

LIBRO DE ABSTRACTS

# VII Simposio

de Investigación en Ciencias Experimentales

Festividad de San Alberto Magno  
Patrón de CC Experimentales

14 y 15 de Noviembre 2018



**Libro de Abstracts**

**2018**



*experimentales*

Editores: Ignacio Fernández de las Nieves, M<sup>a</sup> Carmen Cerón García, Miriam Álvarez Corral, Enrique de Amo Artero.

Edición: Universidad de Almería

ISBN: 978-84-17261-38-2

DEPÓSITO. LEGAL: AL 2590-2018

# VII Simposio de Investigación en Ciencias Experimentales

Festividad de San Alberto Magno  
14 y 15 de noviembre de 2018

## Lugar de Celebración

Sala de Grados y Hall del Aulario IV  
Universidad de Almería  
Campus de la Cañada  
Carretera de Sacramento, s/n  
04120, Almería



## Índice

1. Organización	2
Comité Organizador	
Comité Científico Evaluador	
2. Saluda del Decano de la Facultad de Ciencias Experimentales	3
3. Carta del Comité Organizador	4
4. Información importante del Simposio	5
5. Programa	6
6. Patrocinio del Simposio	8
7. Lista de títulos de pósteres	9
8. Resúmenes	
Biotecnología y bioprocesos industriales	15
Ciencias aplicadas y medioambientales	30
Matemáticas	43
Química	47
Conferencias plenarias	77
9. Lista de los autores principales	82

## 1. Organización

### *Comité Organizador*

Ignacio Fernández de las Nieves (Universidad de Almería)

M<sup>a</sup> del Carmen Cerón García (Universidad de Almería)

Miriam Álvarez Corral (Universidad de Almería)

Enrique de Amo Artero (Universidad de Almería)

### *Comité Científico Evaluador*

María Martínez Galera (Universidad de Almería)

Juan Capel Salinas (Universidad de Almería)

Francisco García Camacho (Universidad de Almería)

María Dolores Macías Sánchez (Universidad de Cádiz)

Cecilio Oyonarte Gutiérrez (Universidad de Almería)

Blas Torrecillas Jover (Universidad de Almería)

Daniel Sánchez-Rodas Navarro (Universidad de Huelva)

Gabriel del Barrio Escribano (CSIC -EZAA Almería)

Pedro A. Guil Asensio (Universidad de Murcia)

## 2. Saluda del Decano de la Facultad de Ciencias Experimentales

La celebración durante los días 14 y 15 de noviembre de 2018 del VII Simposio en Ciencias Experimentales hace explícito el compromiso de la Facultad de Ciencias Experimentales de la UAL con el apoyo a la tarea científica de sus miembros. Como siempre, lo haremos en el entorno de la celebración de nuestro patrón, san Alberto Magno, y justo después de la Semana de la Ciencia.

En esta séptima edición damos un salto cualitativo muy importante: dejamos ya de llamarnos "Minisimposio" para ser ahora "Simposio". Y lo hacemos desde la consciencia de que tenemos entre nuestras manos una experiencia que empieza a consolidarse más allá de este Campus de La Cañada de san Urbano, donde nació en 2011. Os damos la bienvenida expresa a quienes habéis llegado desde otras Universidades andaluzas para compartir estos dos días aquí, en Almería. Como siempre, el objetivo será el de plasmar sobre papel, con vuestros pósteres, y de comunicar en vivo, en las sesiones flash, vuestros resultados más recientes.

Este año estamos conmemorando el XXV aniversario de nuestra universidad, y queremos hacernos conscientes de que ésta es una de las maneras en la que los investigadores de esta Facultad colaboramos en la consolidación de esta institución. Nuestra colaboración no sería realidad sin las muchas otras colaboraciones que confluyen en este acontecimiento: el compromiso de cada año de la Escuela Internacional de Doctorado, las empresas que financian los diferentes premios, los colegas que conforman el Comité Científico, y el resto de integrantes del Comité Organizador.

A todos ellos quiero transmitir mis felicitaciones y agradecimiento, en nombre propio, del Equipo decanal que coordino y en el de toda la Junta de la Facultad de Ciencias Experimentales que presido. A todos os deseo un fructífero VII Simposio y un feliz san Alberto Magno 2018.

Enrique de Amo Artero  
*Decano de la Facultad de Ciencia Experimentales*



### 3. Carta del Comité Organizador

Una edición más, en esta ocasión la séptima, el Comité Organizador desea darles la bienvenida al Simposio de Investigación en Ciencias Experimentales 2018. Como anécdota a destacar se ha de hacer mención al cambio de título de la propia jornada científica al renombrarse como Simposio en lugar del ya extinto Minsimposio. La experiencia adquirida en estos años y sobre todo el éxito acumulado desde 2011 en el que se gestó la primera edición, son avales suficientes para darle una mayor proyección a una jornada tan querida y motivadora para todos nosotros.

En este 2018 se consolidan el número de conferencias plenarias hasta un total de cuatro, distribuidas por pares entre la jornada del 14 de noviembre y la jornada del 15 de noviembre, día de San Alberto. Este año, además, han aumentado las empresas colaboradoras y que constituyen el empuje necesario para poder otorgar los premios en metálico a las mejores comunicaciones en modalidad *flash*. La incorporación de Bruker Española y de Clever I+C son un acicate al buen hacer por parte de todos los investigadores involucrados en presentar la ciencia realizada en nuestra Universidad. Como todos los años, las temáticas en Química, Ambientales, Matemáticas y Biotecnología, serán eje fundamental sobre el cual se sustenten todas las contribuciones.

Sin duda alguna, lo que hace que un año más nos impliquemos en la organización de este pequeño evento científico, es la oportunidad que nos brinda la Facultad de Ciencias Experimentales de crear un espacio y entorno adecuados para la discusión científica entre nuestros estudiantes de grado de último curso, doctorandos más o menos iniciados en sus respectivas tesis doctorales, e investigadores posdoctorales que gracias a la buena progresión que la Universidad está cosechando en cuanto a financiación pública y privada recibida, son cada vez más numerosos.

No podemos dejar de mencionar en esta carta de presentación la extraordinaria labor que un año más desempeña el comité científico, este año constituido por los profesores Dr. Blas Torrecillas Jover, Dr. Cecilio Oyonarte Gutiérrez, Dra. María Martínez Galera, Dr. Francisco García Camacho y Dr. Juan Capel Salinas. Este año, hemos de trasladar también nuestro agradecimiento a miembros del comité científico externo a la Universidad de Almería, que este año lo constituyen los profesores Dra. María Dolores Macías Sánchez (Universidad de Cádiz), Dr. Daniel Sánchez-Rodas Navarro (Universidad de Huelva), Dr. Gabriel del Barrio Escribano (CSIC -EZAA Almería) y Dr. Pedro A. Guil Asensio (Universidad de Murcia).

Estamos plenamente convencidos de que un año más, el Simposio de Investigación, será un encuentro académico, científico y social muy enriquecedor para todos los asistentes. Les esperamos a todos los días 14 y 15 de noviembre de 2018, este último el día de San Alberto Magno, patrón de las Ciencias, y poder disfrutar conjuntamente de esta festividad. Reciban un cordial saludo.

*Comité Organizador*  
*Ignacio Fernández de las Nieves (Catedrático, Dpto. Química-Física)*  
*María del Carmen Cerón García (Prof. Titular, Dpto. Ingeniería Química)*  
*Miriam Álvarez Corral (Prof. Titular, Dpto. Química-Física)*  
*Enrique de Amo Artero (Prof. Titular, Dpto. Matemáticas)*

## 4. Información importante del Simposio

Podrán participar en este VII Simposio cualquier alumno de último año de grado, alumnos de doctorado o de máster, todos ellos pertenecientes a la Facultad de Ciencias Experimentales (FCCEE) de la UAL así como de otras facultades experimentales andaluzas. Del mismo modo, los investigadores posdoctorales podrán participar en las mismas condiciones. Asistentes a este Simposio podrán ser todos aquellos miembros de la comunidad universitaria interesados en conocer las investigaciones más recientes llevadas a cabo en las disciplinas de Ciencias Experimentales.

El Comité Científico será el encargado de valorar todos los trabajos en formato póster enviados, y seleccionar 20 de todos ellos, para su posterior exposición oral en modalidad flash. Esta modalidad consiste en exponer el trabajo presentado en 5 minutos sin turno de preguntas. El comité científico valorará negativamente aquellas que sobrepasen el tiempo establecido. La exposición consistirá en un breve resumen de la investigación (temática, relevancia, equipo investigador, resultados más relevantes, etc.) no superior a 5 minutos. Se pondrá a disposición de los seleccionados material informático y sala de grados para la presentación. De las 20 exposiciones el comité escogerá aquellos merecedores del premio. La valoración estará basada en tres criterios: carácter divulgativo, contenido, calidad científica y presentación.

