



REVISTA

MOLÉCULA

Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas

<https://moleculauclm.wordpress.com>

Nº 187 Época III  
Abril 2024

Viernes en el IRICA

Jornadas Divulgación Química

Tesis doctorales y estancias

Publicaciones y noticias

Presentación	P. 2
Noticias	P. 3
Viernes en el IRICA	P. 5
Conferencias	P. 6
Jornadas de divulgación de la Química	P. 7
Tesis doctorales	P. 9
Estancias	P. 12
Blended Intensive Programme (BIP)	P. 14
Artículos	P. 16
Publicaciones científicas	P. 20
Próximo número de Molécula	P. 21

Comité editorial: Sara Espinosa, Tania Paniagua, Rafael Granados, Antonio de la Hoz, José Pérez, Álvaro Ramírez, Abelardo Sánchez.

## PRESENTACIÓN

En este número de Abril se han recogido las noticias más relevantes para nuestra Facultad en las últimas semanas, como la recepción del primer equipo de espectroscopia de fotoelectrones de rayos X de Castilla-La Mancha en el IRICA o la creación de una nueva página web del Servicio de Instrumentación Centralizada de la Universidad de Castilla-La Mancha (SIC-UCLM). Además, se incluye información sobre unas Jornadas de divulgación de la Química, un Blended Intensive Programme (BIP), conferencia de Viernes en el IRICA, y las secciones de estancias realizadas en los últimos meses, tesis doctorales defendidas, artículos publicados por nuestros compañeros y otras noticias.

## El IRICA recibe el primer equipo de espectroscopia de fotoelectrones de rayos X de Castilla-La Mancha



*Esta infraestructura de última generación permite estudiar la composición de las superficies de materiales*

**El primer equipo de espectroscopia de fotoelectrones de rayos X de Castilla-La Mancha ha llegado a la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM), concretamente al Instituto Regional de Investigación Científica Aplicada (IRICA) en el Campus de Ciudad Real. Esta nueva infraestructura de última generación supone un avance cualitativo en las capacidades científicas de la institución y permitirá estudiar la composición de las superficies de los materiales.**

El Instituto Regional de Investigación Científica Aplicada (IRICA) de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) en el Campus de Ciudad Real ha recibido un equipo de espectroscopia de fotoelectrones de rayos X (XPS), el primero en Castilla-La Mancha. Se trata de un equipamiento científico de última tecnología que permitirá estudiar la composición de las superficies de materiales sólidos o líquidos para conocer tanto su composición, como de qué forma se encuentran los elementos químicos en esa superficie para después relacionarlos con sus propiedades o posibles usos. El equipo ha sido adquirido a través del Programa de Materiales Avanzados-CLM, incluido en los planes complementarios de I+D+i del Ministerio de Ciencia e Innovación y cofinanciado por este y por la Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha. Al frente de la iniciativa ha estado la investigadora de la UCLM Ester Vázquez Fernández-Pacheco, directora del IRICA, y su grupo de investigación MSOCNANO-CHEMISTRY. Este novedoso equipamiento de XPS, que ha sido instalado en el Servicio de Instrumentación del IRICA y que estará plenamente operativo a partir de verano, supone un avance cualitativo en las capacidades científicas de la UCLM.

La técnica de XPS es una de las técnicas más potentes para el estudio de la composición química de superficies y del estado químico de los átomos que se encuentran en ella. Debido a su gran versatilidad, sus aplicaciones abarcan un amplio rango de campos de investigación, desde el análisis de recubrimientos hasta el dopaje en semiconductores o el estudio de catalizadores y derivados de grafeno. La técnica es de gran importancia en campos como la cerámica, la corrosión de materiales, la microelectrónica, el reciclaje de materiales, la biomedicina, el diseño de materiales biocompatibles o la óptica, entre otros. La adquisición de esta nueva infraestructura de última generación ha sido posible gracias al trabajo de colaboración multidisciplinar con los grupos de investigación de la Universidad de Castilla-La Mancha OED, SaBio, CRN, ROBIND, DYPAM, TEQUIMA y PROBIO-Q.

## Servicio de Instrumentación Centralizada de la Universidad de Castilla-La Mancha (SIC-UCLM)

Servicio de Instrumentación  
Centralizada

SIC-UCLM



Se ha diseñado una nueva página web del **Servicio de Instrumentación Centralizada de la Universidad de Castilla-La Mancha (SIC-UCLM)** que facilita la colaboración dentro de la institución y pone el conocimiento científico, el equipamiento y las instalaciones de la UCLM al servicio de la investigación, la sociedad y la empresa.

