest 1-7 Gheorghe Polizu str., Bucharest, Romania
qo2pokpo@uco.es

Fe-, Co-, and FeCo-oxalates supported on commercial silica gel (5% metal load) were synthesized and tested for solvent-free furfural (FF) acetalization with C1-C8 alcohols at 70-170 °C. As revealed, the interaction between FF and linear C1-C4 alcohols produced pincer-shaped furfuryl diacetals. Whereas in case of linear C5-C8 ones only hemiacetals were detected. The last observation was attributed to the steric hindrances caused by the longer carbon chains of the C5-C8 alcohols. The process performance was slightly dependent on the number of C-atoms in the alcohols and steadily decreased as this value increased. Nevertheless, the FF conversion (65-75%) and selectivity (80-85%) maintained for all alcohols. In the medium of sterically hindered 2-propanol, cyclohexanol, and *i*-butanol the conversion of FF dramatically decreased highlighting the strong impact of stereochemistry on process performance. All catalysts were found to possess both Brønsted and Lewis acidic sites with relatively equal proportion. The activity of tested materials remained comparable indicating a significant influence of metal cations on process performance. Calcination of supported metal oxalates upon the oxygen-contained atmosphere at temperatures ≥ 150 °C for 5 hours led to materials with no catalytic activity. The phenomenon was attributed to the decomposition the oxalate counterpart of catalysts.

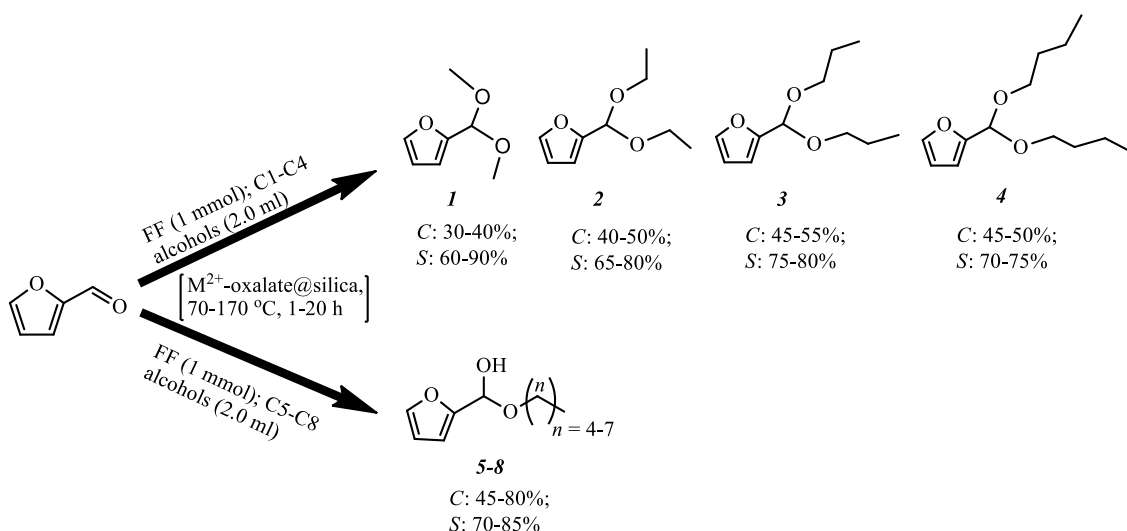


Figure 1. Impact the number of alcohols carbon atoms on the products distribution.

Agradecimientos

This work was supported by the project HE-RIA-2021-HTLH-101057430 "SusPharma-Marging sustainable and digital chemical technologies for the development of greener-by-design pharmaceuticals".

CONTINUOUS FLOW SYNTHESIS OF FURFURAL FROM BIOMASS-DERIVED WASTE USING A $\text{ZnCl}_2/\text{NaCl}$ CATALYTIC SYSTEM

Harry K. Megbenu^a, Kyran Kassym^b, Minavar Shaimardan^b, Alina M. Balu^c, Rafael Luque^d, Nurxat Nuraje^{a,b}

^aDepartment of Chemical and Material Engineering, School of Engineering and Digital Sciences, Nazarbayev University, Astana, 010000, Kazakhstan

^bRenewable Energy Laboratory, National Laboratory Astana, Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan

^cDepartamento de Química Orgánica, Universidad de Córdoba, Edificio Marie Curie (C-3), Campus de Rabanales, Ctra. Nnal. IV-A, Km 396, E14014, Córdoba, España

^dUniversidad ECOTEC, Km. 13.5 Samborondón, Samborondón, EC092302, Ecuador; orcid.org/0000-0003-4190-1916; rluque@ecotec.edu.ec

Lignocellulosic biomass valorization into platform chemicals presents sustainable pathway for the production of value-added chemicals and commodity products. Our study employs a continuous flow chemistry approach to synthesize furfural from pretreated corncob and rice husk biomass derived-waste materials via formic acid assisted hemicellulose extraction where commercial xylose was used as the benchmark. The extracted hemicellulose syrups, containing 24.12% and 10.22% respectively from waste corncob and rice husk were subjected to the continuous flow reaction system using NaCl as promoter, ZnCl_2 as the catalyst, and isopropyl alcohol/water mixture as the solvent system. Systematic optimization of key reaction parameters such as temperature, flow rate, solvent ratio and catalyst concentration resulted in a maximum furfural yield of 74.58% at 170 °C in 10 minutes residence time. This application of continuous flow methodology offers superior control over reaction conditions and are confirmed by SEM, UHPLC, TLC, and NMR analysis while significantly enhancing heat and mass transfer compared to traditional batch reaction processes.

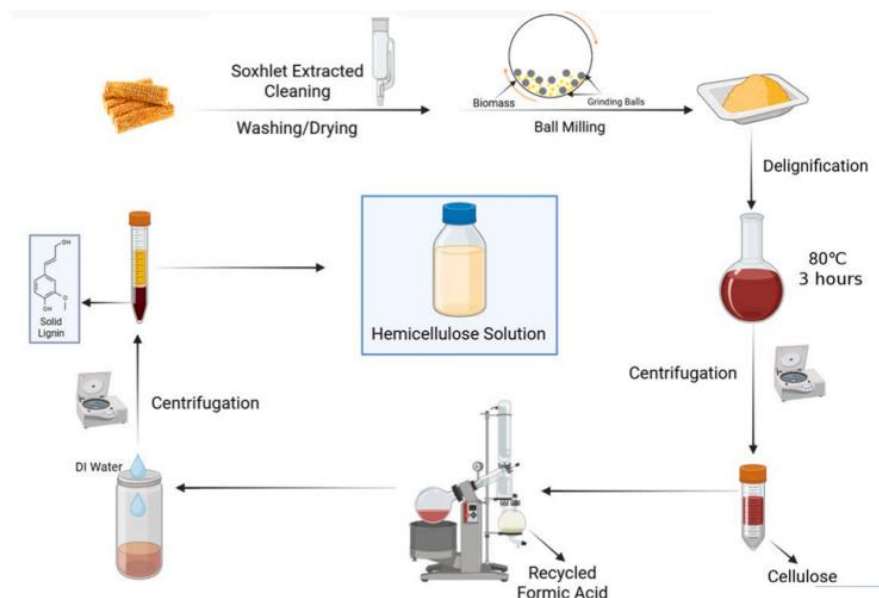


Figura 1. Pretreatment process for hemicellulose syrup extraction from corncob and rice husk biomass.

Agradecimientos

Harry Kwaku Megbenu acknowledges funding from the Collaborative Research Program of Nazarbayev University (Project ref. no. 20122022CRP1609), "Waste-to-Pharma: From Lignocellulosic Residues to Active Pharmaceutical Ingredients Using Benignby-Design Methodologies".

COMPREHENSIVE PROCESSING OF RICE HUSK

Alina M Balu^a, Olena Korchuganova^a

^a *Departamento de Química Orgánica, Universidad de Córdoba, Edificio Marie Curie (C-3), Campus de Rabanales, Ctra. Nnal. IV-A, Km 396, E14014, Córdoba, España.*
qo2kokoo@uco.es

The term "lignocellulosic biomass" refers to plant residues generated in agriculture, food, and forest processing industries. The biomass is divided into the following types: forest residues (hardwood and softwood), agricultural residues (food and non-food crops), herbaceous plants (grasses and weeds), and waste (industrial/municipal or food).

One of the largest non-food agricultural residue is rice husk, 150-160 million tons of it are generated annually. Rice husk, which covers of seed, is separated from the grains during the milling process. Rice husk contains hemicellulose and silica, which are around 20% (wt.%), depending on the climate and the growth location of rice. The high content of the mineral component is a distinctive feature of this type of lignocellulosic biomass.

There are the following main methods of processing rice husks:

- activate carbon and silica production;
- animal feed (limited);
- soils amendment;
- compost enhancement.

As is often the case with waste, the supply of recycled products exceeds demand. Consequently, no single recycling method can fully solve the environmental problems associated with the generation of such a large amount of waste. In our work, an attempt was made to make the processing more comprehensive and to determine how the hemicellulose component of rice husks can be more fully utilized.

A standard method was used to dissolve lignocellulosic biomass. This procedure is used to determine the amount of structural carbohydrates and lignin in a solid biomass sample. The sugar content was determined using the HPLC equipped with a Concise Coregel 87H3 column.

Table 1. The content of structural carbohydrates and lignin in the rice husk (%)

Glucose	Xylose	Acid soluble lignin	Acid soluble lignin	Ash
5,78	7,93	2,27	13,23	15,87

For processing, three methods were used to extract hemicellulose from biomass.

1. The alkaline leaching, which involves the separation of hemicellulose using a potassium hydroxide solution. The process was carried out at a temperature of 95°C for 2 hours with intensive stirring.
2. The delignification with peroxycitric acids. The temperature was 70-80 °C for 3 hours with constant stirring.
3. The delignification with ethyl alcohol (50%) with the addition of sulfuric acid (1%). The process was carried out at a temperature of 180 °C for 1 hour.

After delignification with peroxycitric acid and an organic solvent, an attempt was made to dissolve it with an alkaline solution.

The glucose contained in these residues is quite easily leached with alkali, forming a solution with a concentration of 10 g/l. Glucose is slightly worse extracted after organosolvent delignification. The solutions can be used to obtain high-value-added products such as HMF or bioethanol. Pre-extraction of sugars will not only generate additional profits but also reduce the amount of material for further processing into biochar or silica.

Agradecimientos

This work has been funded by the European Union – Health and Digital Executive Agency (HADEA), project SusPharma grant agreement No 101057430. Views and opinions expressed are however those of the authors only and do not necessarily reflect those of the European Union or the Health and Digital Executive Agency. Neither the European Union nor the granting authority can be held responsible for them.

UTILIZACIÓN DE HIDROGELES A BASE DE NANOFIBRAS DE CELULOSA, OBTENIDAS MEDIANTE BIORREFINERÍA DE RESIDUOS AGRÍCOLAS, PARA APLICACIONES EN BIOMEDICINA REGENERATIVA

Guadalupe Estrella-Guisado^{a,b}, Victoria Pulido^b, Antonio Casado^b, Gema García^b, Begoña Ferrari^c, Zoilo González^a

^a BioPren (RNM940), Dpto. de Química Inorgánica e Ingeniería Química, Instituto Químico Para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Facultad de Ciencias, Universidad de Córdoba (UCO), Córdoba.

^b Instituto Maimónides de Investigación Biomédica (IMIBIC), Hospital Reina Sofía, Córdoba

^c Instituto de Cerámica y Vidrio (ICV-CSIC), Madrid.

z42esgug@uco.es

La necesidad de empleo de estrategias cada vez más sostenibles ha impulsado el desarrollo de materiales avanzados a partir de residuos agrícolas, en línea con los principios de la economía circular. En este trabajo se propone el uso de nanofibras de celulosa (CNF), obtenidas mediante procesos de biorrefinería, y su posterior utilización en la formulación de hidrogeles funcionales, para aplicaciones en biomedicina regenerativa.