Los premios serán de 300 euros, pudiendo otorgarse más de uno por temática. Un año más, las temáticas para intentar abordar a todos los doctorados de Ciencias de la Universidad de Almería y fomentar así que la jornada sea aún más enriquecedora son 1) Biotecnología y Bioprocesos industriales, 2) Ciencias Aplicadas y medioambientales, 3) Matemáticas, y 4) Química. La resolución de los mismos se dará a conocer el día de San Alberto en el acto de clausura, el 15 de noviembre de 2018. La selección de premios la llevará a cabo el comité científico.

## 5. Programa

### Miércoles 14 de noviembre

9:30-10:00 h	Entrega de documentación
10:00-10:30 h	Bienvenida Sr. Decano de la Facultad de Ciencias Experimentales de la Universidad de Almería
10:30-11:00 h	Comunicaciones Flash
11:00-11:30 h	Conferencia Plenaria de D. Fernando Diánez Martínez "Las vías de transferencia de los resultados de investigación: patentes, spin off e investigación colaborativa"
11:30-12:00 h	Descanso para café
12:00-12:30 h	Comunicaciones Flash
12:30-13:00 h	Conferencia Plenaria de D. Juan Antonio Chaichio Moreno "Movilidad internacional de investigadores: Acciones Marie Sklodowska-Curie"

### Jueves 15 de noviembre

9:30-10:00 h	Comunicaciones Flash
10:00-10:30 h	Conferencia Plenaria de D. Pedro A. Guil Asensio "Álgebra no conmutativa"
10:30-12:00 h	Sesión de pósteres distribuida por doctorados: <ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Biotecnología y bioprocesos industriales</li> <li>✓ Ciencias aplicadas y medioambientales</li> <li>✓ Química</li> <li>✓ Matemáticas</li> </ul>
12:00-13:00 h	Conferencia San Alberto D. Ginés Morata "Competición celular: cómo eliminar células indeseables" Ubicación: Auditorio de la Universidad
13:15 h	Copa de vino cortesía de DICSA

---

16:30-17:00 h	Comunicaciones Flash
17:00-17:30 h	Conferencia Plenaria de D. Gabriel del Barrio Escribano "Elementos geomáticos para la valoración y seguimiento de la madurez ecológica en ecosistemas terrestres"
17:30-18:00 h	Café
18:00-18:30 h	Comunicaciones Flash
18:30-19:00 h	Deliberación del comité científico
19:15 h	Entrega de premios y clausura del Simposio

---

## 6. Patrocinio del Simposio



## 7. Lista de títulos de pósteres

### ***Bioteología y bioprocesos industriales***

- B-P1. Degradation of micropollutants in WWTP secondary effluents by solar photo-Fenton process operated in continuous mode at neutral pH in raceway pond reactors S. Arzate
- B-P2. Análisis metagenómico de la comunidad bacteriana en el proceso de compostaje de residuos hortícolas A. Camelo-Castillo
- B-P3. Caracterización metagenómica fúngica durante el proceso de compostaje de residuos hortícolas A. Camelo-Castillo
- B-P4. WWTP secondary effluents disinfection by solar photo-Fenton process in continuous mode at neutral pH I. de la Obra-Jiménez
- B-P5. Processing *Nannochloropsis gaditana* biomass for the production of high value additives R. Sales
- B-P6. Producción y evaluación de bioactivos anestésicos con la microalga ictiotóxica *Heterosigma akashiwo* J. J. Gallardo
- B-P7. Inoculantes microbianos para la biorrecuperación de balsas con alpechín abandonadas M. R. Martínez-Gallardo
- B-P8. Influence of nitrogen sources on the growth and bioactive molecules accumulation of marine dinoflagellate *Amphidinium carterae* A. Molina-Miras
- B-P9. Evaluación *in vitro* de la bioaccesibilidad de la proteína en la biomasa cruda y pre-tratada de la microalga *Nannochloropsis gaditana* J. M. Mora
- B-P10. Estandarización de las condiciones de expresión soluble y purificación de Xyn52B2 Y509E de *G. stearothermophilus* producida en un sistema de *E. coli*. G. Romero
- B-P11. Grado de conocimiento y aceptación de los OGMs por parte de los estudiantes de la Universidad de Almería. E. Salmerón-Sánchez
- B-P12. A novel photorespirometry method to characterize microalgae-bacteria consortia in wastewater treatment A. Sánchez-Zurano
- B-P13. Estudio del efecto fitotóxico en diferentes procesos de compostaje A. Siles-Castellano
- B-P14. Microcontaminant removal in secondary effluents of variable composition from different municipal wastewater treatment plants by solar photo-Fenton in raceway ponds reactors P. Soriano-Molina
- B-P15. Evaluación del estado de madurez de compost de alpeorajo en relación al grado de humificación, biodegradabilidad e índices de germinación. A. Toribio-Gallardo

### **Ciencias aplicadas y medioambientales**

CA-P1. Análisis de la red de investigación ambiental de la Universidad de Almería: estrategias para fomentar enfoques interdisciplinarios	M. C. Betancur-Arenas
CA-P2. Avances técnicos para la incorporación de imágenes del sensor remoto sentinel-2 al seguimiento del funcionamiento de ecosistemas en la red de parques nacionales de España.	M. Escudero
CA-P3. Amylolytic, cellulolytic and beta-glucosidase activity in different composting process	M. J. Estrella-González
CA-P4. Improvement of fatty acid profile of <i>Hermetia illucens</i>	D. Fabrikov
CA-P5. Actividad hemolítica y apoptosis en <i>K. veneficum</i>	L. López
CA-P6. Uso de vehículos aéreos no tripulados para la reconstrucción virtual del patrimonio cultural. Caso de estudio: Cortijo del Fraile (Níjar-Almería)	P. Martínez-Carricondo
CA-P7. Medida de la aceptación de la teoría de la evolución por parte de estudiantes de los Grados de Ciencias Ambientales, Biotecnología y Biología	F. Martínez-Hernández
CA-P8. Uso de series temporales de temperatura para evaluar la interacción agua subterránea-superficial en el río Andarax (Almería)	F. Navarro-Martínez
CA-P9. Identificación de la interacción aguas superficiales-subterráneas en el tramo medio del río Andarax (Almería)	F. Navarro-Martínez
CA-P10. Generating quantum circuits for solving algebraic equations using Grover's algorithm	F. Orts
CA-P11. Efecto del cambio global en los espartales del SE ibérico: importancia de la topografía en la disponibilidad de agua	B. Rodríguez-Lozano
CA-P12. Los insectos como alimento alternativo	M. Rodríguez
CA-P13. Evaluación del impacto de los sedimentos de alpechín de balsas de evaporación mediante análisis biológicos	J. Salinas

### **Matemáticas**

M-P1. A new approach on Lipschitz compact operators	M. G. Cabrera-Padilla
M-P2. Implementation of algorithms in MATLAB for the measurement of roots.	F. Ferrón-Carrillo
M-P3. The distribution function of a probability measure on a LOTS	J. F. Gálvez-Rodríguez
M-P4. Eigenvalues of a differential operator related to Gegenbauer-Sobolev orthogonal polynomials	J. F. Mañas-Mañas