Los objetivos del SIC-UCLM son:

- Optimizar el uso de técnicas y equipamientos dentro de la UCLM.
- Facilitar el intercambio de conocimiento científico-técnico con otras universidades y organismos públicos de investigación.
- Poner a disposición de las empresas una amplia cartera de servicios, equipamiento científico y aplicaciones tecnológicas.
- Formar a nuevos profesionales del sector.
- Dar visibilidad a la actividad científico-técnica en la sociedad.

El SIC-UCLM cuenta con un equipo humano altamente cualificado, instrumental especializado y multitud de instalaciones distribuidos en varios campus, facultades y centros de investigación.

**Servicio de Instrumentación Centralizada de la Universidad de Castilla-La Mancha (SIC-UCLM)**

<https://www.uclm.es/investigacion/serviciodeinstrumentacion>

## Conjugated Polymer Lasers: Strategies for Boosting the Stimulated Emission Properties



**Juan Cabanillas Gonzalez**

IMDEA Nanociencia, Calle Faraday 9, Ciudad Universitaria de Cantoblanco, Madrid 28049

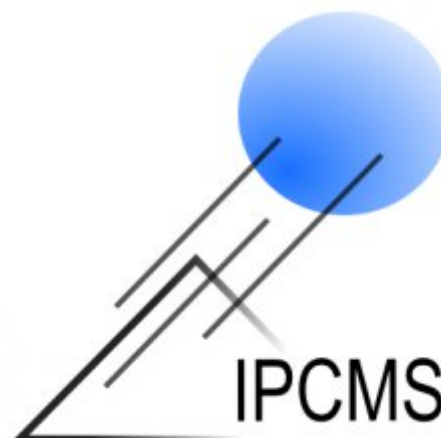
### ABSTRACT

Conjugated polymer blends coupled by Förster resonance energy transfer (FRET) have been widely exploited to achieve optically-pumped lasers operating at very low pumping thresholds. Among the plaid of conjugated polymers and molecules exploited for optical gain, fluorene-based polymers are considered front-runners, based on their high photoluminescence quantum yields, large optical gain coefficients and their processability assets in films of high optical quality. Two archetypes of polymers with these properties are poly(9,9-dioctyl-fluorene) (PFO) and its green-emitting relative Poly(9,9-dioctylfluorene-alt-benzothiadiazole) (F8BT) which work as excellent FRET-coupled blends but unexpectedly do not exhibit stimulated emission. In this talk we will shed light into the optical gain limiting factors of these blends. Upon investigating a series of polyfluorenes bearing different chain length or chain twists, we reveal improvements on the stimulated emission properties by harnessing exciton annihilation. We ascribe these effects to disruption of exciton transport, reducing the yield of charge-transfer states and associated photoinduced absorption losses.

### References

1. Host Exciton Confinement for Enhanced Förster-Transfer-Blend Gain Media Yielding Highly Efficient Yellow-Green Lasers, Zhang, Q.; Liu, J.; Wei, Q.; Guo, X.; Xu, Y.; Xia, R.; Xie, L.; Qian, Y.; Sun, C.; Lüer, L.; Cabanillas-Gonzalez, J.; Bradley, D. D. C.; Huang, W., *Advanced Functional Materials* 2018, 28 (17), 1705824. <https://doi.org/10.1002/adfm.201705824>
2. Simultaneously Enhancing Photoluminescence Quantum Efficiency and Optical Gain of Polyfluorene via Backbone Intercalation of 2,5-Dimethyl-1,4-Phenylene, Zhang, Q.; Wu, Y.; Lian, S.; Gao, J.; Zhang, S.; Hai, G.; Sun, C.; Li, X.; Xia, R.; Cabanillas-Gonzalez, J.; Mo, Y., *Advanced Optical Materials* 2020, 8 (12), 2000187. <https://doi.org/10.1002/adom.202000187>
3. Concurrent Optical Gain Optimization and Electrical Tuning in Novel Oligomer:Polymer Blends with Yellow-Green Laser Emission, Zhang, Q.; Wei, Q.; Guo, X.; Hai, G.; Sun, H.; Li, J.; Xia, R.; Qian, Y.; Casado, S.; Castro-Smirnov, J. R.; Cabanillas-Gonzalez, J., *Advanced Science* 2019, 6 (1), 1801455. <https://doi.org/10.1002/adv.201801455>
4. Boosting the Stimulated Emission Properties of Host:Guest Polymer Blends by Inserting Chain Twists in the Host Polymer, Chen Sun, Lubing Bai, Jinyi Lin, Wei Huang, Juan Carlos Roldao, Johannes Gierschner, Andres Burgos-Caminal, Olivia Borrell-Grueiro, Wojciech Gawelda, Luis Bañares, Juan Cabanillas-González, *Advanced Functional Materials* 2022, 32, 2206723. <https://doi.org/10.1002/adfm.202206723>