El empleo de CNF derivada de biomasa vegetal residual no solo permite su valorización, sino que también confiere a los hidrogeles propiedades biomédicas superiores a las de muchos hidrogeles sintéticos. Destacan su biocompatibilidad, biodegradabilidad y propiedades mecánicas ajustables. La incorporación de alginato a la formulación, mejora su capacidad de gelificación y estabilidad estructural. Esta composición híbrida ha demostrado simular eficazmente el entorno de la matriz extracelular nativa, lo que permite obtener resultados más realistas al simular las condiciones *in vivo*.

Para evaluar la distribución y viabilidad de células madre mesenquimales procentes de cordón umbilical se realizaron cultivos celulares en el seno del hidrogel CNF-alginato, mediante tinciones con calceína y ensayos de resazurina, respectivamente. Los resultados confirmaron una distribución homogénea de las células a lo largo de toda la matriz, así como una alta viabilidad mantenida durante varios días de cultivo; confirmando la idoneidad del hidrogel como soporte 3D biomimético.

Finalmente se evaluó la capacidad de este hidrogel para la producción de exosomas, con el objetivo de que estos presenten mejores propiedades que los obtenidos mediante otras técnicas y así potenciar su funcionalidad en terapias regenerativas avanzadas. Su versatilidad permite adaptarlo a otras aplicaciones terapéuticas, como la liberación de fármacos, consolidándolo como una plataforma polivalente y respetuosa con el medio ambiente.

Agradecimientos:

Proyecto CPP2023-010820 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y FEDER/UE.

EXTRACCIÓN CON SUPRAS DE COMPUESTOS BIOACTIVOS DE RESIDUOS DE ARÁNDANOS PARA SU APLICACIÓN EN LA INDUSTRIA

A. Aparicio Ibáñez^a, A. Ballester-Gómez^a, S. Rubio^a

^a *Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente, Universidad de Córdoba, 14014 Córdoba, España*
t92apiba@uco.es

La gestión de residuos agroalimentarios es una prioridad por su alto volumen e impacto ambiental y económico. Para afrontarlo, se impulsan políticas de valorización, reciclaje y reutilización, promoviendo una economía circular. En este marco, las industrias adoptan enfoques sostenibles como la química verde, que busca diseñar procesos y productos menos contaminantes y más eficientes en el uso de recursos naturales.

Una línea de innovación prometedora dentro de este marco es el uso de disolventes supramoleculares (SUPRAS) como alternativa a los disolventes orgánicos convencionales en procesos de extracción. Los SUPRAS son sistemas líquidos complejos formados mediante autoensamblaje espontáneo de moléculas anfífilas en disolución, dando lugar a estructuras supramoleculares que poseen una elevada capacidad extractante. Esta capacidad se debe a la diversidad de interacciones que pueden establecerse entre sus agregados y los compuestos de interés, así como a la presencia de múltiples sitios de unión y una elevada área superficial, lo que les confiere una gran eficacia.

Este estudio evaluó y comparó distintos tipos de SUPRAS, formulados con compuestos no tóxicos y aptos para aplicaciones cosméticas, con el fin de identificar los más eficaces en la recuperación de compuestos bioactivos con actividad antioxidante a partir de residuos del procesado de arándanos para zumo. Los extractos fueron analizados mediante técnicas fotométricas y cromatográficas (HPLC-MS/MS) para determinar los índices totales y perfiles de compuestos fenólicos, flavonoides, proantocianidinas y antocianinas. Los SUPRAS basados en cubosomas de 1,2-hexanodiol mostraron los mayores rendimientos, superando incluso a las mezclas hidroalcohólicas tradicionales en la extracción de polifenoles totales. Las condiciones óptimas de extracción se determinaron como una relación muestra:SUPRAS de 1:20 (g:mL), durante 30 minutos a 80 °C.

Los resultados obtenidos permiten avanzar en el desarrollo de estrategias sostenibles para la valorización de residuos agroindustriales, mostrando el potencial de los SUPRAS como herramienta verde y eficaz para la recuperación de compuestos bioactivos con aplicaciones en la industria alimentaria, cosmética y farmacéutica.

AGRADECIMIENTOS:

Los autores agradecen el apoyo financiero del MCIU/AEI/10.13039/501100011033/ FEDER,UE (número de proyecto PRE2023/PID2023-149488OB-I00).

VALORIZACIÓN DE RESIDUOS ALIMENTARIOS EN LA BIOPROTECCIÓN SOSTENIBLE DE CULTIVOS AGRÍCOLAS

Antonio Javier Caro-Reina^a, María Carmen Saigner^b, Carlos Agustí-Brisach^b, Araceli García^{a,c}

^aGrupo FQM-383, Departamento de Química Orgánica, Universidad de Córdoba, España

^bGrupo AGR-216, Departamento de Agronomía, ETSIAM, Universidad de Córdoba, España

^cInstituto Químico Para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, España
qo2ganua@uco.es

La quitina es el segundo biopolímero natural más abundante después de la celulosa, presentando unidades de N-acetil-glucosamina unidas por enlaces $\beta(1-4)$. Se puede obtener a partir de desechos de crustáceos, insectos, etc. mediante un proceso que involucra varios pasos como la desproteinización, desmineralización y decoloración ¹. La quitina, y su derivado desacetilado, el quitosano, muestran propiedades interesantes que incluyen biodegradabilidad, biocompatibilidad que permite su aplicación en aplicaciones biomédicas, cosméticas, o de alimentación, entre otras. En la búsqueda de alternativas sostenibles y respetuosas con el medio ambiente, biomoléculas como quitosano resultan muy prometedoras en el área de la agronomía, donde se pretende lograr la bioprotección de cultivos frente a patógenos, algo que en la actualidad sólo se remedia con el uso de productos en base a cobre o a aluminio ², altamente contaminantes y potencialmente agresivos con los frutos.

Por lo tanto, el presente estudio tuvo como objetivo la evaluación de quitinas extraídas de distintos crustáceos e insectos, su transformación por métodos químicos en quitosano y su posterior evaluación como potencial agente fungicida frente a hongos fitopatógenos comunes en diversidad de cultivos leñosos y herbáceos del área mediterránea, como *Verticillium dahliae* y *Botrytis cinerea*.

Las muestras de quitina y quitosano de distintas fuentes, incluyendo muestras comerciales, fueron analizadas para establecer diferencias en su estructura química (FTIR, Análisis Elemental, conductometría, Rayos X). Los resultados obtenidos demostraron no sólo una clara diferencia en las propiedades de la quitina obtenida de distintas fuentes (cáscaras de crustáceos e insectos) si no también cómo la diferente composición de las cáscaras de crustáceos e insectos impacta en el rendimiento de extracción de la quitina. Posteriormente se puso a punto un método de evaluación in vitro con el fin de disolver las fuentes de quitosano en medios de cultivo genéricos (p.ej. patata dextrosa agar, PDA) o en agua desionizada estéril y evaluar su efecto frente al crecimiento micelial y la germinación de conidios de los fitopatógenos mencionados, respectivamente. Estos ensayos preliminares mostraron algunas limitaciones de las fuentes de quitosano para ser diluidas en PDA debido a la baja solubilidad que presenta este compuesto en agua. Por tanto, fue necesario realizar varios ajustes del método para su futura aplicación. Los resultados obtenidos suponen un primer paso para el desarrollo de nuevas investigaciones en el uso de residuos de la industria alimentaria para aplicaciones en agricultura, dentro de un escenario de economía circular y sostenible dentro del área Mediterránea.

Agradecimientos

Este trabajo se ha desarrollado en el marco del proyecto DurlnnPack (PCI2024-153418) financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y cofinanciado por la Unión Europea en la convocatoria PRIMA 2023 y en el que participan los Dptos. de Química Orgánica y de Agronomía de la Universidad de Córdoba.

¹ Larbi, F.; García, A.; del Valle, L.J.; Hamou, A.; Puiggalí, J.; Belgacem, N.; Bras, J. *Carbohydrate Polymers*, **2018**, 196, 385-397.

² Antón-Domínguez, B.I.; Díaz-Díaz, M.; Acedo-Antequera, F.A.; Trapero, C.; Agustí-Brisach, C. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, **2024**, 104, 6311-6321.

AISLAMIENTO Y CARACTERIZACIÓN DE NANOCRISTALES DE CELULOSA DERIVADOS DE NANOCELULOSA BACTERIANA SINTETIZADA POR *ANCYLOBACTER* SP. STN1A A PARTIR DE GLICEROL CRUDO RESIDUAL

Manuel Peña-Ortiz^{a,b,c}, Araceli García^{a,c}, Sophie Marie Martirani-Von Abercron^d, Patricia Marín^d, Silvia Marqués^d, Ramzi Khiari^{e,f}, Alain Dufresne^f, Luis Serrano^{b,c}

^aDepartamento de Química Orgánica, G.I. Nanoval FQM-383, Universidad de Córdoba, España.

^bDepartamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, G.I. BioPrEn RNM 940, Universidad de Córdoba, España.

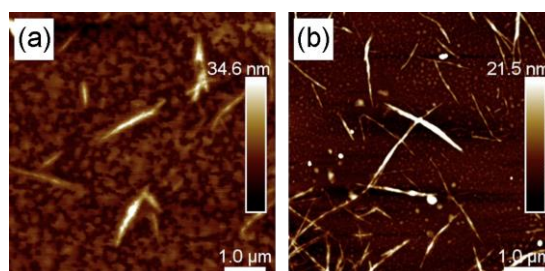
^cFacultad de Ciencias, Instituto Químico Para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, España.

^dEstación Experimental del Zaidín, Departamento de Biotecnología y Protección Ambiental, CSIC, Granada, España.

^eDepartamento de Textil, Instituto Superior de Estudios Tecnológicos de Ksar Hellal, Túnez.

^fUniversité Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, LGP2, Grenoble, Francia.
b52penom@uco.es

Dado el creciente interés en las propiedades funcionales de los derivados nanocelulósicos, los nanocristales de celulosa bacteriana (BCNCs) han despertado gran atención como materiales sostenibles y versátiles para múltiples aplicaciones. Si bien investigaciones recientes han explorado el uso de residuos agroindustriales para la producción de BCNCs, se ha prestado poca atención al glicerol crudo residual, un subproducto común de la industria del biodiésel. Por ello, este trabajo propuso caracterizar en profundidad BCNCs producidos mediante hidrólisis ácida a partir de celulosa bacteriana (BNC) obtenida mediante el metabolismo de glicerol crudo residual por la novedosa cepa bacteriana *Ancylobacter* sp. STN1A. Así, se evaluó la influencia del tiempo de hidrólisis ácida sobre la morfología y propiedades fisicoquímicas de los BCNCs resultantes. Se encontró que condiciones de hidrólisis ácida severas generaron nanocristales notablemente cortos y estrechos ($0,91 \mu\text{m} \times 40 \text{ nm}$; $L/D = 22,8$), con mayor cristalinidad (63%) que la BNC de partida (53%), alta estabilidad coloidal ($-40,17 \pm 0,68 \text{ mV}$), aunque con una ligera disminución en su estabilidad térmica. Por su parte, en condiciones más suaves, los BCNCs resultaron más largos ($1,13 \mu\text{m} \times 42 \text{ nm}$; $L/D = 26,9$) y con un potencial zeta elevado ($-44,13 \pm 0,73 \text{ mV}$), conservando las propiedades cristalinas y térmicas de la BNC inicial. Estos resultados demuestran la posibilidad de ajustar las propiedades de los BCNCs a través de condiciones de hidrólisis ácida controlada. Igualmente, este trabajo respalda la viabilidad de producir formas nanocelulósicas versátiles a partir de un subproducto residual poco explorado en este contexto, promoviendo un enfoque de producción eficiente y sostenible.