**Química**

- Q-P1.  $^1\text{H}$  NMR-based metabolomics approach to evaluate the effect of light intensity and temperature on *Isochrysis galbana* L. M. Aguilera-Sáez
- Q-P2. dART: An algebraic reconstruction technique for diffusion NMR experiments. Can we solve polymer blends? F. M. Arrabal-Campos
- Q-P3. Aplicación de herramientas metabolómicas para la clasificación de roncs dorados mediante el uso de UHPLC-Orbitrap-MS J. R. Belmonte-Sánchez
- Q-P4. Application of LC-QTOF-MS and retrospective data analysis to opioids identification in water matrices M. C. Campos-Mañas
- Q-P5. Mesoporous MIL-100(Fe) nanoMOF derivatives as drug nanocarriers G. Cutrone
- Q-P6. Eliminación de rodamina B de disoluciones acuosas empleando bioadsorbentes basados en hidrogeles de alginato J. M. González-Gallego
- Q-P7. Nueva familia de polímeros de coordinación basados en diclofenaco con propiedades antileishmania A. García-García
- Q-P8. Removal of organic microcontaminants from urban wastewater using a microalgae-based photobioreactor E. García-Gómez
- Q-P9. Síntesis de dos nuevos compuestos de coordinación tridimensionales de zinc basados en ácido 1H-indazol-5-carboxílico y ligandos aromáticos nitrogenados con interesantes propiedades luminiscentes y de adsorción A. A. García-Valdivia
- Q-P10. Caracterización de la enzima inmovilizada histidín amonoliasa de *Geobacillus kaustophilus* A. Hernández-Zanoletty
- Q-P11. ¿Es posible encontrar micotoxinas en frutos secos? Determinación mediante UHPLC-QqQ-MS/MS J. L. Hidalgo-Ruiz
- Q-P12. Monitorización, mediante UHPLC-MS/MS, de piperacilina y tazobactam en soluciones salinas en bolsa doble empleadas para perfusión intravenosa M. López-García
- Q-P13. Stereoselective and concise synthesis of a natural dihydrofuranic labdane from *Platykladus orientalis* J. L. López-Martínez
- Q-P14. Catalytic isomerization of 2-cyclohexen-1-ol mediated by  $[\text{RuClCp}(\text{PTA})_2]$  and  $[\text{RuCp}(\text{PTA})_2(\text{H}_2\text{O}-\kappa\text{O})](\text{CF}_3\text{SO}_3)\cdot 3.5\text{H}_2\text{O}$  B. López
- Q-P15. Rapid and sensitive determination of antibiotics in urban wastewater effluents by direct injection LC-MS/MS A. Lorenzo
- Q-P16. New frontiers in click chemistry: phosphonic diamides as *ortho*-director groups for the synthesis of 5-triazenyl-1,2,3-triazoles Y. Navarro
- Q-P17. Nuevos imanes mononucleares multifuncionales con propiedades antidiabéticas y antiinflamatorias basados en cobalto A. Navas
- Q-P18. Plegamiento anómalo de proteínas quimera del dominio SH3: tirosinas quinasa c-Src y Fyn M. Plaza-Garrido
- Q-P19. Untargeted NMR-based methodology in the study of different varieties and ripening stages of melon (*Cucumis melo* L.) A. C. Abreu
- Q-P20. Base-catalyzed hydrosilylation of carbonyls mediated by a lithium-hydrazone complex A. Raya-Barón



Q-P21. Desarrollo de un método mediante cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas para la separación de calisteginas A3, A5, B1, B2, B3, B4 y C1 con columna HILIC-ácida	A. Romera-Torres
Q-P22. Inexpensive and scalable method for the synthesis of nanographene patterns on flexible substrates	F. J. Romero
Q-P23. Estudios preliminares para la preparación de formulaciones de liberación controlada de fármacos solubles en agua	L. Ruedas-Calvo
Q-P24. Síntesis de compuestos de coordinación multifuncionales con actividad biológica: propiedades luminiscentes, magnéticas y anticancerígenas	C. Ruiz
Q-P25. Identification and removal of contaminants of emerging concern in landfill leachate	A. Ruiz-Delgado
Q-P26. Gold nanospheres and nanotriangular prisms immobilized on polyacrylic acid polymer brushes with anthraquinone pendants	A. B. Ruiz-Muelle
Q-P27. Estructuras de quimeras de dominios SH3 en presencia de urea	M.C. Salinas-García
Q-P28. CpTi <sup>III</sup> Cl <sub>2</sub> : A new catalyst for the regioselective allylation of aldehydes	I. Torres-García
Q-P29. Cuál es el efecto ambiental de la degradación de los pesticidas en el agua	M. Vargas-Pérez
Q-P30. Synthesis and characterization of <i>cis</i> -[Ru(Dcbpy) <sub>2</sub> (PTA) <sub>2</sub> ]Cl <sub>2</sub> : Study of its optical properties and use as a Cd <sup>2+</sup> sensor	J. M. Veiga del Pino

### **Conferencias plenarias**

CP-1. Las vías de transferencia de los resultados de investigación: patentes, <i>spin off</i> e investigación colaborativa	F. Diánez
CP-2. Movilidad internacional de investigadores: Acciones Marie Skłodowska-Curie	J. A. Chaichio-Moreno
CP-3. Álgebra no conmutativa	D. Pedro A. Guil Asensio
CP-4. Elementos geomáticos para la valoración y seguimiento de la madurez ecológica en ecosistemas terrestres	G. del Barrio

## 8. Resúmenes



## DEGRADATION OF MICROPOLLUTANTS IN WWTP SECONDARY EFFLUENTS BY SOLAR PHOTO-FENTON PROCESS OPERATED IN CONTINUOUS MODE AT NEUTRAL pH IN RACEWAY POND REACTORS

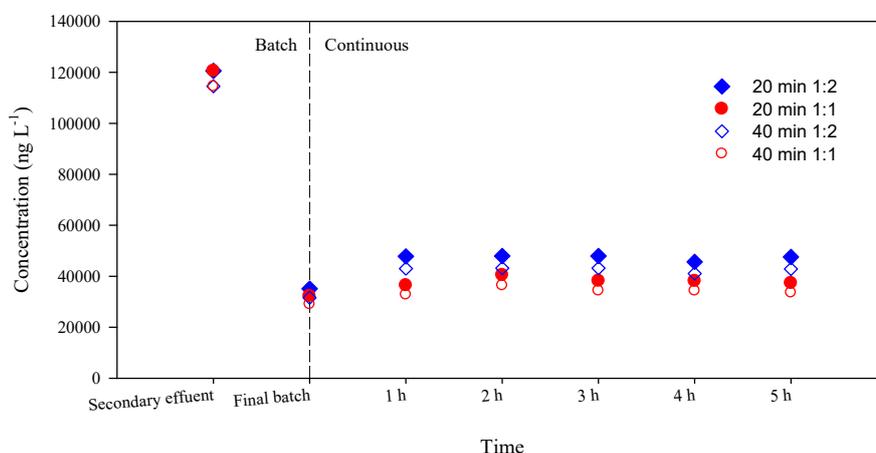
**S. Arzate<sup>1,2</sup>, M. C. Campos-Mañas<sup>1,2</sup>, A. Agüera<sup>2</sup>, J. A. Sánchez Pérez<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Department of Chemical Engineering, Faculty of Experimental Sciences, University of Almería, Ctra de Sacramento s/n, 04120 Almería, Spain,*

<sup>2</sup>*CIESOL, Joint Centre University of Almeria-CIEMAT, 04120 Almería, Spain.  
sandra.arzate@ual.es*

Treated wastewater reuse could mitigate the global water scarcity; however, it has been observed that current wastewater treatment plants ineffectively degrade anthropogenic pollutant present at low concentrations, thus, the implementation of effective tertiary treatments is necessary. Hence, Advanced Oxidation Processes (AOPs) and specifically the photo-Fenton process has been extensively studied for the degradation of recalcitrant organic contaminants in wastewater effluents. The photo-Fenton process consists in the catalytic decomposition of hydrogen peroxide in presence of iron species producing hydroxyl radicals (HO•) that oxidize organic matter.

In this work, the solar photo-Fenton process has been successfully used for micropollutant elimination in municipal secondary effluents. The experiments were carried out at neutral pH using EDDS and keeping the iron in solution. Two molar ratio of the Fe:EDDS complex, 1:1 and 1:2, and two hydraulic residence times, 20 and 40 min, were compared. The results show the feasibility of the operation at neutral pH, giving rise to a micropollutant degradation around 70% in the steady state, at HRT=20 min with 0.88 mM H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and 0.1:0.1 Fe<sup>3+</sup>:EDDS concentrations in the input stream (Fig. 1).



**Fig. 1** Micropollutant concentration. Red circles for 1:1 Fe<sup>3+</sup>:EDDS and blue rhombus for 1:2 Fe<sup>3+</sup>:EDDS. Filled for HRT=20 min and not filled for HRT=40 min.

In conclusion, the micropollutant degradation has a similar performance in all conditions tested in this work, showing a high micropollutant degradation during the operation in continuous mode of the photo-Fenton process at neutral pH using Fe:EDDS complex. This results proves the feasibility of this treatment and highlight the importance of continue the research line in order to couple this process with the secondary treatment in a wastewater treatments plant.

*Acknowledgements.* Sandra Arzate would like to acknowledge the Ministry of Economy and Competitiveness for her FPI scholarship, BES-2014-069722. M.C. Campos-Mañas is grateful for her pre-doctoral grant from University of Almeria.

## ANÁLISIS METAGENÓMICO DE LA COMUNIDAD BACTERIANA EN EL PROCESO DE COMPOSTAJE DE RESIDUOS HORTÍCOLAS

**A. Camelo-Castillo, M. J. López, F. Suárez-Estrella, M. M. Jurado,  
J. A. López-González, J. Moreno**

*Dpto. Biología y Geología, CITE II-B, Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, 04120, Almería; anjo134@ual.es*

La mayoría de investigaciones realizadas sobre el microbioma del compostaje, se han basado en técnicas cultivables y en el uso de materia prima y tecnología específica. Por ello, el principal objetivo de este estudio, fue analizar la microbiota bacteriana presente en diferentes etapas del proceso del compostaje de residuos hortícolas, mediante el uso de técnicas metagenómicas.