## Design of metal oxide core-shell nanoparticles from magnetism to electrocatalysis ... and more!



**Benoit P. PICHON**

Chemical Engineering of Functional Nanomaterials, Unistra, Strasbourg

Core-shell nanoparticles have gained tremendous interest due to their extraordinary properties resulting from the combination of different phases. This talk will explore new exciting aspects of transition metal oxide nanoparticles, which are envisioned as substitute for critical raw materials (noble metal & rare earth elements), with special emphasis on the magnetic and electrochemical properties.

## La Sección de Divulgación Científica del Grupo COLOR imparte unas Jornadas en Gran Canaria



Alumnos de varios centros quisieron fotografiarse con nosotros.



Pigmento blanco de plomo.

Los días 11 y 12 de abril se celebró en la Sala de Proyección Cinematográfica, Cinemax, del MUSEO ELDER DE LA CIENCIA Y LA TECNOLOGÍA de Las Palmas de Gran Canaria, organizada por la REAL ACADEMIA CANARIA DE CIENCIAS, las "Jornadas de divulgación de la Química" sobre "Nuestra Química de cada día".

Las Jornadas fueron encargadas, en lo referente a los contenidos científicos, didácticos y de divulgación, a José Antonio Murillo Pulgarín por el Vicesecretario de esta Real Academia el Prof. Dr. José Juan Santana, que además es Catedrático de Química Analítica y Director del Instituto de Estudios Ambientales y Recursos Naturales de la Universidad de Las Palmas de Gran Canarias. La Coordinadora de Actividades del Museo de la Ciencia ELDER, Arantxa Rodríguez, organizó las visitas y todo lo relacionado con los espacios y material para las conferencias. En total unos quinientos alumnos de Secundaria y Bachillerato de Gran Canaria.

Estas sesiones se basaron en la Educación STEAM, que, como es sabido, es la ampliación del anterior sistema de STEM donde se excluían las Ciencias Sociales y las Humanidades, y es la metodología que se acepta en la actualidad. Todas las sesiones se realizaron con experiencias magistrales en directo con la colaboración de Ascensión Gómez Blanco.

La Primera sesión versó sobre "La extraordinaria Química de las cosas ordinarias", presentando algunos aspectos de la relación de la Química con los productos farmacéuticos, medicina, ciencias forenses, el metabolismo, la alimentación y con los polímeros, abordando también el tema de la contaminación por ellos de forma científica y rigurosa.



En la segunda sesión se obtuvieron siete de los tan solo nueve pigmentos que utilizó Monet y los impresionistas.

Destacar la participación de muchos asistentes al finalizar las conferencias planteando cuestiones, que no es habitual en este tipo de eventos.

Las Jornadas fueron un éxito y ya se está diseñando una segunda edición que tendrá lugar en Lanzarote, incluso en otras islas del archipiélago canario.





## Supercritical CO<sub>2</sub> extraction of lavender essential oil for biomedical applications

**Doctoranda: Encarnación Cruz Sánchez-Alarcos**

**Directores: Teresa García y Jesús Manuel García**

**Departamento de Ingeniería Química**

El continuo incremento en la demanda de productos de origen natural en todos los ámbitos generado por los nuevos modelos de vida ha impulsado la búsqueda y uso de sustancias y compuestos de alto valor añadido derivados de materias primas o subproductos de la naturaleza, conocidas como sustancias bioactivas.

Los aceites esenciales y en concreto, el aceite esencial de lavanda se postula como una alternativa muy interesante frente a las sustancias sintéticas y fármacos tradicionales. Esto es debido a las propiedades terapéuticas que presenta como la capacidad antioxidante, anti-inflamatoria o antimicrobial.

Las técnicas tradicionales de obtención del aceite esencial vienen acompañadas de importantes inconvenientes, como el uso de disolventes orgánicos en la extracción Soxhlet o la degradación térmica de los extractos y alto consumo energético como la hidrodestilación. En las últimas décadas, la extracción con fluidos supercríticos se ha postulado como alternativa sostenible para la obtención de diferentes sustancias bioactivas. En este sentido, el CO<sub>2</sub> supercrítico puede reemplazar a los disolventes orgánicos tóxicos puesto que su punto crítico es fácilmente accesible, es inerte, está ampliamente disponible y permite obtener extractos puros.