Agradecimientos:

Este trabajo fue financiado por la Universidad de Córdoba ("Contrato PIF Plan Propio de Investigación 2021" y "Plan Propio de Investigación Enrique Aguilar Benítez de Lugo 2023, UCOLIDERA, Proyecto AgroCell"); por la Unión Europea y el MICIU (Proyectos "PLEC2021-008210" y "PID2020-113144RB-I00"); por LabEx Tec 21 ("ANR-11-LABX-0030"; y por PolyNat Carnot Institut ("ANR-11-CARN-030-01").

FORMULACIONES SOSTENIBLES Y EFICACES DE GELES HIDROALCOHÓLICOS CON NANOFIBRAS DE CELULOSA BACTERIANA

Manuel Peña-Ortiz^{a,b,c}, Luis Serrano^{b,c}, Raquel Muñoz-Castells^d, Araceli García^{a,c}

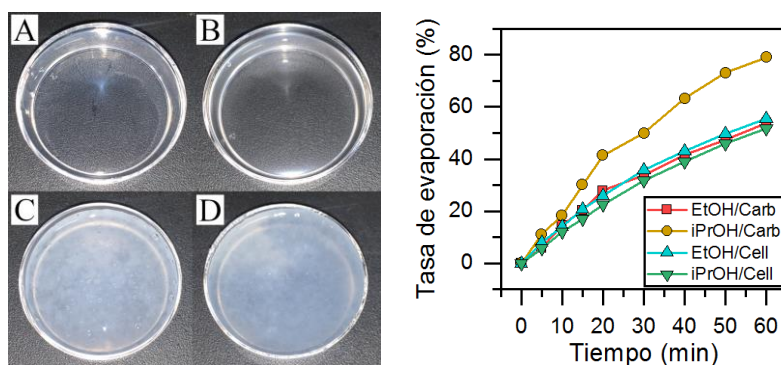
^aDepartamento de Química Orgánica, G.I. Nanoval FQM-383, Universidad de Córdoba, España.

^bDepartamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, G.I. BioPrEn RNM 940, Universidad de Córdoba, España.

^cFacultad de Ciencias, Instituto Químico Para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, España.

^dDepartamento de Química Agrícola, Edafología y Microbiología, G.I. Vitenol AGR 146, Universidad de Córdoba, España.
b52penom@uco.es

El uso generalizado de geles hidroalcohólicos formulados con carbómeros tras la pandemia de COVID-19 ha generado preocupación por su ecotoxicidad. En este trabajo se evaluaron, por primera vez, nanofibras de celulosa bacteriana (BCNs) como alternativa a los carbómeros en formulaciones desinfectantes de manos elaboradas con base de etanol e isopropanol. Así, se analizaron las propiedades sensoriales, reológicas, físicas y antimicrobianas de formulaciones hidroalcohólicas conteniendo carbómeros (comerciales) y BCNs, respectivamente. La microscopía electrónica de barrido (SEM) evidenció la morfología notablemente alargada y estrecha de las nanofibras utilizadas, con longitudes micrométricas y diámetros en torno a los 46 nm. Las formulaciones con BCNs presentaron viscosidades intermedias (≈ 75 cP) respecto a las formuladas con carbómero-etanol (487 ± 4 cP) y carbómero-isopropanol (29 ± 0 cP), lo que afectó directamente a su extensibilidad. Así, las formulaciones menos viscosas (es decir, carbómero-isopropanol) mostraron una mayor extensibilidad ($S \approx 3,0$) frente al resto ($S \approx 2,3$). La nanocelulosa bacteriana también influyó en la tasa de evaporación, impartiendo valores similares a las formulaciones de carbómero-etanol ($\approx 54\%$ tras 60 min). Las pruebas *in vitro* confirmaron la actividad antimicrobiana de todas las formulaciones preparadas frente a *Escherichia coli*, *Staphylococcus aureus* y *Candida albicans*. Las formulaciones con BCNs presentaron una menor concentración mínima fungicida (MFC) frente a *C. albicans*. Por su parte, las formulaciones con BCNs mostraron mejor actividad frente a la microbiota basal de las manos ($97,40 \pm 0,91\%$) que las que contenían carbómero ($96,95 \pm 1,30\%$). En resumen, los resultados obtenidos en este trabajo indican que la nanocelulosa bacteriana podría sustituir a los carbómeros en las formulaciones hidroalcohólicas desinfectantes de manos, manteniendo o incluso mejorando su eficacia antimicrobiana y reduciendo considerablemente su impacto ambiental.



Agradecimientos:

Este trabajo fue financiado por la Universidad de Córdoba ("Contrato PIF Plan Propio de Investigación 2021" y "Plan Propio de Investigación Enrique Aguilar Benítez de Lugo 2023 UCOLIDERA, Proyecto AgroCell"), y por la U.E. y el MICIU ("Proyecto PLEC2021-008210"). Los autores agradecen la colaboración de los participantes en los ensayos *in vivo*.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF GLASS-DOPED POLYANILINE HYBRID COMPOSITE FOR SUPERIOR REMOVAL OF ORANGE G DYE FROM AQUEOUS MEDIA: INVESTIGATION OF ADSORPTION BEHAVIOUR AND REGENERATION

Rida EL BARDAI^a, Salvador Pérez Huertas^c, Abdelghani Hsini^b, Karim tanji^a, Abdelillah Shaim^a

^aLaboratory of Advanced Materials and Process Engineering (LAMPE), Faculty of Science, Ibn Tofail University, BP 133, Kenitra 14000, Morocco.

^bNational Higher School of Chemistry (NHSC), University Ibn Tofail, BP. 133-14000, Kenitra, Morocco

^cDepartment of Organic Chemistry, Faculty of Sciences, University of Cordoba, Rabanales Campus, Marie Curie Building (C-3), Ctra Nnal IV-A, Km 396, E14014 Cordoba, Spain
rida.elbardai@uit.ac.ma

A composite material, polyaniline@GPVT (PANI@GPVT), was successfully produced through a straightforward in situ chemical polymerization method. A range of analytical methods, comprising scanning electron microscopy (SEM), Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR), Brunauer-Emmett-Teller (BET), X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), X-ray energy dispersive spectroscopy (EDS), Raman spectra and Thermal Gravimetric Analysis (TGA), were employed to characterize the synthesized adsorbent. A batch adsorption system was utilized to assess the adsorbent's capability in removing Orange G (OG) dye from water-based solutions. The performance of OG dye adsorption was examined under diverse operating conditions, revealing the influence of various physicochemical parameters on the adsorption process. Kinetic studies demonstrated that the adsorption adhered to the pseudo-second order and Freundlich models, with a maximum observed adsorption capacity of 393.93 mg.g⁻¹. Thermodynamic analysis indicated that the adsorption of OG dye was spontaneous and endothermic. These findings underscore the potential of the synthesized material for wastewater treatment containing OG dye. The PANI@GPVT composite exhibited excellent reusability, demonstrating effectiveness for up to four regeneration cycles. These results affirm that the developed PANI@GPVT material holds promise as an adsorbent for the removal of Orange G from aqueous media.

NUEVAS RUTAS SOSTENIBLES EN LA OBTENCIÓN DE MOLÉCULAS BASADAS EN QUITOSANO PARA APLICACIONES INNOVADORAS

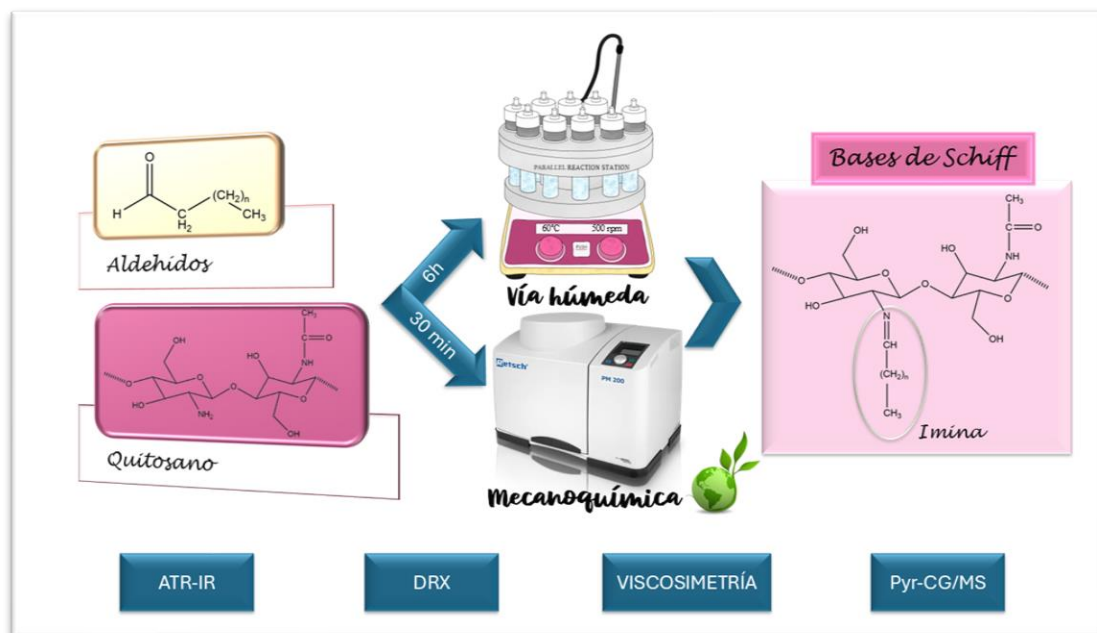
Lidia López-Gómez, Antonio Pineda, Araceli García

Grupo FQM-383, Departamento de Química Orgánica, Universidad de Córdoba, España
Instituto Químico Para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, España
qo2ganua@uco.es

El quitosano es un biopolímero obtenido de la desacetilación parcial de la quitina, el segundo polisacárido más abundante del planeta. Su estructura le confiere propiedades únicas que lo han posicionado como un material prometedor para el desarrollo de aplicaciones en diversos sectores como la industria alimentaria, biomedicina, y cosmética. Sin embargo, para ampliar su funcionalidad y adaptarlo a requerimientos específicos, se estudian distintas estrategias de modificación química.

En este trabajo se evaluaron nuevas rutas de funcionalización del quitosano y su monómero, la glucosamina, mediante la formación de bases de Schiff con distintos aldehídos. Se usaron tanto métodos convencionales de síntesis por vía húmeda, como opciones más sostenibles como la mecanoquímica, minimizando el uso de solventes y el impacto medioambiental asociado al proceso.

Las muestras obtenidas se caracterizaron mediante distintas técnicas analíticas para la identificación de grupos funcionales y la confirmación de la creación de las bases de Schiff (ATR-IR y Pyr-CG/MS), para el análisis de su estructura y cualquier cambio provocado por la funcionalización (Rayos X) y para el seguimiento de las nuevas propiedades adquiridas (viscosimetría, ángulo de contacto) a fin de establecer su aplicación. Por último, el trabajo se complementó con una evaluación tecno-económica para comparar la rentabilidad y sostenibilidad de los métodos desarrollados, permitiendo una visión general de la viabilidad de los métodos propuestos.



Agradecimientos

Este trabajo se ha realizado en el contexto del proyecto DurlnnPack (PCI2024-153418) financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y cofinanciado por la Unión Europea en la convocatoria PRIMA 2023.