Con este fin, se recolectaron 54 muestras totales, provenientes de 3 plantas de residuos hortícolas de invernadero (RV1, RV2, RV3), ubicadas en la zona de Almería y alrededores. Las muestras fueron recolectadas en 6 etapas críticas del proceso, según la evolución de la temperatura: materia prima (MPR), mesofílica (MES), termofílica (TER), enfriamiento (ENF), maduración (MAD) y producto final (PRF). Tras la extracción del ADN, se amplificó la región V3-V4 del gen 16S rRNA y los amplicones generados fueron secuenciados mediante la plataforma MiSeq PE300 de Illumina. El análisis de los datos obtenidos, y diversidad fueron realizados usando el software Qiime 1.9.0 (Caporaso et al., 2010)<sup>1</sup> y R v3.4.4

Caracterizamos por primera vez mediante técnicas metagenómicas, la microbiota bacteriana presente en tres plantas de compostaje a gran escala, utilizando como materia prima residuos hortícolas. En términos generales, la mayor parte de especies bacterianas observadas, pertenecían a los phyla Firmicutes, Proteobacteria, Actinobacteria y Bacteroidetes y la diversidad bacteriana fue mayor en la mitad del proceso.

La mayor diversidad y riqueza bacteriana se observó en los muestreos RV1ENF y RV3MES. Esto pudo deberse a que durante la fase bio-oxidativa, donde se encuadran estas etapas del proceso, existe una mayor disponibilidad de nutrientes que favorecen el crecimiento activo de los microorganismos. Por su parte, la menor diversidad y riqueza se registró en los muestreos RV1MPR y RV2MPR, lo cual sugiere que, en el momento del muestreo, coincidente con la constitución de las pilas, el estado de la materia prima aún no ha alcanzado la temperatura, condiciones de aireación y humedad suficientes para promover la utilización de los nutrientes disponibles por otros grupos bacterianos diferentes a los presentes en los residuos hortícolas utilizados como materia prima inicial.

En conclusión, los resultados obtenidos demuestran que la diversidad, la riqueza y la composición bacteriana, se ven influenciadas por el tipo de materia prima inicial y por las condiciones propias de operación en cada una de las plantas de compostaje.

*Agradecimientos:* Este proyecto ha sido financiado por el Ministerio de Economía y Competitividad de España. Proyecto AGL2015-64512-R

<sup>1</sup> Caporaso, J. G., Kuczynski, J., Stombaugh, J., Bittinger, K., Bushman, F. D., Costello, E. K., et al. (2010). QIIME allows analysis of high-throughput community sequencing data. *Nat. Methods* 7, 335–336. doi:10.1038/nmeth.f.303.

## CARACTERIZACIÓN METAGENÓMICA FÚNGICA DURANTE EL PROCESO DE COMPOSTAJE DE RESIDUOS HORTÍCOLAS

**A. Camelo-Castillo, F. Suárez-Estrella, M. J. López, J. A. López-González, M. M. Jurado, J. Moreno**

*Dpto. Biología y Geología, CITE II-B, Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, 04120, Almería; anjo134@ual.es*

Durante años, los estudios enfocados a la caracterización del microbioma en procesos de compostaje, se han visto limitados al uso de técnicas cultivables. Es importante conocer la comunidad fúngica presente durante el compostaje, tanto para la mejora del proceso como tal, como para calidad del producto final obtenido. Es aquí donde los enfoques genómicos, son una gran ayuda en la búsqueda de la caracterización de la microbiota fúngica. Por este motivo, el objetivo de este estudio, fue determinar la microbiota fúngica presente en el proceso de compostaje de residuos hortícolas, utilizando aproximaciones metagenómicas en diferentes fases del proceso.

Para ello, fueron tomadas 54 muestras totales, que provenían de 3 plantas de residuos hortícolas de invernadero diferentes (RV1, RV2 y RV3), pertenecientes a la zona de Almería y alrededores. El muestreo fue realizado durante 6 etapas importantes del proceso; materia prima (MPR), mesofílica (MES), termofílica (TER), enfriamiento (ENF), maduración (MAD) y producto final (PRF) y por triplicado. Se extrajo el ADN de las muestras y se amplificó un fragmento de la región ITS2. Los amplicones fueron secuenciados por medio de la plataforma MiSeq PE300 de Illumina y los resultados obtenidos fueron analizados, mediante el uso del software Qiime (Caporaso et al., 2010)<sup>1</sup> y R v3.4.4.

Este estudio pionero, nos permite determinar y comparar la dinámica de la comunidad fúngica presente, en plantas de compostaje a gran escala. La mayor diversidad y riqueza se observó en los muestreos que coinciden con la fase bio-oxidativa del compostaje, donde la alta disponibilidad de nutrientes favorece el crecimiento de las distintas comunidades fúngicas. La menor diversidad se observó en los muestreos RV1PRF, RV2MPR y RV3MPR que se correlacionan, por un lado, con el agotamiento de los recursos disponibles para el metabolismo y crecimiento de los hongos ocurrido al finalizar el proceso, cuando el material empleado ya está estabilizado biológicamente, y por otro lado, con la etapa inicial del proceso, donde aún no se han alcanzado las condiciones suficientes para favorecer la utilización de los nutrientes disponibles por otros hongos distintos a los que se encuentran en los residuos hortícolas utilizados como materia prima inicial.

De forma global se observa como la diversidad y riqueza de los hongos se ve influenciada por las condiciones operacionales de cada una de las plantas de compostaje. Sin embargo, cabe resaltar que, aun tratándose de residuos hortícolas provenientes de distintas fuentes, la microbiota fúngica en la fase inicial del proceso es muy similar en las tres plantas estudiadas, observándose que las especies pertenecientes al género *Cladosporium* tenían una mayor abundancia relativa.

*Agradecimientos:* Este proyecto ha sido financiado por el Ministerio de Economía y Competitividad de España. Proyecto AGL2015-64512-R

<sup>1</sup> Caporaso, J. G., Kuczynski, J., Stombaugh, J., Bittinger, K., Bushman, F. D., Costello, E. K., et al. (2010). QIIME allows analysis of high-throughput community sequencing data. *Nat. Methods* 7, 335–336. doi:10.1038/nmeth.f.303.

## WWTP SECONDARY EFFLUENTS DISINFECTION BY SOLAR PHOTO-FENTON PROCESS IN CONTINUOUS MODE AT NEUTRAL pH

**I. De la Obra-Jiménez<sup>1,2</sup>, B. Esteban-García<sup>1,2</sup>, G. Rivas-Ibáñez<sup>1,2</sup>,  
J.L Casas-López<sup>1,2</sup>, J. A. Sánchez-Pérez<sup>1,2</sup>**

(1)Department of Chemical Engineering, Faculty of Experimental Sciences, University of Almería, Ctra de Sacramento s/n, 04120 Almería, Spain, (2) CIESOL, Joint Centre University of Almería-CIEMAT, 04120 Almería, Spain. Irene.delaobra@ual.es

The feasibility of low cost reactors such as raceway pond reactors (RPRs) for micropollutant removal as well as pathogen inactivation has recently been reported. This study presents, for the first time, the inactivation of Total Coliforms, *Escherichia coli* and *Enterococcus* sp. in WWTP secondary effluents by the solar photo-Fenton process in continuous flow at neutral pH in open reactors. Firstly, indoor assays were carried out with three hydraulic residence times (HRTs), 15, 30 and 60 min under simulated radiation of  $30 \text{ W m}^{-2}$ , 5 cm liquid depth,  $20 \text{ mg Fe L}^{-1}$  and  $50 \text{ mg H}_2\text{O}_2 \text{ L}^{-1}$ . At 60 and 30 min of HRT, total wastewater disinfection was achieved at steady state for the three microbial groups selected. Nevertheless, at 15 min of HRT only 1-log inactivation was obtained. Taking into account the results obtained at laboratory scale, the best HRTs (60 and 30 min) were tested outdoors in 5 cm-deep RPRs in both summer and winter. The start-up began with a batch operation for 120 min with  $20 \text{ mg Fe L}^{-1}$  and  $50 \text{ mg H}_2\text{O}_2 \text{ L}^{-1}$ , followed by continuous operation over three consecutive days with  $20 \text{ mg Fe L}^{-1}$  and  $30 \text{ mg H}_2\text{O}_2 \text{ L}^{-1}$  to avoid large excess of hydrogen peroxide in steady state. Bacterial inactivation results showed 30 min of HRT to be the most efficient operation condition capable of producing  $305 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{year}^{-1}$  of disinfected water while complying with the Spanish Law (RD 1620/2007) for water reuse. Additionally, a reduction in iron supply ranging from 10 to  $2.5 \text{ mg L}^{-1}$  in continuous mode with  $30 \text{ mg H}_2\text{O}_2 \text{ L}^{-1}$  was evaluated. Efficient microorganism inactivation was reached for 10 and  $5 \text{ mg Fe L}^{-1}$ , thus reducing the iron consumption at steady state four-fold. This research opens up a new line of research on the optimization of wastewater disinfection by large-scale solar photo-Fenton.