Por estas razones, este trabajo de investigación se centra en el estudio del proceso de extracción con CO<sub>2</sub> supercrítico de aceite esencial de lavanda y forma parte de un conjunto de investigaciones que se han desarrollado en el laboratorio de Energía, Polímeros y Alta Presión del Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Castilla-La Mancha. La experiencia del grupo de investigación en distintas aplicaciones del CO<sub>2</sub> supercrítico avala y promueve la realización de esta tesis doctoral.

En primer lugar, para optimizar las condiciones de extracción, es necesario conocer la solubilidad del aceite en el disolvente supercrítico. Se estudió la influencia de la presión y la temperatura en la solubilidad del aceite esencial y, además, se ajustaron los resultados experimentales a los modelos semi-empíricos más utilizados, Chrastil, Del Valle y Aguilera y Adachi y Lu. Se estudiaron intervalos de presión de 120 a 250 bar y de temperatura de 40 a 80 °C y se observó que un aumento de presión favorecía la solubilidad mientras que sucedía lo contrario con la temperatura.

Por otra parte, debido a la disponibilidad limitada en bibliografía de información sobre el sistema de equilibrio formado por el aceite esencial de lavanda y el CO<sub>2</sub> supercrítico, se planteó la alternativa de diseñar y estudiar el equilibrio mediante el empleo del simulador comercial Aspen Plus. Mediante el uso del paquete termodinámico RK-Aspen y a partir de los datos experimentales y bibliográficos, se determinaron tanto propiedades de los compuestos puros como los parámetros de interacción binaria. El modelo obtenido mediante esta simulación podría considerarse una herramienta para conocer y representar sistemas de extracción que impliquen materias primas o compuestos similares, permitiendo así ahorrar trabajo experimental y facilitar el escalado de estos procesos.

Los experimentos de extracción supercrítica se realizaron en condiciones de presión de 180, 250 y 300 bar y a las temperaturas de 40 y 60 °C. Además de evaluar la influencia de estas variables en el rendimiento de extracción, se analizaron las diferencias con la adición de dos codisolventes, etanol y acetato de etilo. Se demostró que los valores más altos de rendimiento se lograron a partir de 250 bar y a 60 °C y que el uso de un 0.2% v/v de etanol favorecía significativamente estos valores.

Una vez optimizado el proceso de extracción a escala laboratorio, se llevaron a cabo los mismos experimentos en una mayor escala que podría considerarse planta piloto. Estas pruebas se realizaron en las instalaciones del Centro Tecnológico AINIA (Paterna, España). Se obtuvieron resultados de extracción similares a los aportados por el estudio a nivel laboratorio y se ajustaron los datos obtenidos a modelo matemático de Sovová, obteniendo los parámetros cinéticos correspondientes a los coeficientes de transferencia de masa.

El análisis cromatográfico de los extractos expuso que la composición del aceite esencial obtenido era similar a la del aceite esencial de lavanda comercial, identificándose como componentes mayoritarios el linalool y el acetato de linalilo. Además, se obtuvieron resultados muy satisfactorios relativos al potencial antioxidante de los extractos supercríticos.

A la hora de promover un método de extracción, no sólo se ha de tener en cuenta la viabilidad técnica sino el interés desde un punto de vista económico. Por este motivo, en este trabajo de investigación se ha desarrollado un plan de negocio que enfoca el desarrollo de la extracción de aceite esencial de lavanda con CO<sub>2</sub> supercrítico como alternativa sostenible y llamativa para el campo de los fármacos y nutraceuticos.

La matriz DAFO demostró que se trata de una idea de negocio prometedora y se realizó el estudio económico a partir de tres escenarios correspondientes a diferentes producciones anuales. La rentabilidad se analizó mediante un análisis financiero para 8 años, determinando el precio de venta a partir de referencias actuales en el mercado y la curva de precios realizada. Asimismo, el análisis de sensibilidad indicó que el precio de la instalación era el factor que más podría influir en la robustez económica del proyecto y en la estrategia empresarial. No obstante, la evaluación de las ratios financieras dio lugar a valores optimistas como el del ROE superior al 57% en todos los casos situando este proceso de extracción como una alternativa económicamente atractiva. Igualmente, al considerarse la lavanda como materia prima principal de este proyecto, una de las consecuencias clave del desarrollo de este proyecto sería el impulso económico y social de la región donde se enmarca esta investigación y donde abunda este cultivo, Castilla La-Mancha.