PELÍCULAS ANTIBACTERIANAS SOSTENIBLES BASADAS EN PLGA: DESARROLLO, CARACTERIZACIÓN Y APLICACIÓN EN INGENIERÍA BIOMÉDICA

María del Pilar Maldonado Illescas^{a, b}, María Fernández Grajera^c, Verónica Luque Agudo^d, Amparo María Gallardo Moreno^{a, b, c} y María Luisa González Martín^{a, b, c}

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

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

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

^d Departamento de Sistemas y Recursos Naturales, Escuela Técnica de Ingeniería de Montes, Forestal y del Medio Natural, Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España.
pilmalill@unex.es

El diseño de películas poliméricas con propiedades mejoradas representa una estrategia clave en el ámbito biomédico, especialmente para prevenir infecciones asociadas al uso de dispositivos médicos. En este contexto, la búsqueda de materiales que combinen actividad antibacteriana y biocompatibilidad continúa siendo una línea de investigación prioritaria¹. Los compuestos con matrices poliméricas han mostrado un gran potencial gracias a su versatilidad, y los copolímeros, en particular, destacan por su capacidad para ajustar propiedades mecánicas, térmicas y de degradación². Entre los más prometedores, el copolímero de ácidos poliláctico y poliglicólico (PLGA) destaca por su biodegradabilidad, biocompatibilidad y posibilidad de ser modificado estructuralmente mediante dopantes o a través del control de las condiciones de procesamiento. La fabricación de películas de este copolímero suele implicar el uso de disolventes orgánicos y, muchos de los disolventes empleados tradicionalmente, como el cloroformo, pertenecen a la familia de los halogenados y presentan una elevada toxicidad, lo que plantea serios riesgos tanto para los operadores como para el medio ambiente³. En respuesta a estas limitaciones, el desarrollo de estrategias más sostenibles ha promovido el uso de disolventes verdes, siendo el carbonato de dimetilo (DMC) uno de los candidatos más prometedores por su menor impacto ecológico, baja toxicidad y buena capacidad disolvente para este tipo de polímeros⁴. En el presente estudio se ha llevado a cabo la síntesis de películas de PLGA en distintas proporciones, utilizando DMC como disolvente. Partiendo de trabajos previos⁵, en los que se evidenció la eficacia antibacteriana de la incorporación de magnesio (Mg) y bromuro de hexadeciltrimetilamonio (CTAB) en películas de PLA, se ha evaluado su efecto en matrices de PLGA. Se ha prestado especial atención a cómo las condiciones de procesamiento influyen en la configuración molecular del copolímero y, en consecuencia, en sus propiedades funcionales. Las películas obtenidas se han caracterizado a nivel superficial y estructural. Además, se ha analizado su actividad antibacteriana frente a *Staphylococcus epidermidis*, una cepa frecuentemente implicada en infecciones de origen nosocomial asociadas a dispositivos médicos, mediante ensayos de adhesión bacteriana inicial y de formación de biopelículas.

Referencias

¹ Kalirajan, C.; Dukle, A.; Nathanael, A. J.; Oh, T. H.; Manivasagam, G. *Polymers (Basel)*, **2021**, 6;13(17):3015.

² Yoon, S. K.; Chung, D. J. *Polymers (Basel)*, **2022**, 16;14(16):3322.

³ Clarke, C. J.; Tu, W. C.; Levers, O.; Bröhl, A.; Hallett, J. P. *Chem Rev*, **2018**, 118, 747–800.

⁴ Gironi, F.; and Piemonte, V. *Energ Source, Part A*, **2011**, 33, 1949–1959.

⁵ Fernández-Grajera, M.; Gallardo-Moreno, A. M.; Luque-Agudo, V.; González-Martín, M. L.; Hierro-Oliva, M. *Polymers (Basel)*, **2022**, 14, 4976.

Agradecimientos

Este trabajo es parte del proyecto PID-2022-14022OB-100 financiado por MICIU/AEI /10.13039/501100011033 y por FEDER, UE. Las mediciones de goniometría se realizaron en la ICTS NANBIOSIS, U16 (CIBER-BBN).

ESTUDIO DE PINTURA ESCULTÓRICA ROMANA EN CORDUBA MEDIANTE ESPECTROCOPIA RAMAN

D. Cosano Hidalgo¹, C. Marquez Moreno², J. R. Ruiz Arrebola¹

¹*Departamento de Química Orgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Unidad de investigación, innovación y competitividad para el medio patrimonial (PATRICIA) Universidad de Córdoba, España*

²*Departamento de Historia del Arte, Arqueología y Música. Facultad de Filosofía y Letras. Univ. de Córdoba. España
q92cohid@uco.es*

En la antigua Roma, las esculturas eran omnipresentes, reflejando la diversidad y el esplendor de su arte. Sin embargo, su estudio ha presentado desafíos debido a la complejidad de su evolución. Recientes investigaciones químico-arqueológicas han ofrecido nuevas perspectivas para analizar el desarrollo histórico de estas esculturas, enfocándose no solo en los materiales, sino también en las coloraciones y revestimientos cromáticos aplicados para corregir imperfecciones en la superficie de las obras. En la península ibérica, tales prácticas ya se observaban en el arte de los escultores ibéricos y romanos. Este trabajo se centra en el análisis por espectroscopia Raman de pigmentos en esculturas romanas del Museo Arqueológico de Córdoba, con el objetivo de caracterizar los materiales usados, brindar datos valiosos para su conservación y resaltar su importancia dentro del patrimonio cultural.

El análisis de la pintura se realizó mediante espectroscopia Raman, una técnica que presenta numerosas ventajas para el estudio de la pintura romana. Los resultados del análisis de las pinturas procedentes de las esculturas revelaron la presencia de calcita, hematita y goetita, correspondientes a los colores blanco, rojo y amarillo respectivamente. Además, se detectó cinabrio en ciertas esculturas, lo que destaca la importancia de estas piezas (Figura 1). El cinabrio es un pigmento asociado con un alto costo, lo que sugiere una significativa capacidad económica en la zona.

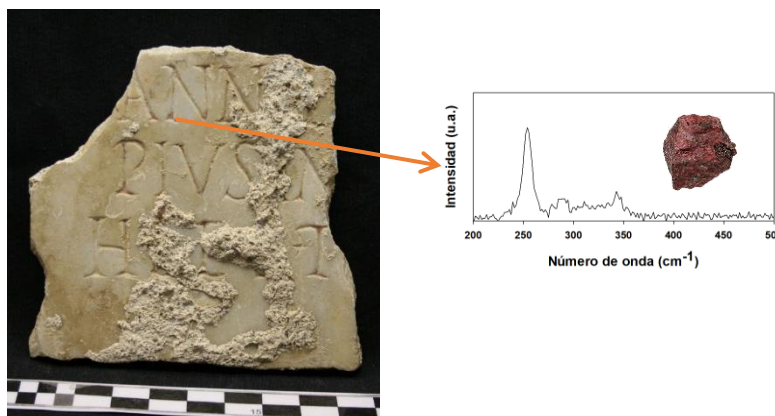


Figura 1. Estudio de Raman del pigmento rojo

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al Museo Arqueológico de Córdoba y al Grupo de Investigación PAIDI FQM-346 por su ayuda en la parte experimental. D.C. agradece los fondos FEDER para el Programa Operativo Fondo Social Europeo (FSE) de Andalucía (PP2F_L1_07).

ESTUDIO MULTI-ANALÍTICO DE PINTURAS MURALES ROMANAS DE ÉCIJA

Miriam López Fernández^a, Daniel Cosano^a, Irene Loschi^b, José Rafael Ruiz Arrebola^a.

^aDepartamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Córdoba.

^bDepartamento de Prehistoria y Arqueología, Facultad de Geografía e Historia, Universidad de Sevilla.
miriam.lopez@uco.es

Desde la Antigüedad, el ser humano ha dejado una huella indeleble en su entorno a través de imágenes plasmadas mediante pinturas. En este sentido, los vestigios arqueológicos de la antigua Roma se presentan en abundancia a lo largo de todo el territorio que estuvo bajo su dominio, muchos de ellos decorados con pigmentos de diversos colores. Durante este periodo, el uso del color revestía una gran importancia por múltiples motivos, entre los que destacan la carga simbólica que representaban, la diferenciación del rango social, y el papel fundamental que la pintura y la escultura desempeñaban en la ornamentación y su expresión artística¹.

En el presente trabajo se realiza un estudio de caracterización de morteros y pigmentos con diferentes técnicas instrumentales de pinturas murales, procedentes de una *domus* romana hallada en la Plaza de Armas de Écija (Sevilla). Las técnicas empleadas han sido la difracción de rayos X (DRX) y la microespectroscopía Raman (μ -Raman), que permiten identificar la composición mineralógica del mortero, confirmando el uso de cal y arena como principales materiales, en línea con los estándares constructivos de la antigüedad romana². Asimismo, la fluorescencia de rayos X (FRX) y la microespectroscopía Raman se emplearon para identificar y cuantificar los elementos químicos presentes en las capas pictóricas. El análisis por microscopía confocal-interferométrica, permitió el estudio de las superficies rugosas de las muestras. Por otra parte, la microscopía electrónica de barrido con energía dispersiva de rayos X (SEM-EDS) proporcionó información sobre la composición elemental, con la ventaja de permitir conocer la distribución espacial de los diferentes elementos químicos, y con ello, deducir las técnicas de ejecución utilizadas por los pintores. Finalmente, cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (CG-MS) se aplicó para determinar la presencia de aglutinantes orgánicos¹.



Fig. 1. Ejemplo de muestra estudiada en esta investigación.

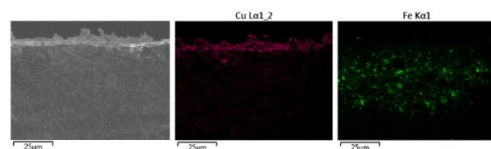


Fig. 2. Micrografía electrónica de barrido y mapa elemental EDS de la muestra de la Fig. 1.

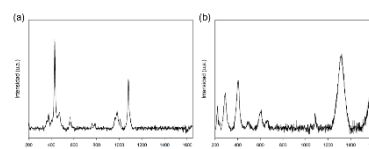


Fig. 3. Espectro Raman de la capa de pintura azul (a) y la capa de pintura roja (b) de la muestra de la Fig. 1.

Referencias

- ¹ Cerrato, E. J.; Cosano, D.; Esquivel, D.; Jiménez-Sanchidrián, C.; Ruiz, J. R. Spectroscopic Analysis of Pigments in a Wall Painting from a High Roman Empire Building in Córdoba (Spain) and Identification of the Application Technique. *Microchemical Journal* 2021, 168. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2021.106444>.
- ² Cosano, D.; Esquivel, D.; Jiménez-Sanchidrián, C.; Rafael Ruiz, J. Analysis of Mortars from the Castle Keep in Priego de Córdoba (Spain). *Vib Spectrosc* 2021, 112. <https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2020.103184>.

Agradecimientos

Los autores agradecen al Museo Histórico Municipal de Écija, especialmente a su Director, D. Antonio Fernández Ugalde, toda la colaboración prestada para la realización de este trabajo. Daniel Cosano agradece a fondos FEDER, Programa Operativo Fondo Social Europeo (FSE) de Andalucía (PP2F_L1_07) la ayuda económica recibida.

MULTIFUNCTIONAL METAL-ORGANIC FRAMEWORKS FOR THE PROMOTION OF AGRICULTURE

MC Contreras^a, A Zabala-Lekuona^b, P Salcedo-Abraira^a, A Rodríguez-Diéguez^a, S Rojas^a

^aDepartment of Inorganic Chemistry, University of Granada, Granada/Spain

^bDepartment of Applied Chemistry, University of País Vasco, Donostia-San Sebastián/Spain
antonio5@ugr.es

The use of agrochemicals is crucial in modern agriculture to meet the growing food demand. However, due to inefficient application practices, a significant portion of these chemicals fails to reach their targets, leading to abusive use and the ecosystem degradation^[1]. Consequently, it is imperative to create novel functional materials which enable the effective application of agrochemicals while preserving productivity and profitability.