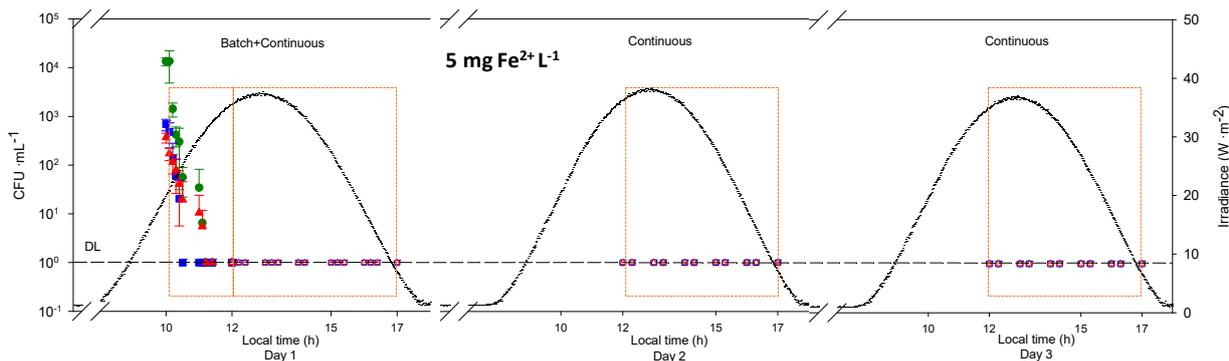


Figure. 1. Inactivation of Total Coliforms (●) *E. coli* (●) and *Enterococcus* sp. (●) by solar photo-Fenton at neutral pH in RPR in summer with the best operational condition

**Acknowledgements.** This research was supported by the Ministry of Economy and Competitiveness (Government of Spain) project CTQ2016-78255-R, the Andalusian Regional Government (P12-RNM-1437) and the European Regional Development Fund (ERDF). I. de la Obra would like to acknowledge the Andalusian Regional Government for her grant

## PROCESSING *Nannochloropsis gaditana* BIOMASS FOR THE PRODUCTION OF HIGH VALUE ADDITIVES

**R. Sales<sup>1</sup>, M. C. Cerón-García<sup>2</sup>, E. Navarro-López<sup>2</sup>, F. J. Alarcón-López<sup>3</sup>,  
F. G. Ación-Fernández<sup>2</sup>, E. Molina-Grima<sup>2</sup>**

*1 Departamento de Acuicultura, UFSC – Brasil (rafael\_ojs@hotmail.com)*

*2 Department of Chemical Engineering, University of Almería, 04120, Almería, Spain*

*3 Department of Biology and Geology, University of Almería, 04120, Almería, Spain*

Different procedures previously developed in the research group are being applied to obtain the following products from the *Nannochloropsis gaditana* biomass: i) the whole lipid fraction (fatty acid and carotenoids), ii) a concentrate of the unsaponifiable lipid fraction (carotenoids), and iii) a concentrate of the saponifiable lipid fraction (fatty acids). A product containing both the carotenoids and the fatty acids is of great interest owing to that additional antioxidant properties (especially due to the presence of the carotenoid esters) can be added to the whole lipid fraction obtained from *Nannochloropsis* biomass. Following a procedure, a unique-end product will be obtained from the microalgae biomass, which is composed by the whole lipid fraction. It was evaluated whether this process, in which a three-component monophasic mixture (water:ethanol:hexane, 6:77:17) was also valid to obtain a high extraction yield of fatty acids. A process for obtaining a concentrate of the unsaponifiable fraction of lipids (carotenoids), and a concentrate of the saponifiable fraction (fatty acids) was also applied for obtaining two more additional products of interest. This way, two modified methods were applied for obtaining these two high-value products<sup>1</sup>. To scale up the process, some modifications were performed to substitute ethanol for propanol and eliminate an intermediate step of drying the solvents for the extraction of fatty acids. To do so, the yields of carotenoids and fatty acids were estimated from different solvent proportions (9:74:17, 10:73:17, 12:71:17). In sum, high yields were obtained in all treatments. After the saponification, the three-component proportion was changed for 10:40:50 forming two phases and the extracts were separated using a sedimentation funnel. The fatty acids were later extracted adding hexane to the hidro-alcoholic solution after the solution's pH was adjusted eliminating the need of evaporating the solvents. The different high-values additives obtained from the microalgae biomass will be evaluated as feed additives.

**Table 1.** Carotenoid and fatty acid yields from the microalgae *Nannochloropsis gaditana* biomass from different proportions of the three-component solution correlated to the control values from extracts using the three-component with ethanol. \* Control values - carotenoid 1.67 % d.w., fatty acid 12.54 % d.w.

THREE-COMPONENT (WATER:PROPANOL:HEXANE)	CAROTENOID YELD	FATTY ACID YELD
9:74:17	113%	96%
10:73:17	136%	111%
12:71:17	119%	115%

*Acknowledgements.* This research was supported by the European Union's Horizon 2020 Research and Innovation program under the Grant Agreement No. 727874 SABANA. Rafael Sales was granted a sandwich PhD. scholarship from CAPES – Brazil.

<sup>1</sup> Book chapter: Preparative Recovery of Carotenoids from Microalgal Biomass. Authors: María del Carmen Cerón García, Cynthia Victoria González López, José María Fernández Sevilla, Emilio Molina Grima. Title: Microbial Carotenoids. Editors: Carlos Barreiro and José-Luis Barredo. Editorial Methods Molecular Biology, Vol 1852. Springer Natur. ISBN: 978-4949-8741-2, 429778\_1 In, (6). Publication date: 2018.



## PRODUCCIÓN Y EVALUACIÓN DE BIOACTIVOS ANESTÉSICOS CON LA MICROALGA ICTIOTÓXICA *HETEROSIGMA AKASHIWO*

**J. J. Gallardo<sup>1</sup>, A. Sánchez, F. García, V. Avello<sup>2</sup>, A. Rivera<sup>2</sup>, A. Astuya<sup>2</sup>,  
A. Llanos<sup>2</sup>**

*1 Departamento de Ingeniería Química, Escuela Superior de Ingeniería,  
Universidad de Almería,*

*E04120 Almería (España); jgr285@ual.es*

*2 Departamento de Oceanografía y COPAS Sur-Austral, Facultad de Ciencias Naturales y  
Oceanografía, Universidad de Concepción,  
Concepción (Chile)*

Las microalgas marinas tóxicas son una fuente extraordinaria de bioactivos de alto valor. Hasta el momento se han llevado a cabo programas de investigación toxicológica, medioambiental y química sobre muchas biomoléculas. Además, se han encontrado interesantes bioactividades, aunque en la mayoría de los casos estos hallazgos no conllevaban medicamentos autorizados. Los problemas principales son la baja biomasa y el rendimiento bioactivo, la falta de conocimiento sobre los desencadenantes de la síntesis bioactiva y la fragilidad celular. De hecho, dada la fragilidad celular de estos microorganismos, su cultivo masivo requiere el uso de biorreactores con configuraciones específicas y modos de operación que eliminen o reduzcan el daño celular debido a una excesiva turbulencia. En este trabajo, presentamos un estudio de la producción de anestésicos y bioactivos tóxicos de *Heterosigma akashiwo* durante diferentes fases de crecimiento en biorreactores de bajo nivel de estrés fluidodinámico. Se realizaron cultivos en frascos estáticos de control y en el biorreactor hasta un volumen de 12L. la bioactividad se evaluó *in vitro* (bioensayo de células neuro-2A) e *in vivo* (modelo de pez cebra). La bioactividad dependió de la fase de crecimiento en los cultivos estáticos. En estos cultivos, la toxicidad de las células aumentó ligeramente con el tiempo de cultivo mientras que se observó un efecto paralizante tipo saxitoxina (STX) desde la fase exponencial. Por otro lado, los cultivos agitados produjeron biomasa de características similares en las diferentes fases de crecimiento. El extracto del biorreactor (extracto metanólico total; 50 mg/L) mostró citotoxicidad baja y efecto tipo STX. En peces cebra, en 24 h no se observó mortalidad. Aunque se observó embriotoxicidad en concentraciones del orden de los producidos por anestésicos veterinarios comerciales. La causa más probable es que el estrés hidrodinámico del biorreactor termine con las células estacionarias. Nuestra hipótesis a partir de lo observado es que las células de *H. akashiwo* acumulan principalmente toxinas al final del cultivo cuando los nutrientes son escasos mientras que los bioactivos anestésicos son producidos constantemente por la cepa estudiada.