La parte final de este trabajo se centra en el desarrollo de una aplicación biomédica que incorpore el aceite esencial de lavanda, con el fin de contribuir de una manera real a la solución de problemas existentes en la sociedad, como la dermatitis atópica y otras alteraciones de la piel. Para ello, y en línea con el desarrollo de productos y técnicas inofensivas con el medio ambiente, se planteó la encapsulación del aceite esencial de lavanda en membranas de biopolímeros como el alginato y el quitosano. Estos materiales destacan por ser de origen natural, biodegradables y biocompatibles por lo que se presentan como la opción ideal para usos relacionados con el cuerpo humano.

Se prepararon membranas de alginato y quitosano, aislados y combinados e incorporando aceite esencial de lavanda. Se caracterizó su estructura, su capacidad de absorción de agua y el perfil de liberación de aceite esencial en PBS, factores que tienen mucha importancia de cara a la aplicación de estas membranas en la piel.

A continuación, se llevó a cabo la caracterización biológica de las mismas. Se emplearon células HaCaT, que se corresponden con una línea de células epiteliales humanas, para evaluar la citotoxicidad y la biocompatibilidad de las membranas preparadas. Se estudió la viabilidad celular con las partículas liberadas de las membranas, la cuantificación de ADN y el ensayo de DAPI-faloidina. La conclusión principal de este estudio fue que la membrana compuesta por alginato, quitosano y aceite esencial de lavanda incrementaba la proliferación celular y, por tanto, sería deseable para usos relacionados con la cicatrización de heridas. El desarrollo de las membranas y el estudio de caracterización biológica se llevaron a cabo durante una estancia predoctoral en la Universidade Nova de Lisboa, concretamente, en la Nova School of Sciences and Technology.

Para finalizar, se realizó un estudio preliminar sobre la capacidad antimicrobial de las membranas sintetizadas y del aceite esencial de lavanda. Estos experimentos se plantearon y realizaron en colaboración con el área de Microbiología de la Facultad de Medicina en los laboratorios de Ciudad Real de la Universidad de Castilla-La Mancha. Por un lado, se estudió el potencial inhibitorio del aceite esencial de lavanda sobre el crecimiento de especies bacterianas relacionadas con la piel *Staphylococcus aureus*, *Staphylococcus epidermidis*, *Pseudomonas aeruginosa* y el hongo *Candida albicans*. El aceite esencial de lavanda mostró una inhibición total cuando la concentración en el medio sólido de triptona-soja-agar era de un 1% v/v. Por otra parte, se inocularon las membranas y se realizaron dos pruebas, una inoculando directamente las membranas y otra midiendo la inhibición en caldo. A partir de estos experimentos se pudo observar que la adición de aceite en las membranas no tenía efectos muy significativos en la inhibición del crecimiento y que *S. aureus* y *P. aeruginosa* mostraron el crecimiento más notable, a pesar de que en todas las membranas se dio algo de inhibición. Por el contrario, fue el hongo *C. albicans* el que mostró la inhibición más alta.

## FRANCISCO JAVIER PATIÑO RODRIGO



Mi nombre es Francisco Javier Patiño Rodrigo y actualmente me encuentro estudiando el doctorado en química sostenible, en el grupo MSOC Nanochemistry, en el área de Química Orgánica de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas/IRICA.

De noviembre de 2023 a marzo de 2024, 4 meses, he realizado una estancia en la Vrije Universiteit Brussel (Bélgica) en el grupo Brubotics, bajo la supervisión del profesor Seppe Terryn.

El tema principal de mi tesis se basa en el diseño y caracterización de nuevos materiales con aplicaciones en robótica blanda. Son de especial interés para nosotros materiales con capacidad de curarse solos al dañarse (Self-healing) así como materiales inteligentes capaces de responder a estímulos externos, como la luz, temperatura, campos eléctricos...

En este contexto, para ampliar mis conocimientos sobre robótica blanda y sus aplicaciones, decidí trasladarme a Bruselas para trabajar en el diseño de un sensor de presión mediante tomografía de impedancia eléctrica. Para ello utilizamos un hidrogel que habíamos preparado en Ciudad Real, ya que presentaba la conductividad eléctrica necesaria, así como la capacidad de curarse de forma completamente autónoma cuando se dañaba. De esta forma, aprovechando el equipamiento del grupo Brubotics para llevar a cabo este tipo de medidas, pudimos desarrollar un prototipo de "piel" sensitiva.

Además del trabajo realizado, debo destacar la multiculturalidad del grupo, ya que contaba con integrantes de muchas nacionalidades distintas: colombianos, mexicanos, italianos, alemanes, indios azerbaiyanos, griegos, turcos, chinos, iraníes y claro, algún belga. Como podéis ver, se trata de un grupo muy grande y diverso, lo que en mi opinión, enriquece mucho la estancia.