Metal-organic frameworks (MOFs) are promising materials among the novel technologies proposed in agriculture due to their interesting properties (versatile composition, enabling a broad range of combinations; large specific surface areas and pore volumes, associated with great sorption capacities; easily functionalizable cavities; scalability of synthesis; and adequate stability profiles).^[2] In the past decade, MOFs have been studied as agrochemical release systems to enhance efficiency while reducing the leaching of toxic molecules to the environment. In this work, we take a further step and use organic agrochemicals as building blocks to construct agrochemical-based MOFs, what we have call as AgroMOFs. Specifically, different herbicides (glyphosine-H₅Gly, L-mimosine-H₂MI and glufosinate-H₂Glu) are employed as linkers, and combined with active metals (Cu and Zn) known for their antibacterial and fungicidal properties, led to the formation of AgroMOFs. Thus, we successfully synthesized and characterized three novel compounds: (1) [Cu₃(H₂Gly)₂(4,4'-Bipy)₂], (2) [Zn₂(MI)₂], and (3) [Cu₃(Glu)₂(OH)₂(4-PT)(H₂O)₄] (4,4'-Bipy = 4,4'-Bipyridine, 4-PT = 4,4'-(1,4-phenylene)bis(4H-1,2,4-triazole)). The stability of the prepared compounds and their bioactivity against herbs and different bacteria have been tested, showing promising results as multifunctional agrochemicals. For example, aqueous solutions (450 mg·L⁻¹) of GR-MOF-20, based on H₅Gly, demonstrated a better inhibition effect (21.7 ± 2.9%) in the germination of seeds of the invasive weed *Lolium multiflorum* than the free H₅Gly (13.3 ± 2.9%) after 7 days. Further, GR-MOF-20 showed an important antibacterial activity against *Escherichia coli* and *Pseudomonas syringae*, achieving the results obtained with Cu²⁺ solutions.^[3]

Acknowledgments

POR4Water (PLSQ_00188) , ProyExcel_00386 and ProyExcel_00105 projects, and FQM-394

References

- [1] B. Sierra-Serrano, A. García-García, T. Hidalgo, D. Ruiz-Camino, A. Rodríguez-Diéguez, G. Amariei, R. Rosal, P. Horcajada, S. Rojas. Copper Glufosinate-Based Metal–Organic Framework as a Novel Multifunctional Agrochemical. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2022**, 14, 34955
- [2] S. Rojas, A. Rodríguez-Diéguez, P. Horcajada. Metal–Organic Frameworks in Agriculture. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2022**, 14, 16983
- [3] MC. Contreras, P. Salcedo-Abraira, A. Zabala-Lekuona, A. Rodríguez-Diéguez, S. Rojas. Developing a Novel Agrochemical-Based MOF: A Multifunctional Platform with Herbicidal and Antibacterial Activities. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2025**, 17, 4147–4154

NANOPARTÍCULAS BIPIRÁMIDALES DE ORO PARA TERAPIA FOTOTÉRMICA

Irene López-Sicilia^a, María T. Martín-Romero^a, Luis Camacho^a, Juan J. Giner-Casares^a and Ali Abou-Hassan^{b,c}

^a Departamento de Química Física y T. Aplicada, Instituto Químico para la Energía y el Medio Ambiente (IQUEMA), Facultad de Ciencias, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, 14014, Córdoba (España).

^b PHENIX Laboratory, Faculté des Sciences et Ingénierie, Sorbonne Université, Campus Pierre et Marie Curie, 75005, Paris (Francia)

^c Institut Universitaire de France (IUF), 75231 Paris Cedex 05, Francia
q52losii@uco.es

El cáncer es uno de los problemas de salud pública más importantes a nivel mundial. Por ello, es necesario el desarrollo de nuevas terapias avanzadas y dirigidas para combatir eficazmente las células cancerosas con mayor selectividad. La nanomedicina está proporcionando varias terapias innovadoras para mejorar la eficacia terapéutica y reducir los efectos secundarios perjudiciales de la quimioterapia actual¹. Entre las terapias propuestas, la terapia fototérmica inducida por láser de infrarrojo cercano (NIR) mediada por nanopartículas de oro plasmónicas (AuNPs) presenta múltiples ventajas, como una instrumentación sencilla y económica, buena biocompatibilidad y daño mínimo a las células sanas.

En este trabajo, nos hemos centrado en el rendimiento fototérmico de las nanopartículas de oro bipirámidales (AuBPs) utilizando un láser NIR de 808 nm. Las AuBPs presentan una morfología anisotrópica, lo que permite la resonancia electrónica en dos bandas de plasmones superficiales (longitudinal y transversal). La banda de plasmones longitudinal de estas nanopartículas resuena entre 700 y 900 nm, por lo que es muy adecuada para su uso en terapias fototérmicas basadas en la irradiación con láser de infrarrojo cercano. Se ha demostrado que, aunque las temperaturas alcanzadas por las disoluciones acuosas de AuBPs son altas durante la irradiación, la estructura de estas nanopartículas se deforma y transforma, observándose cambios en su morfología y tamaño. Para comprender mejor este fenómeno, investigamos estas transformaciones utilizando técnicas multiescala, como la espectroscopia UV-Vis-NIR y la microscopía electrónica de transmisión.

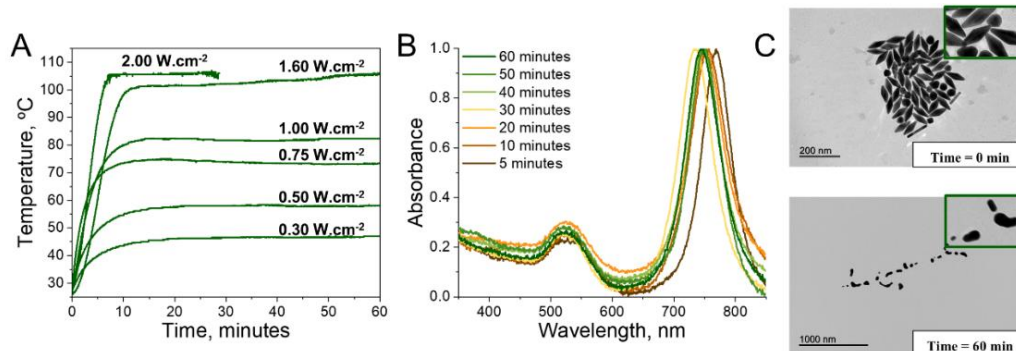


Figura 1. (A) Rampas de temperatura tras irradiar una suspensión de AuBPs@Citrato con una concentración de oro de 0.2 mM a diferentes densidades de potencia de láser. (B) Espectros UV-Vis-NIR normalizados a la unidad de AuBPs@Citrato no irradiados e irradiados a 1.0 W.cm⁻². (C) Imágenes de TEM de las AuBPs antes de irradiarlas y 60 minutos después de irradiarlas a 1.0 W.cm⁻².

Agradecimientos:

Irene López-Sicilia agradece al Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades por su contrato predoctoral FPI (PRE2021-097546).

Referencias:

- ¹ Amendoeira, A.; Rivas García, L.; Fernandes, A.; Baptista, P. V., *Adv. Therap.*, **2020**, 3, 1900153.
- ² Sánchez-Iglesias, A.; Winckelmans, N.; T. Altantzis, T.; Bals, S.; Grzelczak, M.; Liz-Marzán, L.M., *J. Amer. Chem. Soc.*, **2017**, 139, 107.

ESTUDIO DEL EFECTO SINÉRGICO MULTIMETÁLICO EN HIDRÓXIDOS DOBLES LAMINARES PARA SU ACTIVACIÓN COMO FOTOCATALIZADORES BAJO LUZ VISIBLE

A. Ruz-Luna^a, J. Hrovat^b, A. Renko^b, L. Marín^a, B. Gámiz^a, I. Pavlovic^a, L. Sánchez^a

^aDepartamento de Química Inorgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, 14014, Córdoba, España

^bFaculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Večna pot 113, 1000, Ljubljana, Slovenia

q72rulua@uco.es

El diseño de materiales fotocatalíticos ha avanzado considerablemente en los últimos años; sin embargo, aún no se ha logrado desarrollar un sistema que cumpla con todos los criterios necesarios para alcanzar una alta eficiencia en condiciones reales. Uno de los principales retos es mejorar la capacidad de absorción de luz en la región visible del espectro solar, ya que la mayoría de los fotocatalizadores tradicionales se activan bajo luz ultravioleta, que representa un pequeño porcentaje de la radiación solar (aproximadamente el 4-5 %)¹. Esta limitación ha impulsado la búsqueda de nuevos materiales capaces de aprovechar de manera más efectiva la luz visible, con el fin de aumentar el rendimiento en diversas aplicaciones, como puede ser la remediación ambiental.

En este contexto, los hidróxidos dobles laminares (HDL) constituyen una amplia familia de compuestos con fórmula general $[M^{II}_{1-x}M^{III}_x(OH)_2]^{x+} \cdot A^{n-}_{x/n} \cdot mH_2O$, donde M^{II} y M^{III} son cationes metálicos divalentes y trivalentes, respectivamente, y A^{n-} representa los aniones interlaminares. Los HDL ofrecen características muy atractivas para su empleo como fotocatalizadores debido a su composición versátil, bajo coste, facilidad de síntesis y sostenibilidad ambiental. Su estructura permite la incorporación de una amplia variedad de elementos metálicos, de manera que se pueden ajustar sus propiedades texturales y electrónicas, mejorando notablemente la absorción de luz visible²⁻³. No obstante, la mayoría de los HDL adolecen de un pobre comportamiento fotocatalítico cuando son irradiados con luz visible.

En este trabajo se estudió el efecto de la incorporación simultánea de los cationes Ni^{2+} , Mn^{2+} y Fe^{3+} en HDL de $MgAl-CO_3$ sobre su eficiencia fotocatalítica en la eliminación de óxidos de nitrógeno (NO_x), contaminantes atmosféricos relevantes por sus efectos nocivos sobre la salud humana y el medio ambiente. Los materiales fueron sintetizados mediante el método de coprecipitación y caracterizados mediante difracción de rayos X (XRD), espectroscopía infrarroja (FT-IR), espectroscopía de reflectancia difusa (DRS), isothermas de adsorción-desorción de N_2 , microscopía electrónica de transmisión (HR-TEM) y espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS), entre otras técnicas.

Los resultados demuestran que los HDL multimetálicos desarrollados son altamente eficaces para la eliminación fotocatalítica de gases NO_x bajo luz visible, destacando el papel sinérgico del hierro y el níquel con la matriz $MgAl$ en la mejora de la actividad fotocatalítica del sistema.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (proyecto PID2020-117516GB-I00). Antonio Manuel Ruz Luna agradece al Ministerio de Universidades el contrato predoctoral otorgado (FPU21/06893).

¹ Balbuena, J.; Cruz-Yusta, M.; Sánchez, L. *J Nanosci Nanotechnol.* **2015**, *15* (9), 6373–6385.

² Pastor, A.; Chen, C.; de Miguel, G.; Martín, F.; Cruz-Yusta, M.; Buffet, J.; O'Hare, D.; Pavlovic, I.; Sánchez, L. *Chem Eng J*, **2022**, *429*, 132361.

³ Mohapatra, L.; Parida, K. *J Mater Chem A*, **2016**, *4*, 10744–10766.