*Agradecimientos.* Esta investigación fue financiada por CONICYT, Chile (FONDECYT 2017, Ref. 1170515). También agradecemos la financiación de la Universidad de Concepción a través del proyecto de investigación VRID 216.096.067-1.0 IN, la plataforma INN BIO y el programa COPAS Sur Austral (PFB-31/2007).

## INOCULANTES MICROBIANOS PARA LA BIORRECUPERACIÓN DE BALAS CON ALPECHÍN ABANDONADAS

**M. R. Martínez-Gallardo, M. J. López, J. López-González, M. M Jurado, F. Suárez-Estrella, J, Moreno**

*Área de Microbiología, Dpto. Biología y Geología, CITE II-B, Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, 04120, Almería, España*

La gestión inadecuada del alpechín, residuo líquido de la agroindustria de extracción del aceite de oliva, provoca la contaminación de suelos por sus efectos fitotóxicos y antimicrobianos. <sup>1</sup> Esta toxicidad se debe, principalmente, a la elevada cantidad de compuestos polifenólicos<sup>2</sup> que contiene.

El objetivo de este trabajo fue la búsqueda selectiva de microorganismos degradadores de polifenoles que pudiesen emplearse en estrategias de bioaumentación para asegurar la descontaminación de suelos contaminados con alpechín.

Para ello, se tomaron muestras de los sedimentos de las balsas y se aislaron diversos hongos y bacterias mediante técnicas de enriquecimiento y siembra en medios selectivos, constituidos por compuestos fenólicos o alpechín. Para determinar la expresión de actividades enzimáticas relacionadas con la degradación de polifenoles, cada microorganismo aislado fue sometido a pruebas cualitativas, así como a la cuantificación de su capacidad degradativa del tirosol, polifenol presente en el alpechín. Por último, las cepas seleccionadas fueron identificadas mediante técnicas moleculares y se produjeron a gran escala para su aplicación en unas balsas abandonadas de alpechín.

Se obtuvo una colección de 60 cepas. Los hongos protagonizaron una degradación mayor del tirosol que las bacterias, 12 hongos y 2 bacterias eliminaron más del 50 % del polifenol. Se seleccionaron dos hongos, entre ellos, identificados como *Scedosporium apiospermum* H2 y *Aspergillus ochraceus* H16, que presentaron numerosas actividades enzimáticas y eliminaron más de un 97 % de tirosol. Estos hongos presentan unas características idóneas para su aplicación conjunta en campo en estrategias de biorremediación in situ.

Este trabajo ha sido financiado a través del proyecto LIFE+REGROW (LIFE16 ENV/ES/000331) "Reclamation of olive oil waste abandoned lagoons using bio-recovering strategies in a circular economy".

<sup>1</sup> Dermeche S., Nadour M., Larroche C., Moulti-Mati F., Michaud P., 2013. Olive mill wastes: biochemical characterizations and valorization strategies. *Process Biochem.* 48(10), 1532-1552.

<sup>2</sup> Hachicha S., Cegarra J., Sellami F., Hachicha R., Drira N., Medhioub K., Ammar E., 2009. Elimination of polyphenols toxicity from olive mill wastewater sludge by its co-composting with sesame bark. *J Hazard Mater.* 161(2-3), 1131-1139.

## INFLUENCE OF NITROGEN SOURCES ON THE GROWTH AND BIOACTIVES MOLECULES ACCUMULATION OF MARINE DINOFLAGELLATE *Amphidinium carterae*

**A. Molina-Miras<sup>1</sup>, L. López-Rosales<sup>1</sup>, A. Olivera-Gálvez<sup>2</sup>, M. C. Cerón-García<sup>1</sup>,  
A. Sánchez-Mirón<sup>1</sup>, F. García-Camacho<sup>1</sup> and E. Molina-Grima<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Chemical Engineering Area, University of Almería, (Spain); amm657@ual.es.

<sup>2</sup> Department of Fisheries and Aquaculture. Federal Rural University of Pernambuco, (Brazil).

Dinoflagellate belonging to the genus *Amphidinium* are a key source of amphidinolides and amphidinols (APDNs), an interesting group of polyketide metabolites, that are hemolytic and antiproliferative activity. These metabolites are potential drugs for the treatment of cancer.

In this work, the influence of inorganic nitrogen sources; sodium nitrate as control (CTRL) and ammonium chloride (AMON), and organic nitrogen source; urea (UREN) on the growth and APDNs production of *A. carterae* was studied. The microalgae was cultured in bubble column photobioreactors (BC-PBRs) in different modes of operation (batch and semicontinuous). The configuration of the BC-PBRs complied with the earlier published criterions<sup>1,2,3</sup>, to culture hydrodynamically-sensitive microalgae. The volume culture of each BC-PBRs was 10 L, illuminated with a light pattern L/D 12:12 emitting an average irradiance impinging on the culture ( $I_o$ ), value of  $600 \mu\text{E m}^{-2}\text{s}^{-1}$  at the BC-PBRs. Temperature was maintained at  $21\pm 1^\circ\text{C}$ , and the pH controlled at a value of 8.5 by automatically injecting carbon dioxide, as needed. Three medium were prepared, was based on a modification of f/2 Guillard, according to recent study was the best for the growth of *A. carterae* with a formulation of f/2 x 3<sup>4</sup>, and having the medium (N:P)<sub>o</sub>=5 ratio. It was used different nitrogen sources (CTRL, AMON and UREN) with same concentration and the rest of compounds formulated in the modification medium was maintained.

*A. carterae* was able to assimilate the three sources of nitrogen. However, the culture with ammonium chloride (AMON) has not been sustainable in time, the culture with urea and sodium nitrate was a better and robust for use with *A. carterae*. The biomass productivities ( $P_b$ ) expressed in a basis of cells increased from set to set to a maximum value of  $32.44 \times 10^4 \text{ cell}\cdot\text{mL}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$  for urea (UREN), this represents an improvement nearly 1.5-fold with the control (CTRL). The hemolytic activity expressed as average equivalent saponin potency (ESP) of the cell extracts, was used as a proxy for the APDNs levels in cells. The maximum value of  $845 \text{ pg}\cdot\text{cell}^{-1}$  was in urea (UREN), a 25-30% higher than for nitrate (CTRL). These results conclude that urea is presented as an alternative nitrogen source for culture of *A. carterae* and stimulate the biosynthesis of metabolites such as APDNs.

*Acknowledgments.* This research was funded by the Spanish Ministry of Economy and Competitiveness (Project CTQ2014-55888-C3-02), and the European Regional Development Fund Program.

---

<sup>1</sup> López-Rosales et al. "An optimisation approach for culturing shear-sensitive dinoflagellate microalgae in bench-scale bubble column photobioreactors". *Bioresource Technology*. Volume 197, pages 375-382. (2015).

<sup>2</sup> López-Rosales et al. "Pilot-scale outdoor photobioreactor culture of the marine dinoflagellate *Karlodinium veneficum*: Production of a karlotoxins-rich extract". *Bioresource Technology*. Volume 253, pages 94-104. (2018).

<sup>3</sup> Molina-Miras et al. "A pilot-scale bioprocess to produce amphidinols from the marine microalga *Amphidinium carterae*: Isolation of a novel analogue". *Algal Research*. Volume 31, pages 87-98. (2018a).

<sup>4</sup> Molina-Miras et al. "Long-term culture of the marine dinoflagellate microalga *Amphidinium carterae* in an indoor LED-lighted raceway photobioreactor: Production of carotenoids and fatty acids". *Bioresource Technology*. Volume 265, pages 257-267. (2018b).