# ESTANCIAS

Por último, me gustaría hablar un poco de la ciudad. Al llegar a Bruselas esperaba encontrarme una ciudad similar a Madrid, sin embargo es mucho más tranquila y acogedora de lo que esperaba, lo cual me resultó bastante agradable. A pesar de ello, es una ciudad con muchas opciones de ocio, scape rooms, escalada, bares, restaurantes, discotecas, museos... Además está muy bien conectada con el resto las ciudades más importantes de Bélgica, y en apenas 1 hora en tren podías estar en Gante, Brujas o Amberes, encontrándose los billetes rebajados a mitad de precio durante los fines de semana, para fomentar el turismo dentro del país.



Respecto a la gastronomía, lo más famoso de Bélgica son los chocolates, las patatas fritas y la cerveza. Respecto a los dos primeros no tengo mucho que añadir, están buenos, pero no he encontrado una gran diferencia que justifique la fama que tienen. Sin embargo, la cerveza es otro mundo completamente distinto y no tiene nada que ver con lo que estamos acostumbrados en España. Tanto la variedad como la calidad de las cervezas belgas son impresionantes, una visita obligada para todos aquellos amantes de esta bebida.

Merci pour tout Bruxelles!

Bedankt voor alles Brussel!

Get involved and participate!

# Promoting Circular Economy in the Chemical Sector

20-24 May, University of Castilla-La Mancha, Spain

Blended Intensive Programme (BIP)

A dynamic experience tailored for Master's and  
PhD students!

Discover the chemical industry of the region!

Expose your research in Sustainable  
Chemistry during our Summer School

Join us to enhance your knowledge,  
connect with industry experts, and  
contribute to sustainable future!





In spring 2024, UCLM is to organize 3 ECTS Blended Intensive Programme (BIP) whose title is "Promoting Circular Economy in the Chemical Sector".

This BIP combines short-term physical mobility (one week at UCLM) with an obligatory virtual component (two sessions online).

The International Relations offices from the sending institutions will provide information and support to students for physical mobility.

Students must apply before 26 April 2024.

Contact person: UCLM: Sonia Merino. [Sonia.Merino@uclm.es](mailto:Sonia.Merino@uclm.es)

## Preliminary program

### Virtual Part: 16 May and 28 May 2024

Two Microsoft Teams sessions where universities will present their research and collaborations related to circular economy and sustainable chemistry. They will also be encouraged to discuss the challenges in their region and how the university addresses them. Additionally, sessions will be held where all students can introduce themselves and get to know each other, talk about their country, city and university.

### Physical part: 20-24 May 2024

- 20 May: Reception of students and city tour.
- 21 May: Organized visit to Alvinesa Natural Ingredients Company. Touristic visit to a historical place of interest.
- 22 May: Visit to the research institutes of UCLM. Presentations and oral communications by invited speakers and students. (Summer school)
- 23 May: Visit to the National Hydrogen Centre. Presentations and oral communications by invited speakers and students. (Summer School)
- 24 May: Presentations and oral communications by invited speakers and students. (Summer School)



IRICA



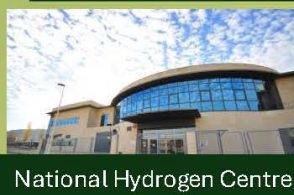
Former Grand Casino



Motilla del Azuer



Alvinesa



National Hydrogen Centre



Ciudad Real

## Cheers! A New Process for Gluten-Free Beer



*New research unveils the journey of sorghum in beer brewing, its potential as a gluten-free alternative, and how proteomics are being used to help reshape the future of industrial beer production.*

Brewing beer is an ancient way of putting chemistry to use, with evidence of controlled fermentation as many as 13,000 years ago. Beer is one of the most popular beverages on a global scale, with almost 280 billion liters sold in 2022. It is traditionally brewed using malted barley, but alternative recipes offering different flavor profiles and characteristics have gained popularity—including gluten-free varieties.

Many people are gluten intolerant, have celiac disease, or choose to avoid gluten for other health reasons. Gluten is a type of prolamin, a group of proteins used for storage in grass seeds. These prolamins contain high proportions of proline and glutamine, resisting proteolysis during digestion. In some people, this makes them highly immunogenic, and they can cause a destructive cascade of reactions that eventually damage the small intestine, reduce nutrient absorption, and negatively impact overall health. A promising alternative is sorghum, a naturally gluten-free grass and a staple ingredient throughout much of Africa—including for traditional fermented drinks. But the malting processes are very different to traditional barley grains, and to commercialize sorghum beers might require a different approach.