ONE-MINUTE METAL DECORATION OF ZnO NANOSTRUCTURES: A GREEN STRATEGY FOR ENHANCED PHOTOCATALYTIC PERFORMANCE

Simona Bettinia^{a,b}, Gabriele Manca^{a,c}, Gabriele Giancane^{a,d}, Rosanna Pagano^a, Donato Valli^e, Manuel Cano^f, Juan J. Giner-Casares^f, Manuel Cano Luna^f, Ludovico Valli^{a,b}

^a*Dipartimento di Scienze e tecnologie Biologiche e Ambientali, Università del Salento, Via Monteroni, Lecce, I-73100, Italy*

^b*Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienza e la tecnologia dei Materiali, INSTM, Via G. Giusti, Firenze, I-50121, Italy*

^c*Department of Chemistry, Biology and Biotechnology, Centro di Eccellenza per I Materiali Innovativi Nanostrutturati (CEMIN), University of Perugia, via Elce di Sotto 8, Perugia, 06123, Italy*

^d*Department of Cultural Heritage, University of Salento, Via D. Birago 64, Lecce, 73100, Italy*

^e*Department of Chemistry, KU Leuven, Celestijnenlaan 200F, Heverlee 3001, Belgium*

^f*University of Córdoba, Department of Physical Chemistry and applied Thermodynamics, Campus de Rabanales, Edificio Marie Curie, Córdoba, Spain E- 14014
gabriele.manca@dottorandi.unipg.it*

Hybrid nanostructures combining semiconductors and metals have attracted considerable interest due to their outstanding optical, electronic, and catalytic properties, arising from the synergistic integration of both components. For instance, coupling semiconductor photocatalysts with plasmonic metals has proven effective in enhancing charge separation, thereby boosting catalytic performance. Nevertheless, challenges remain regarding their synthesis, stability, and large-scale production. In this study, we propose a novel and highly sustainable method for the rapid, one-step synthesis of piezoelectric zinc oxide (ZnO) nanostructures decorated with various metals. The process involves aqueous dispersions of piezoelectric ZnO nanostructures exposed to metal ions and treated in a conventional ultrasonic bath for one minute. Unlike traditional methods—often characterized by high energy consumption, long reaction times, or complex procedures—our approach enables the decoration of ZnO nanostructures with metal nanoparticles in just one minute.

A preliminary study was carried out by exposing ZnO to three different gold ions (Au^{3+}) concentrations, where the successful formation of Au nanoparticles was confirmed through spectroscopic and morphological analyses (Fig. 1). This study also demonstrated that both the size and surface density of the Au nanoparticles can be finely tuned by adjusting the Au ion concentration and the sonication time. To validate the interfacial reactivity of the resulting ZnO@Au hybrids, two different redox processes were selected: the two-electron oxygen reduction to hydrogen peroxide (H_2O_2), and the photoreduction of Cr(VI) to Cr(III)—both relevant to environmental remediation and energy applications. The samples were dispersed in ultrapure water and irradiated with a solar simulator, showing a defined trend in terms of efficiency and mechanism selectivity, in agreement with structural and morphological observations. These results underscore the promise of this synthetic strategy for efficient photocatalysis. Finally, we report recent investigations about the versatility of this method using different metal precursors, along with preliminary photocatalytic tests aimed at environmental remediation using the resulting hybrid catalysts.

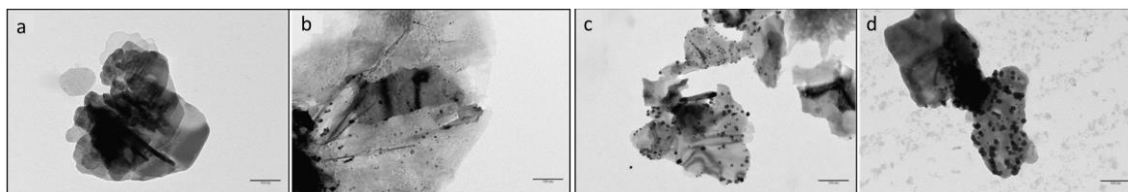


Figure 1 TEM images acquired for ZnO pristine (a) and ZnO with increasing concentration of Au nanoparticles (b-d)

PROCESAMIENTO COLOIDAL DE AEROGES FOTOCATALÍTICOS SOSTENIBLES BASADOS EN NANOCELULOSA Y C,N-TiO₂ PARA CAPTURA Y DEGRADACIÓN DE MICROPLÁSTICOS

Remedios Montenegro^a, Erika Iveth Cedillo-González^b, Alejandro Rodríguez^a, Chiara Canovi^b, Cristina Siligardi^b, Zoilo González^a.

^aBioPrEn Group (RNM940), Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Facultad de Ciencias, Universidad de Córdoba, 14014 Córdoba, Spain

^bDepartment of Engineering "Enzo Ferrari", University of Modena and Reggio Emilia, Via Vivarelli 10, Modena, 41125, Italy
z12moelr@uco.es

La inmovilización de nanopartículas semiconductoras en matrices poliméricas no solo permite reducir las operaciones de separación tradicionalmente necesarias para la recuperación del fotocatalizador en formato polvo (como filtración, centrifugación o sedimentación), disminuyendo así los costes asociados; sino que también ofrece una vía sostenible para valorizar residuos de origen biomásico que, de otro modo, serían descartados con el correspondiente impacto ambiental. En este contexto, la nanocelulosa se perfila como una matriz ideal, no solo por facilitar el manejo del fotocatalizador, sino también por su abundancia, elevada área superficial específica y notable capacidad de funcionalización, atribuida a la presencia de numerosos grupos funcionales.

Entre las distintas estrategias de inmovilización disponibles, el enfoque coloidal destaca por su simplicidad, rapidez y eficacia en la mejora de la dispersión y estabilización de los componentes de una suspensión. Esta estrategia favorece las interacciones electrostáticas entre las nanofibras de celulosa y los fotocatalizadores mediante la modificación de la carga superficial de las nanopartículas a través de la adsorción de un polielectrolito. De este modo, se logra una manipulación controlada del sistema, basada en el fenómeno de heterocoagulación entre nanofibras y nanopartículas.

En este trabajo, se incorporaron nanopartículas semiconductoras de C,N-TiO₂ en una matriz de nanocelulosa extraída a partir de paja de trigo, utilizando la estrategia coloidal descrita, con el objetivo de desarrollar aerogeles fotocatalíticos sostenibles. Estos aerogeles fueron empleados en la remediación de microplásticos de polietileno (PE), obtenidos a partir de un exfoliante comercial, mediante dos enfoques complementarios: la recolección física y la fotodegradación. Estos resultados ponen de manifiesto el potencial de los aerogeles híbridos de nanocelulosa y C,N-TiO₂ como materiales sostenibles y eficientes para la captura y degradación de microplásticos, ofreciendo una solución prometedora para la remediación ambiental en medios acuosos.

AJUSTE DEL CONTENIDO DE Zn^{2+} EN EL HIDRÓXIDO DOBLE LAMINAR $\text{Mg}_{3-x}\text{Zn}_x\text{Al}$ PARA UNA VIABLE ELIMINACIÓN FOTOCATALÍTICA DE GASES NO_x

L. Marín^a, P. Kenyon^b, D. O'Hare^b, F. Martín^c, I. Pavlovic^a, L. Sánchez^a, A. Pastor^a.

^aDepartamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, Instituto de Química para la Energía y el Medio Ambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, 14014, Córdoba, España

^bChemistry Research Laboratory, Department of Chemistry, University of Oxford, Oxford, OX1 3TA, UK.

^cDepartamento de Ingeniería Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, Campus de Teatinos, 29071, Málaga, España.
b32matol@uco.es

Actualmente, existe gran interés en disminuir la concentración de contaminantes atmosféricos debido a los efectos nocivos que provocan en el medio ambiente y la salud humana. Entre ellos se encuentran los óxidos de nitrógeno, generados por el uso de combustibles fósiles, presentes en zonas urbanas en niveles superiores a los recomendados por la Organización Mundial de la Salud. Dentro de las estrategias estudiadas para reducir su concentración, la oxidación fotocatalítica supone un método efectivo (proceso DeNO_x). En este contexto, los hidróxidos dobles laminares (HDLs) se presentan como nuevos sistemas fotocatalizadores más económicos y ambientalmente sostenibles, gracias a sus propiedades y características estructurales¹.

En este trabajo, se estudiaron una serie de HDLs nano-laminares y de fórmula $\text{Zn}_x\text{Mg}_{3-x}\text{Al}-\text{CO}_3$ ($x = 0, 0.5, 0.75, 1.5, 2, 3$), sintetizados mediante el método de deslaminación AMOST (Aqueous Miscible Organic Solvent Treatment), que presentan altos valores de superficie específica y excelente capacidad DeNO_x². Teniendo en cuenta que el Mg es un metal más económico y abundante que el Zn³, es de gran interés hallar un equilibrio entre el rendimiento fotocatalítico, coste de producción y sostenibilidad del material fotocatalizador.

Primeramente se realizó una completa caracterización de los HDLs sintetizados (composición, estructura, morfología, etc.). Tras esto, se realizaron los ensayos fotocatalíticos bajo luz UV-Vis observando una muy interesante actividad fotocatalítica para la eliminación de gases.

Para comprender el mecanismo de reacción, se realizaron medidas de EPR, XPS, UPS y DPMAS NMR, observándose que la relación Mg:Zn influye en la estructura electrónica de los LDHs. A su vez, la distribución de los metales divalentes afecta al posicionamiento de las bandas de conducción y de valencia, y al band gap, lo que condiciona la recombinación electrón/hueco y la capacidad de generación de radicales de oxígeno.

La muestra que presentó un mejor equilibrio entre rendimiento fotocatalítico y contenido de Zn, es el $\text{Zn}_{0.5}\text{Mg}_{2.5}\text{Al}$ -LDH, con una eficiencia de eliminación de gas NO superior al 50% y una alta selectividad del proceso DeNO_x. Además, esta actividad se mantiene estable tras varios ciclos fotocatalíticos, en ensayos de larga duración y bajo mayores concentraciones del gas contaminante. Estos resultados ponen de manifiesto el uso potencial del fotocatalizador $\text{Zn}_{0.5}\text{Mg}_{2.5}\text{Al}$ -LDH para la eliminación práctica de gases NO_x.

¹Rodriguez-Rivas, F.; Pastor, A.; Barriga, C.; Cruz-Yusta, M.; Sánchez, L.; Pavlovic, I. *Chemical Engineering Journal*, **2018**, 346, 151–158.

²Pastor, A.; Chen, C.; de Miguel, G.; Martín, F.; Cruz-Yusta, M.; Buffet, J. C.; O'Hare, D.; Pavlovic, I.; Sánchez, L. *Chemical Engineering Journal*, **2022**, 429, 132361.

³*The Periodic Table of Endangered Elements - American Chemical Society.*

<https://www.acs.org/green-chemistry-sustainability/research-innovation/endangered-elements.html> (accessed 2025-06-04).

ANÁLISIS AUTOMATIZADO DE XENOBIÓTICOS USANDO MICROFLUÍDICA BASADA EN GOTAS Y NANOCLUSTERS DE ORO

María Durán-Salinas, Ángela Écija-Arenas, Vanesa Román-Pizarro, Miguel Ángel García-Granados, Juan Manuel Fernández-Romero

Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Anexo "Marie Curie", E-14071 Córdoba, España
qa1feroj@uco.es

Los recientes avances en bioanálisis se han beneficiado de la miniaturización, automatización e integración de plataformas embebidas de bajo coste, lo que abre nuevas posibilidades para el monitoreo ambiental y agroalimentario. En este trabajo se presenta el desarrollo de un sistema portátil y miniaturizado que combina microfluídica basada en gotas (*droplet-based microfluidic*), nanosondas luminiscentes, control dinámico mediante Raspberry Pi y procesamiento de señales mediante una aplicación Python.

El sistema se centra en la monitorización de las interacciones entre derivados tiólicos y nanoclústeres de oro estabilizados con albúmina sérica bovina (BSA-AuNCs), cuya luminiscencia cambia al establecer dichas interacciones. Utilizando el glutatión como compuesto modelo, se aborda la detección de estos analitos en muestras ambientales y agroalimentarias, un desafío debido a sus concentraciones muy bajas y la complejidad de las matrices, con gran importancia para el control de contaminantes y la garantía de la seguridad alimentaria.

La microfluídica basada en gotas permite manipular volúmenes extremadamente pequeños, generando microreactores discretos que reducen el consumo de reactivos, contribuyendo a un enfoque más sostenible. La integración de cámaras RGB con la Raspberry Pi posibilita la adquisición y procesamiento de la luminiscencia emitida por las gotas, mientras que algoritmos y herramientas quimiométricas basadas en Python optimizan la señal.