## EVALUACIÓN *IN VITRO* DE LA BIOACCESIBILIDAD DE LA PROTEÍNA EN LA BIOMASA CRUDA Y PRE-TRATADA DE LA MICROALGA *Nannochloropsis gaditana*

**J. M. Mora, A. J. Vizcaíno, M. I. Sáez, A. Galafat, T. F. Martínez y F. J. Alarcón**

*Departamento de Biología y Geología. Universidad de Almería, 04120, Almería.  
E- mail: josemmoraro@gmail.com*

Durante los últimos años, las microalgas han atraído la atención como un recurso proteico sostenible y, por tanto, plenamente aceptable para su uso en alimentación acuícola. Sin embargo, el hecho de que algunas especies posean unas paredes celulares recalcitrantes ricas en celulosa y otros componentes, es un factor que puede limitar su digestibilidad. El presente trabajo se centra en evaluar la efectividad de diferentes tratamientos sobre la rotura de la pared celular de la microalga *Nannochloropsis gaditana* mediante diferentes ensayos incluyendo: i) tratamientos mecánicos, mediante la aplicación de ultrasonidos a dos niveles de potencia diferentes (50W y 100W); ii) tratamientos enzimáticos utilizando una celulasa comercial a diferentes ratios enzima/sustrato ([E]/[S]) y iii) combinación de los dos anteriores. Para comprender la eficacia de los procesos de lisis de la pared celular se realizó un seguimiento del proceso de rotura mediante la cuantificación de los azúcares reductores liberados<sup>1</sup>. Adicionalmente se evaluó la digestibilidad de la biomasa cruda y pre-tratada de *N. gaditana* en presencia de extractos enzimáticos de dorada (*S. aurata*) mediante simulación *in vitro* siguiendo la metodología descrita por Alarcón *et al*<sup>2</sup>. Durante el transcurso de la hidrólisis se tomaron muestras para evaluar el grado de hidrólisis expresado como Coeficiente de Degradación Proteica (CDP), y para cuantificar los aminoácidos liberados<sup>3</sup>.

La cuantificación de equivalentes de glucosa durante los procesos de rotura de la pared celular reveló la eficacia del pre-tratamiento enzimático observándose un aumento significativo en la concentración de glucosa al aumentar la relación enzima/sustrato, alcanzándose valores superiores a 13g de equivalentes de glucosa libre por cada 100g de microalga. Por su parte, el pre-tratamiento con ultrasonidos no resultó eficaz a la hora de romper la pared celular de *N. gaditana*, obteniéndose valores inferiores a 1g de equivalentes de glucosa libre por cada 100g de biomasa de microalga. Respecto al ensayo de simulación *in vitro* con proteasas digestivas de dorada, se observaron cambios importantes en el grado de degradación de las proteínas en función de si la microalga había sido o no previamente pre-tratada. Los valores de CDP obtenidos para la biomasa pre-tratada fueron muy superiores a los obtenidos en la biomasa cruda, alcanzándose niveles de degradación proteica superiores al 80%. Del mismo modo, la cuantificación de los aminoácidos liberados al final de los procesos de hidrólisis reveló un notable incremento de éstos cuando la biomasa algal fue pre-tratada. Al finalizar el ensayo *in vitro*, la concentración final de aminoácidos libres en la biomasa pre-tratada fue superior a 40g de aminoácidos libres por cada 100g de proteína, siendo significativamente más alta a la obtenida con la biomasa cruda (30,5g de aminoácidos libres por cada 100g de proteína). En general, la aplicación de un pre-tratamiento enzimático con celulasa representa una herramienta útil para debilitar la pared celular de las microalgas y facilitar la acción de las proteasas digestivas de los peces, aumentando la biodisponibilidad de los nutrientes.

*Agradecimientos.* Investigación financiada por el proyecto europeo SABANA (grant # 727874).

<sup>1</sup>Miller, G. L. (1959). *Analytical Chemistry*, 31(3), 426-428.

<sup>2</sup>Alarcón, F. J., Moyano, F. J., & Díaz, M. (2001). *Aquaculture International*, 9(3), 255-267.

<sup>3</sup>Church, F. C., Swaisgood, H. E., Porter, D. H., y Catignani, G. L. (1983). *Journal of Dairy Science*, 66(6), 1219-1227

## ESTANDARIZACIÓN DE LAS CONDICIONES DE EXPRESIÓN SOLUBLE Y PURIFICACIÓN DE Xyn52B2 Y509E DE *G. stearothermophilus* PRODUCIDA EN UN SISTEMA DE *E. coli*.

**G. Romero<sup>1</sup>, J. M. Clemente-Jiménez<sup>2</sup>, F. J. Las Heras-Vázquez<sup>2</sup> y L. M. Contreras<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Centro de Investigación de Ambiente, Biología y Química (Ambioquim), Facultad Experimental de Ciencias y tecnología, Universidad de Carabobo,*

*2005 Valencia (Venezuela); gaby32004@gmail.com*

<sup>2</sup>*Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain); jmclemen@ual.es*

Las beta-xilosidasas son enzimas que degradan xilo-oligómeros provenientes de la ruptura del biopolímero xilano, liberando unidades de xilosa que pueden ser posteriormente utilizadas en fermentación para obtener productos de alto valor agregado. Existe, por tanto, un gran interés en el estudio de nuevas beta-xilosidasas y que éstas sean más robustas en el tratamiento de la biomasa lignocelulósica. Para hidrolizar eficazmente al xilano y acumular altos niveles de monosacáridos, en el proceso de hidrólisis enzimática de las lignocelulosas, la  $\beta$ -xilosidasa debe ser activa frente a glucosa y xilosa. Por lo tanto, obtener y producir una  $\beta$ -xilosidasa con alta tolerancia a la xilosa y alta actividad catalítica es un aspecto muy importante. Desde 2008 nuestro grupo trabaja con una de las beta-xilosidasas de *G. stearothermophilus*, más específicamente con el miembro representativo de la familia GH52 (Xyn52B2). Xyn52B2 ha sido producida de forma recombinante, siendo su actividad muy bien caracterizada bajo distintas condiciones. Recientemente se ha encontrado que mutaciones puntuales en Xyn52B2 han dado lugar a enzimas bifuncionales con actividad tanto  $\beta$ -xilosidasa como xilanasa<sup>1</sup>. En ese sentido el objetivo principal de este trabajo ha sido generar el mutante Y509E de Xyn52B2 y estandarizar las condiciones de sobre-expresión (concentración del inductor, temperatura óptima y tiempo de inducción). La cepa C43 mostró mayor eficacia para sobre-expresar Xyn52B2 Y509E, en comparación con BL21 (DE3). La temperatura óptima de expresión fue 37°C. En cuanto a la concentración del inductor, aunque se observa que la proteína se expresa sin el uso de IPTG, a las 6 horas del ensayo con IPTG se observa una discreta banda de expresión de la enzima lo que podría indicar que la concentración de 0,1 mM de IPTG es recomendable para alcanzar la máxima expresión en 18 horas. En referencia a la purificación, la electroforesis muestra que el uso de la resina de cobalto fue suficiente para la purificación de la proteína. Al igual que la enzima nativa, Xyn52B2 Y509E mostró máxima actividad a pH 6,5 y a 65°C para la actividad beta-xilosidasa. Se comprobó la actividad xilanasa a pH 6, la cual no se presenta en la enzima nativa, lo que reviste a este mutante de un interés especial para la industria comprobado su carácter dual.

*Agradecimiento.* Plan Propio de Investigación y Transferencia 2018. Ayuda PRF2018/004

<sup>1</sup> Z. Huang, X., Liu, S. Zhang, Z. Liu Z. J. Ind. Microbiol. Biotechnol. **2013**, *41*, 65-74.

## GRADO DE CONOCIMIENTO Y ACEPTACIÓN DE LOS OGMs POR PARTE DE LOS ESTUDIANTES DE LA UNIVERSIDAD DE ALMERÍA

**E. Salmerón-Sánchez, R. M. Parra-Rubio, S. Ortiz-Úbeda, A. Martínez-García y F. Martínez-Hernández**

*Department of Biology and Geology, Faculty of Experimental Sciences,  
Universidad de Almería,  
E04120 Almería (Spain); esanchez@ual.es*

Los organismos genéticamente modificados (OGMs) son organismos cuyo material genético ha sido alterado mediante el uso de técnicas de ingeniería genética. La percepción pública de estos organismos está jugando un papel fundamental en el desarrollo de la biotecnología relacionada con la agricultura, los alimentos y la medicina, ya que la aceptación pública de estas nuevas tecnologías tiene enormes implicaciones económicas y sociales. Partiendo de esta premisa, el objetivo principal de esta investigación es evaluar el grado de conocimiento y la percepción que los estudiantes de la UAL tienen sobre los OGMs. Como herramienta para llevar a cabo esta investigación nos hemos servido de un cuestionario con 32 preguntas, inspirado en documentos previos<sup>1,2</sup>, con el que se trató de recoger la percepción y opinión de los encuestados sobre los OGMs. En total, fueron encuestados más de 200 alumnos de los diferentes grados que se imparten en la UAL. Las titulaciones objeto de estudio fueron los grados en Biotecnología (BT), Matemáticas, Química, Enfermería, Psicología, Filología Hispánica (FH), Estudios Ingleses (EI), Derecho, Administración y Dirección de Empresas (ADE), Turismo, Relaciones Laborales y Recursos Humanos (RLRH), Psicología, Educación Primaria (EP), Educación Social (ES), Fisioterapia, Marketing, Trabajo Social (TS), Ingeniería Agrícola (IA), Ciencias Ambientales (CA) e Ingeniería Informática (II).