In a new study published in the *Journal of Proteome Research*, researchers set out to use proteomic and metabolomic approaches to gain insights into the sorghum brewing process, with the intention of developing efficient beer production techniques for this alternative grain. The team brewed both barley and sorghum, taking them through malting, mashing, and fermentation—and varying temperatures and time at different steps.



A key finding was that malting sorghum does indeed synthesize the amylases and proteases necessary for brewing, but mashing with sorghum compared to barley malt requires higher temperatures for efficient protein solubilization. This could be critical, since although sorghum proteins and starch have high solubilization temperatures, its enzymes are comparatively heat sensitive.

Although we've been doing it for thousands of years, modern beer production is a complex industrial process, and some of the biochemical details have not always been clear. This isn't the first time mass spectrometry proteomics have been employed to analyze the proteins present across time during nanoscale beer production. A previous paper, also published in the Journal of Proteome Research, revealed that many proteins are modified by protease digestion, glycation, or oxidation during the various processing steps. Work in this field allows us to improve beer production and quality control, as well as better understand the mechanisms controlling the diverse sensory properties of beer.

The authors conclude that sorghum could be a viable grain for industrial fermented drinks production, but incorporating it on a commercial scale will need careful process optimization for efficient production and high-quality beer.

[Read the Original Research Article](#)

*ACS Axial. December 2nd, 2023.*

## Age-Old Chemistry: The Mona Lisa



*Learn how da Vinci's most famous masterpiece is playing her part in helping researchers uncover the materials and techniques used in her creation—with the assistance of X-ray and infrared techniques.*

Everyone has heard of the Mona Lisa, even if they haven't jostled in the crowd at the Louvre for a glimpse of her enigmatic smile. Painted some time between 1503-1519, she is one of fewer than 20 remaining works of Leonardo da Vinci—a piece of the enduring puzzle and interest that surrounds this great master and thinker of the Italian Renaissance.

da Vinci's interests spanned numerous disciplines that we would recognize today as chemistry, engineering, physics, mathematics, and zoology. He has been credited with ideas and inventions far ahead of his time, and his artistic works are no less extraordinary, refusing to fit within the accepted practices of the time.

In particular, work has shown that the buildup and materials used in each of da Vinci's paintings is different, especially in the thick layer between the wooden panel and the final image. Previous X-ray imaging revealed a radio-opaque, thick paint layer under the Mona Lisa's surface.<sup>1</sup> In other da Vinci paintings, art historians and chemists have identified different materials in this preparatory layer from water-soluble glue, gypsum, and lead white, to orange oil mixed with white and red lead.

Some believe these differences could be due to the way the boards were prepared, with larger panels perhaps coming pre-primed from a carpenter and others made by hand from unfinished planks.<sup>1</sup> Now, research published in the *Journal of the American Chemical Society* is painting a new picture using X-ray and infrared microanalyses.<sup>2</sup>

Victor Gonzalez and colleagues used synchrotron radiation high-angular resolution X-ray powder diffraction (SR-HR-XRPD) and micro Fourier transform infrared spectroscopy ( $\mu$ -FTIR) to gather new clues on the Mona Lisa's ground layer, and they discovered an uncommon composition. Investigation of a minuscule paint fragment revealed the presence of a plumbonacrite—a compound that the team had previously detected once in a fragment from a van Gogh painting, and more recently in some Rembrandt works—but never before in anything from the Italian Renaissance.<sup>3-5</sup> Since this rare lead carbonate is stable only in an alkaline environment, it could have resulted from chemical reactions involving an alkaline lead compound, such as types of lead oxide commonly used as a drier.

Gonzalez and his team have previously published work in Analytical Chemistry on how to determine the origin and history of lead-white pigments by their photoluminescence properties,<sup>6</sup> giving art historians a way to fingerprint the materials that make up famous and valuable paintings. This further analysis supports the use of a highly saponified oil containing lead soap for the ground layer behind the Mona Lisa. The authors took these chemical findings and reviewed da Vinci's manuscripts, looking for clues about historical use from known compound names: litharge for a tetragonal, orange-red form of lead oxide stable at room temperature, and massicot for the orthorhombic, yellow high-temperature form—but both terms also have other meanings. Nevertheless, da Vinci's texts mention letargirio di pionbo as a skin and hair remedy, suggesting he had access to the compound for pharmaceutical uses, and may have repurposed it for artistic experiments. And the term macicot or masticot are used in a recipe for how to prevent decay in a painting from decay and to “preserve it always fresh and unfaded”.<sup>2</sup>

Taken together, these findings help shed light on the old master's palette and add a new dimension to our appreciation of the small but perfectly formed Mona Lisa.