Este sistema interdisciplinar combina innovación tecnológica con hardware accesible y procesamiento avanzado de datos, ofreciendo una solución portátil y automatizada para la detección in situ de xenobióticos, con potencial impacto en la vigilancia ambiental, la salud pública y la gestión sostenible de recursos.

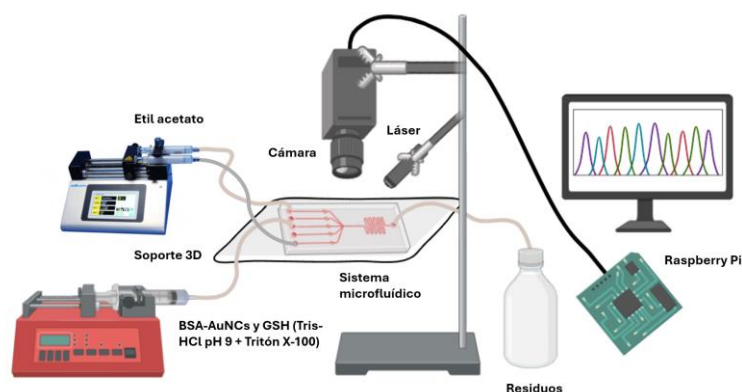


Figura 1. Esquema de la configuración del sistema microfluídico conectado a Raspberry Pi

Financiación: Este trabajo ha sido financiado por la submodalidad 2.6 "UCOProyecta", del Plan Propio de Investigación "Enrique Aguilar Benítez de Lugo" 2024 y el proyecto "Plan Complementario de I+D+i en el área de Ciencias Marinas" (PCM_00121, ThinkInazul), cofinanciado por la Consejería de Universidades, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía y por la Unión Europea a través de los fondos Next Generation EU del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia. Las opiniones y puntos de vista expresados son exclusivamente de los autores y no reflejan necesariamente los de la Unión Europea ni de la Comisión Europea.

DESARROLLO DE UN SENSOR ÓPTICO 3D CON COMUNICACIÓN BASADA EN IoT PARA LA DETERMINACIÓN DE CLOROFILA EN AGUAS NATURALES

M.A. García-Granados^a, María Salinas^b, J.L. Aranda^b, M.C. Gutiérrez^b, J.A. Siles^b, A.F. Chica, F^b. Tavares^c, **M.P. Aguilar-Caballeros^a**, M.A. Martín^b.

^a Química Analítica .

^b Química Inorgánica e Ingeniería Química.

^c Departamento de Mecánica de Medios Continuos y Teoría de Estructuras

^{a,b}. Edificio Marie Curie. ^c. Edificio da Vinci. Campus Universitario de Rabanales, Carretera N-IV, km 396
qa1agcam@uco.es

La preservación de masas hídricas, desde la perspectiva del control ambiental, lleva asociada la necesidad de elaboración de un inventario ambiental de zonas relevantes. Para su clasificación como tal, se incluyen, entre otros aspectos, el estado de conservación y la utilización de uno o más elementos terrestres y marinos, biodiversidad, etc. Entre los usos del agua que pueden afectar a la eutrofización se encuentra la implantación de instalaciones fotovoltaicas flotantes. El análisis de aguas, aun siendo necesario, requiere de protocolos tediosos y lentos, reduciendo la capacidad de evaluación. Por ello, el establecimiento de un protocolo de muestreo in situ y on line, en la medida de lo posible, constituiría un avance sustancial. La creación de un prototipo de vehículo flotante no tripulado que se encuentre dotado tanto de sensores de calidad del agua, incluyendo un novedoso sistema de cuantificación in situ de la clorofila, como de cámaras para la recogida de imágenes y sistema de pesca, ha constituido el objetivo de este estudio. El establecimiento de protocolos de uso, contrastados y validados con los métodos y técnicas normalizados da valor a su creación y uso.

Se ha desarrollado una plataforma analítica de respuesta rápida que consiste en un sensor óptico fabricado con tecnología 3D para la medición de clorofila a, por ser la mayoritaria en masas de agua dulce. El sensor integra mediante un sistema de flujo las etapas de muestreo, preconcentración y la elución, así como las medidas de absorción y de fluorescencia para la determinación de clorofila a. La estabilidad de la señales se controla a través de las medidas de turbidez mediante un sensor IR. El manejo de la plataforma analítica se realiza en base a dispositivos electrónicos adecuados y se conecta a un sistema IoT para realizar las medidas y transferir los datos y resultados obtenidos a la nube (Lora y, en ausencia de antena, la toma de datos está prevista con un dispositivo Blackberry). En esta comunicación se van a presentar algunos factores claves en el desarrollo de la plataforma analítica: geometría de las cámaras de ensayo y de la celda de medida, diseño del sorbente utilizado para la preconcentración, sistemas de detección y control de estabilidad de la señal, posibilidad de reutilización y/o regeneración del material sorbente, entre otros.

Agradecimientos

Estas investigaciones han sido realizadas bajo el marco del proyecto PCM_00121 financiado con recursos procedentes del Fondo de Recuperación «Next Generation EU» a través del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia y cofinanciado por la Consejería de Universidad, Investigación e Innovación de la Administración de la Junta de Andalucía. Los puntos de vista y las opiniones expresadas son únicamente del autor o autores y no reflejan necesariamente los de la Unión Europea o la Comisión Europea. Ni la Unión Europea ni la Comisión Europea son responsables de ellas." Además, la investigación se centra el proyecto MAGBOAT con cofinanciación del Centro para el Desarrollo Tecnológico y la Innovación (CDTI), el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER 2021-2027) y la Corporación Tecnológica de Andalucía (CTA). Esta colaboración se enmarca en los programas de apoyo a la I+D+i destinados a fortalecer el ecosistema innovador en la región.



NUEVAS PLATAFORMAS ANALÍTICAS DE RESPUESTA RÁPIDA INTEGRADAS CON TECNOLOGÍAS DE LA INFORMACIÓN EN ACUICULTURA DE PRECISIÓN

**M.A. García-Granados^a, M.V. Zurita-Lozano^a, A. Écija-Arenas^a, V. Román-Pizarro^a, María Salinas^b, M.C. Gutiérrez^b, J.A. Siles^b, A.F. Chica^b, F. Tavares^c, J.M. Fernández-Romero^a,
M.A. Martín^b, M.P. Aguilar-Caballos^a.**

^a Departamento de Química Analítica .

^b Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química.

^c Departamento de Mecánica de Medios Continuos y Teoría de Estructuras

^{a,b} Edificio Marie Curie. ^c Edificio Leonardo da Vinci. Campus Universitario de Rabanales, Carretera N-IV, km 396
iq2masam@uco.es

El uso de sensores in situ y en tiempo real de antibióticos en granjas piscícolas es crucial para el seguimiento efectivo de dichos compuestos debido a la estricta regulación existente y a su alto impacto sobre el medio ambiente. Estos sensores permiten la detección en tiempo real de compuestos específicos a los niveles de concentración usuales en las muestras ambientales. Al combinarse con la tecnología del Internet de las Cosas (IoT), los sensores fluorimétricos pueden transmitir datos de forma inalámbrica a plataformas centralizadas para su análisis. Esta conectividad permite el seguimiento remoto, la agregación e integración de datos y respuestas automatizadas, mejorando así la eficiencia y la toma de decisiones sobre la dosificación y/o actuación dentro del normal funcionamiento de una piscifactoría. Teniendo en cuenta que éstas pueden ser de agua dulce o salina, su influencia en la sensibilidad de la respuesta y la durabilidad de las superficies sensoras son factores clave a determinar. El estudio se ha realizado en dos piscifactorías Río Frio (agua dulce) y Calmar Cultivos (agua salina). El cultivo de agua dulce se basa en la cría de esturión para producir caviar, siendo lubinas y doradas las especies de cría en aguas costeras. En cada piscifactoría se ha caracterizado el agua en 7 puntos diferentes de las instalaciones, desde el agua influente hasta el agua que abandona las instalaciones tras su utilización y tratamiento de acondicionamiento. Esta caracterización se ha realizado utilizando procedimientos validados de muestreo y análisis de aguas para la determinación de los principales parámetros físico-químicos (pH, conductividad, redox, oxígeno disuelto, turbidez, salinidad y temperatura) y para la determinación de las principales familias de antibióticos y fármacos que pueden encontrarse en las aguas como potenciales contaminantes emergentes.

Las plataformas de respuesta rápida desarrolladas en el marco del proyecto utilizan tecnologías disruptivas de fabricación de sensores, como la impresión 3D, en combinación con sistemas de flujo a escala macro y microfluídica. En todos los casos, estas plataformas de respuesta rápida se integran con sistemas IoT que permiten la adquisición de datos y su posterior envío a la nube. Con ello, se minimizan los muestreos rutinarios al mismo tiempo que facilitan el seguimiento de la calidad del agua en tiempo real. La principal innovación estriba en el desarrollo de fases sensoras para la determinación de antibióticos y otros contaminantes emergentes, para los que el desarrollo de sistemas sensores comerciales es muy reducido o inexistente hasta la fecha.

Agradecimientos

Estas investigaciones han sido financiadas por el proyecto con referencia PCM_00121 financiado con recursos procedentes del Fondo de Recuperación «Next Generation EU» a través del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia y cofinanciado por la Consejería de Universidad, Investigación e Innovación de la Administración de la Junta de Andalucía. Los puntos de vista y las opiniones expresadas son únicamente del autor o autores y no reflejan necesariamente los de la Unión Europea o la Comisión Europea. Ni la Unión Europea ni la Comisión Europea son responsables de ellas."

DETERMINACIÓN SIMULTÁNEA DE LOS BISFENOLES A Y S MEDIANTE UN SENSOR ELECTROQUÍMICO BASADO EN NANOPARTÍCULAS PLASMÓNICAS

María Teresa Mansilla-Cejas^a, Manuel Cano^a, Juan José Giner-Casares^a

^aDepartamento de Química Física y Termodinámica Aplicada, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Córdoba 14014, España.
q52macem@uco.es.

Los Bisfenoles A (BPA) y S (BPS) son contaminantes emergentes presentes en aguas y alimentos envasados que pueden suponer un grave riesgo para la salud y el medio ambiente. Se trata de monómeros esenciales para la fabricación de plásticos que pueden migrar al agua o a los alimentos debido a su elevada solubilidad. Por ello, es necesario el desarrollo de sensores económicos y eficientes que permitan su rápida detección en este tipo de muestras. En este sentido, se considera que los sensores electroquímicos son ideales para esta problemática, ya que presentan una serie de ventajas intrínsecas, como son su sencilla instrumentación (Figura 1), respuesta rápida, alta sensibilidad y selectividad, y bajo coste.

En este trabajo se ha desarrollado un sensor electroquímico para la determinación simultánea de BPA y BPS basado en un electrodo de carbono vitrificado (GCE), el cual era modificado con nanopartículas de oro (AuNPs) o de plata (AgNPs). Para ello, ambas nanopartículas fueron sintetizadas por el método clásico de reducción con citrato y seguidamente caracterizadas mediante espectroscopía UV-visible y microscopía de transmisión electrónica (TEM). Ambas nanopartículas fueron empleadas para modificar GCE mediante deposición por gota, obteniendo GCE/AuNPs y GCE/AgNPs. Finalmente, la diferente capacidad para la detección simultánea de BPA y BPS en aguas de GCE/AuNPs y GCE/AgNPs fue investigada empleando distintos análisis electroquímicos, como la voltamperometría cíclica y la voltamperometría de pulso diferencial.

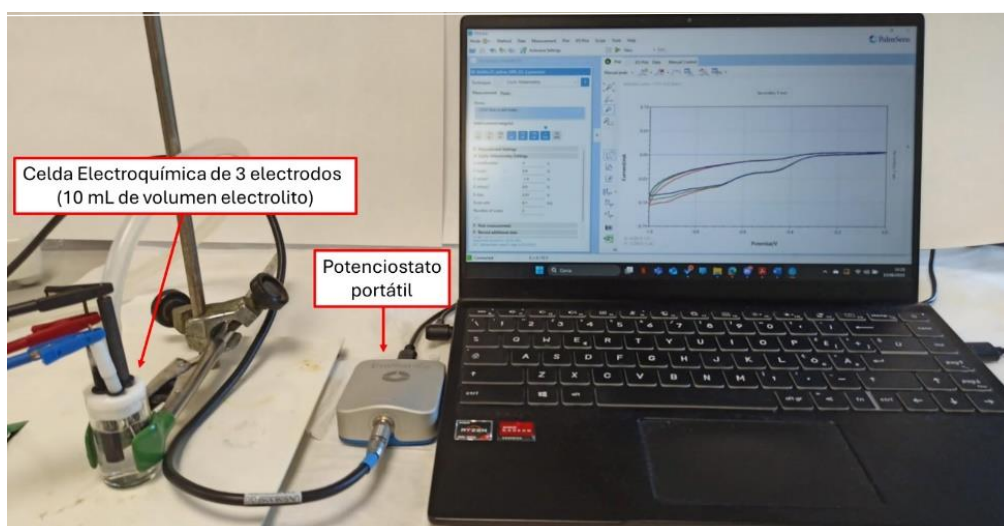


Figura 1. Imagen de la Instrumentación requerida para un sensor electroquímico.

Agradecimientos

Al Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades por el proyecto de investigación PID2020-112744GB-I00 y al grupo de investigación FQM-204.

NANOCLÚSTERES METÁLICOS ESTABILIZADOS POR OLIGONUCLEÓTIDOS: HERRAMIENTAS LUMINISCENTES PARA LA DETECCIÓN SELECTIVA DE XENOBIÓTICOS EN EL MEDIO AMBIENTE

Inmaculada Sánchez-Garrido, Vanesa Román-Pizarro, Ángela Écija-Arenas, Miguel Ángel García-Granados, Juan Manuel Fernández-Romero

*Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Anexo "Marie Curie", E-14071 Córdoba, España
q52ropiv@uco.es*

La evaluación luminiscente de nanoclústeres metálicos sintetizados mediante oligonucleótidos como plantillas ofrece una plataforma versátil para la determinación de compuestos xenobióticos en matrices ambientales y agroalimentarias. Este estudio destaca las propiedades ópticas únicas de los nanoclústeres de metales nobles, como oro, plata y cobre, estabilizados con oligonucleótidos, y su capacidad para detectar selectivamente antibióticos y derivados tiólicos.

La modificación de secuencias de oligonucleótidos o la funcionalización superficial de los OLG-AgNCs también favorece la interacción para su reconocimiento selectivo con diferentes grupos de compuestos xenobióticos cuya detección es fundamental por su impacto sobre la salud humana y el medio ambiente. Se han estudiado las interacciones de OLG-AgNCs con antibióticos de diferentes familias, como tetraciclinas, fluoroquinolonas y aminoglucósidos, así como derivados tiólicos.

Las técnicas espectroscópicas aplicadas a estos sistemas permiten evaluar cambios en la intensidad de la emisión luminiscente de los OLG-AgNCs y la presencia de los contaminantes objetivo, lo que posibilita su cuantificación. Esta estrategia ofrece ventajas significativas en comparación con métodos tradicionales, destacando por su sensibilidad, selectividad y potencial de miniaturización, lo que la posiciona como una herramienta prometedora para la monitorización en análisis medioambiental.

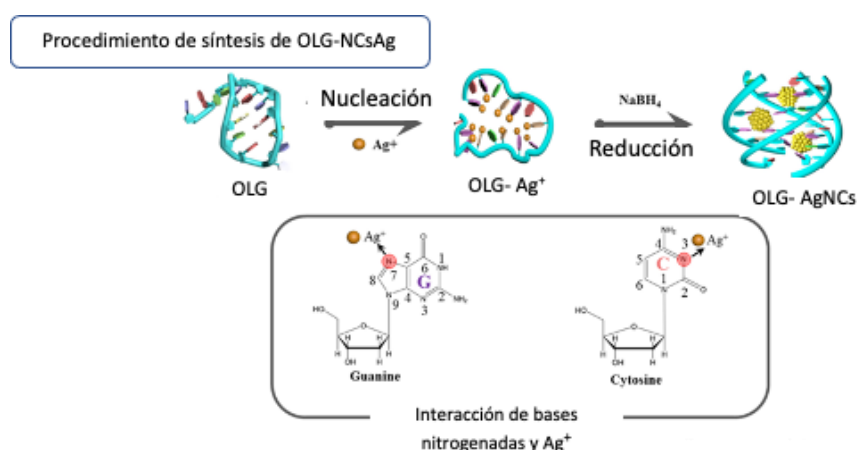


Figura 1. Esquema del procedimiento de síntesis de OLG-NCsAg.

Financiación: Este trabajo ha sido financiado por la submodalidad 2.6 "UCOProyecta", del Plan Propio de Investigación "Enrique Aguilar Benítez de Lugo" 2024 y el proyecto "Plan Complementario de I+D+i en el área de Ciencias Marinas" (PCM_00121, ThinkInazul), cofinanciado por la Consejería de Universidades, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía y por la Unión Europea a través de los fondos Next Generation EU del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia. Las opiniones y puntos de vista expresados son exclusivamente de los autores y no reflejan necesariamente los de la Unión Europea ni de la Comisión Europea.

PAPEL RECUBIERTO DE POLI(ETILEN-CO-VINIL ACETATO) COMO FASE SORBENTE EN BIOANÁLISIS: UN USO ALTERNATIVO A MATERIALES ASEQUIBLES

Jaime Millán Santiago^a, Saloua Hammadi^{a,b}, Latifa Latrous El Atarche^b, Rafael Lucena^a, Soledad Cárdenas^a

^a*Affordable and Sustainable Sample Preparation (AS₂P) Research Group, Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Edificio Marie Curie, E-14071 Córdoba, España*

^b*Laboratoire de Chimie Minérale Appliquée, Faculté des Sciences de Tunis, Université de Tunis El Manar, Campus Universitaire El Manar II, 2092 Tunis, Tunisie*

El tratamiento de muestra supone una etapa imprescindible en la mayoría de procesos analíticos para cumplir con los niveles de sensibilidad y selectividad requeridos. Para reducir el impacto ambiental que supone esta etapa del proceso analítico, la comunidad científica centra sus esfuerzos en reducir las cantidades de muestras, disolventes y fases sorbentes. Unas de las tendencias actuales en el ámbito del tratamiento de muestra es el uso de materiales de origen natural y sostenibles como fases sorbentes, así como la reutilización de materiales [1]. De esta forma, se le puede dar un uso alternativo a componentes que presentan un bajo coste y son comercialmente disponibles, permitiendo su uso en cualquier laboratorio independientemente de sus recursos económicos.

En esta comunicación, se presenta el uso de papel de filtro recubierto de un pegamento comercial como el poli(etilen-co-vinil acetato) (PEVA) como fase sorbente para la determinación de tres antidepresivos (paroxetina, fluoxetina y sertralina) en muestras de orina mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas en tándem. La modificación del papel con PEVA permite introducir nuevos mecanismos de interacción con los analitos como interacciones hidrofóbicas correspondientes al grupo etileno, además de puentes de hidrógeno e interacciones dipolo-dipolo asociadas al grupo carbonilo del vinil acetato. Las variables que afectan al proceso analítico se estudiaron siguiendo un modelo univariante: i) síntesis del material sorbente: % de polímero y número de inmersiones en la disolución polimérica, ii) ionización de los analitos: separación cromatográfica y iii) proceso de extracción: pH, fuerza iónica, volumen de muestra y tiempo de extracción. El método analítico propuesto se validó obteniendo unos límites de detección de 0,3 µg/L, límites de cuantificación de 1 µg/L, intervalo lineal entre 1 y 600 µg/L, linealidad superior a $R^2 > 0,999$, precisión mejor del 19 % y exactitud entre 89 y 108 %. Finalmente, se analizaron tres muestras de pacientes bajo el tratamiento de alguno de los analitos, obteniendo concentraciones dentro del intervalo lineal propuesto [2].

Referencias

¹ López-Lorente, Á.I.; Pena-Pereira, F.; Pedersen-Bjergaard, S.; Zuin, V.G.; Ozkan, S.A.; Psillakis, E. *Trends in Analytical Chemistry*, **2022**, *148*, 116530.

² Hammadi, S.; Millán-Santiago, J.; Latrous El Atarche, L.; Lucena, R.; Cárdenas, S. *Microchemical Journal*, **2025**, *216*, 114637.

Agradecimientos

La investigación desarrollada en este trabajo ha sido posible gracias al proyecto PID2023-146313OB-I00 concedido por el MICIU/AEI/10.13039/501100011033.

DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA BASADA EN DISOLVENTES SUPRAMOLECULARES PARA EL ANÁLISIS MULTIRESIDUO DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS EN PELO HUMANO MEDIANTE LC-QTOF

Cristina de Dios Pérez^a, Ana Ballesteros Gómez^a, Soledad Rubio Bravo^a.

^a *Departamento de Química Analítica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente, Universidad de Córdoba, 14014 Córdoba, España.
q52dipec@uco.es*

La creciente preocupación por los efectos adversos causados por los contaminantes ambientales en la salud humana ha impulsado el desarrollo de metodologías innovadoras para el análisis del exposoma químico, entendido como el conjunto de exposiciones químicas a lo largo de la vida. Dentro de estas herramientas, el análisis del cabello humano ha emergido como una matriz alternativa de gran valor para la biomonitorización, debido a su capacidad para reflejar exposiciones acumuladas a largo plazo, su recolección no invasiva y su fácil almacenamiento.

El pelo incorpora compuestos exógenos a través del torrente sanguíneo, secreciones o exposición pasiva. Su compleja estructura rica en queratina, lípidos y melanina lo convierte en una matriz robusta pero desafiante para el análisis. Por ello, el desarrollo de métodos analíticos eficaces exige etapas rigurosas de descontaminación, pretratamiento y extracción.

El presente trabajo propone una metodología innovadora basada en el uso de disolventes supramoleculares (SUPRAS) para la extracción simultánea de múltiples familias de contaminantes orgánicos presentes en muestras de pelo. Se han evaluado diversos SUPRAS con distintas nanoestructuras, incluyendo agregados inversos formados por 1-hexanol en mezclas de THF:agua, cubosomas generados a partir de 1,2-hexanodiol en medio acuoso con sales, y nanoestructuras tipo esponja obtenidas con 1,2-octanodiol en mezclas con 1,3-propanodiol. Estos SUPRAS y distintas condiciones de formación han sido estudiados con el objetivo de optimizar la recuperación de analitos y reducir los efectos de matriz durante el proceso de extracción.

Este trabajo se enfoca en seis familias representativas de compuestos detectables en cabello humano: bisfenoles, estimulantes, retardantes de llama organofosforados (OPFRs), pesticidas, sustancias perfluoroalquiladas (PFAS) y drogas (ilícitas y fármacos). Estas sustancias, ampliamente distribuidas en el entorno y productos de consumo, están asociadas a efectos negativos sobre el sistema endocrino, neurológico, inmunológico, reproductivo y otros. Su análisis en pelo permite evaluar exposiciones crónicas y detectar tanto el consumo como la exposición pasiva.

Este estudio ayuda a entender mejor el uso del cabello como una herramienta útil para analizar la exposición a contaminantes químicos. Además, busca mejorar los métodos de análisis para que sean más eficaces, respetuosos con el medio ambiente, y adecuados para las necesidades actuales en el control de la contaminación y la protección de la salud pública, siguiendo los principios de la química verde.

Agradecimientos: Los autores agradecen el apoyo financiero de MCIU/AEI/10.13039/501100011033/ FEDER,UE (PID 2023-149488OB-I00).