## References

1. Ravaud, E. et al. *L'art de la matière; L'art et la manière, Léonard de Vinci*, 2019; pp 358-369.
2. Gonzalez, V. et al. [X-ray and Infrared Microanalyses of Mona Lisa's Ground Layer and Significance Regarding Leonardo da Vinci's Palette](#). *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 42, 23205-23213.
3. Gonzalez, V. et al. [Composition and microstructure of the lead white pigment in Masters paintings using HR Synchrotron XRD](#). *Microchem. J.* 2016, 125, 43-49.
4. Gonzalez, V. et al. [Unraveling the Composition of Rembrandt's Impasto through the Identification of Unusual Plumbonacrite by Multimodal X-ray Diffraction Analysis](#). *Angew. Chem. Int. Ed.* 2019, 58, 5619.
5. Gonzalez, V. et al. [Lead \(II\) Formate in Rembrandt's Night Watch: Detection and Distribution from the Macro-to the Micro-scale](#). *Angew. Chem.* 2023, 135, e202216478.
6. Gonzalez, V. et al. [Revealing the Origin and History of Lead-White Pigments by Their Photoluminescence Properties](#). *Anal. Chem.* 2017, 89, 5, 2909-2918.

[Read the Original Research Article](#)

*ACS Axial*. December 4th, 2023.

## QUÍMICA ORGÁNICA

A. Lacueva-Aparicio, V. J. González Velázquez, A. R. Remacha, D. Woods, E. Prado, I. Ochoa, O. Sara, E. Vázquez. A microphysiological system for handling graphene related materials under flow conditions, *Nanoscale Horizons*, 2024, ASAP Article.

DOI: [10.1039/d4nh00064a](https://doi.org/10.1039/d4nh00064a)

S. Khaliha, F. Tunioli, L. Foti, A. Bianchi, A. Kovtun, T. D. Marforio, M. Zambianchi, C. Bettini, E. Briñas, E. Vázquez, L. Bocchi, V. Palermo, M. Calvaresi, M. L. Navacchia, M. Melucci. Upcycling of plastic membrane industrial scraps and reuse as sorbent for emerging contaminants in water, *Environ. Sci.: Water Res. Technol.* 2024, ASAP Article.

DOI: [10.1039/D3EW00900A](https://doi.org/10.1039/D3EW00900A)

A. M. Garcia, J. A. Garcia-Romero, S. H. Mejias, P. Prieto, V. Saggiomo, A. H. Velders, M. L. Soriano, V. Ruiz-Díez, J. Cabanillas-González, M. V. Gomez. Microfluidic-driven short peptide hydrogels with optical waveguiding properties. *J. Mater. Chem. C* 2024.

DOI: [10.1039/d4tc00282b](https://doi.org/10.1039/d4tc00282b)

## INGENIERÍA QUÍMICA

Á. Ramírez, M. Muñoz-Morales, E. López-Fernández, F. J. Fernández-Morales, and J. Llanos, "Advancing circular economy: Critical insights into waste biomass derived carbon electrodes for (bio)electrochemical water treatment," *Curr. Opin. Electrochem.*, vol. 46, p. 101492, 2024.

DOI: [10.1016/j.coelec.2024.101492](https://doi.org/10.1016/j.coelec.2024.101492)

Y. Delgado, N. Tapia, M. Muñoz, M. Álvaro, R. Javier, and L. Ignacio, "Effect of hydrochar - doping on the performance of carbon felt as anodic electrode in microbial fuel cells," *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 2024.

DOI: [10.1007/s11356-024-33338-2](https://doi.org/10.1007/s11356-024-33338-2)

## TECNOLOGÍA DE ALIMENTOS

M. Osorio Alises, E. Sánchez-Palomo, M.A. González Viñas, Effects of winemaking techniques on the volatile compounds of Chelva wines, *Food Bioscience*, Volume 59, 2024, 104121, ISSN 2212-4292.

DOI: [10.1016/j.fbio.2024.104121](https://doi.org/10.1016/j.fbio.2024.104121)

## En el próximo número de Molécula...

El próximo número de MOLÉCULA incluirá las actividades que tengan lugar en la Facultad durante el mes de mayo. En concreto, el Acto 50 años transformando Ciudad Real con la Química, así como más noticias de interés, estancias y tesis doctorales defendidas.

**#DivulgaUCLM**

<https://moleculauclm.wordpress.com/>