Atendiendo a los resultados, la mayoría de los estudiantes habían oído hablar previamente a esta encuesta sobre OGMs (alrededor del 80%). Este porcentaje fue incluso mayor en los grados cuyas áreas de conocimiento principales están relacionadas con el uso de esta tecnología. Al ser preguntados por la relación entre los OGMs y las enfermedades, los estudiantes del ámbito de las ciencias experimentales se decantaron por negar dicha idea, mientras que la opinión generalizada de los estudiantes del ámbito de letras tendió a corroborar esta percepción. Además, se encontraron diferencias entre los estudiantes de ciencias y letras con respecto a la fiabilidad que les sugiere la prohibición del consumo de OGMs en muchos países europeos; los primeros reparan menos en este hecho que los estudiantes de letras, quienes admiten sentirse más influenciados por esta medida. La opinión de los estudiantes de la UAL a favor de que la UE favorezca el desarrollo de OGMs es muy superior al de la media española según el último Eurobarómetro<sup>1</sup> (61% vs 49%) e incluso se sitúa ligeramente por encima de la media europea (60%). Si analizamos el resto de preguntas que se plantean en la encuesta, los estudiantes de ciencias suelen demostrar mejores competencias, probablemente como consecuencia de los conocimientos que les brindan sus estudios, a la hora de afrontar preguntas relacionadas con los OGMs.

Por último, el hecho de que un alto porcentaje de estudiantes del área de educación esté en contra de los OGMs, sin que esta opinión esté claramente apoyada en un conocimiento preciso de la materia, sugiere llevar a cabo un mayor esfuerzo en favorecer sus competencias científicas sobre las nuevas tecnologías. En todo caso parece tan urgente como necesario promover en la sociedad un debate abierto y con fundamentos científicos sobre este tema, ya que son muchos los aspectos sobre los OGMs que son poco conocidos incluso en el ámbito universitario.

<sup>1</sup> European Commission, *Special Eurobarometer 340, Science and Technology Report*, Brussels (BE), 2010.

<sup>2</sup> Para la Ciencia, F.E., *VIII Encuesta de Percepción Social de la Ciencia y la Tecnología*. FECYT, Madrid (ES), 2016.

## A NOVEL PHOTORESPIROMETRY METHOD TO CHARACTERIZE MICROALGAE-BACTERIA CONSORTIA IN WASTEWATER TREATMENT

**A. Sánchez-Zurano, C. Gómez-Serrano, F. G. Acién-Fernández,  
J. M. Fernández-Sevilla, E. Molina-Grima**

*Department of Chemical Engineering,  
Universidad de Almería,  
04120 Almería, Spain; asz563@ual.es*

During the latest years, large interest focused into the development of technologies for wastewater treatment using microalgae/bacteria consortia. The utilization of microalgae on wastewater treatment schemes allows to increase the sustainability of the process, in addition to reduce the treatment cost and allowing the recycle of valuable elements (C, N, P). The performance of microalgae/bacteria consortium is largely a function of operational conditions thus it determining both the accomplishment of nutrients removal requirements and the quality/composition of produced biomass<sup>1</sup>. To adequately manage and operate wastewater treatment processes using microalgae/bacteria consortia it is necessary to have fast and accurate methods to evaluate the performance of such biological systems<sup>2</sup>.

On this work a photorespirometry method to study the behavior of microalgae/bacteria consortiums has been developed and validated. This method allows to quantify the contribution of each one of the three major microorganism types: microalgae, heterotrophic bacteria and nitrifying bacteria. The method has been applied to microalgae/bacteria consortia established in different wastewater treatment systems (reactors, water type, operation conditions). Data confirm that microalgae are the main microorganism contributing to the behavior of the system, heterotrophic bacteria maintaining a quite stable contribution whatever the operational conditions, whereas the contribution of nitrifying bacteria largely depend of the nitrogen load and microalgae performance. This method is a powerful tool to improve the performance of microalgae based wastewater treatment processes.

Keywords:

Wastewater, microalgae/bacteria consortium, heterotrophic bacteria, nitrifying bacteria.

---

<sup>1</sup>Acién, F. G., Gómez-Serrano, C., Morales-Amaral, M. M., Fernández-Sevilla, J. M., & Molina-Grima, E. (2016). Wastewater treatment using microalgae: how realistic a contribution might it be to significant urban wastewater treatment? *Applied Microbiology and Biotechnology*, 100(21), 9013-9022. <https://doi.org/10.1007/s00253-016-7835-7>.

<sup>2</sup>P.A. Vanrolleghem, H. Spanjers, A hybrid respirometric method for more reliable assessment of activated sludge model parameter, *Water Science and Technology* 37 (1998) 237-24.

## ESTUDIO DEL EFECTO FITOTOXICO EN DIFERENTES PROCESOS DE COMPOSTAJE

**A. Siles-Castellano, M. J. López, F. Suárez-Estrella, M. M. Jurado, J. López-González, J. Moreno**

*Área de Microbiología, Dpto. Biología y Geología, CITE II-B, Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, 04120, Almería, España. asc426@ual.es*

El compostaje es un proceso de biotransformación de la materia orgánica residual que se caracteriza por ser dinámico, biológico, aerobio y termófilo, obteniéndose un producto final que puede ser utilizado ya sea como acondicionador de suelos, o bien, como componente base para la elaboración de sustratos especializados de uso agrícola. Sin embargo, el emplearlos sin un adecuado grado de madurez puede provocar efectos negativos en las plantas, debido a la presencia de metabolitos intermediarios fitotóxicos<sup>1</sup>. Los efectos negativos del compost están relacionados con la estabilidad de éste, es decir, un compost inmaduro puede afectar al crecimiento y provocar daños en las plantas, lo que se atribuye a la presencia de sustancias tóxicas por la biodegradación insuficiente de la materia orgánica. Bajo condiciones favorables, la germinación de las semillas es el primer paso en el desarrollo de una planta, y cualquier efecto adverso tendría un impacto directo sobre la supervivencia de ésta. Por ello, surge la necesidad de evaluar, mediante bioensayos de germinación, los posibles efectos fitotóxicos del compost<sup>2</sup>. Con la finalidad de reducir el problema de la fitotoxicidad se han desarrollado numerosas investigaciones. Para determinar la madurez del compost se utilizan test de germinación de semillas<sup>3</sup>, en los cuales el índice de germinación (IG) se calcula en función de la longitud de la radícula y el porcentaje de germinación de semillas, tras la aplicación de extractos de compost en variedades de semillas indicadoras, como el berro, el rábano o la lechuga.

El objetivo principal de este trabajo fue realizar un estudio comparativo del posible efecto fitotóxico de distintos compost en función de las materias primas y de los tiempos de muestreo, realizando medidas de los índices de germinación en semillas de berro. Para ello se realizó el análisis comparativo de 15 procesos de compostaje industriales que emplean diferentes materias primas de partida, residuos vegetales, lodos de depuradora, residuos sólidos urbanos, residuos agroalimentarios y alpeorajo. Como resultado del estudio se obtuvo que las pilas elaboradas a partir de residuos vegetales o de residuos sólidos urbanos presentaron un alto grado de fitotoxicidad (IG<30%), mientras que las preparadas a partir de residuos agroalimentarios, lodos de depuradora y alpeorajo mostraron índices de germinación superiores al 70%, y por tanto sin fitotoxicidad, especialmente en el caso de las pilas de residuos agroalimentarios.

<sup>1</sup> Zucconi, F., Monaco, A., Forte, M. (1985). Phytotoxins during the stabilization of organic matter. En: Gasser, J.K.R., (Ed.). Composting of Agricultural and other Wastes. Elsevier Appl. Sci. Publ., London & New York, pp. 73-85.

<sup>2</sup> Jiménez, R. (2014). Estimation of phytotoxicity from sewage sludge compost using *Raphanus sativus* L. as indicator plant. *Venezuelos*, 22(1), 41-47.

<sup>3</sup> Zubillaga, M., Branzini, A., Lavado, S. (2008). Problemas de fitotoxicidad en compost. *Pilquen*, 9(1); Zucconi, F., Monaco, A., De Bertoldi, M. (1981). Biological evaluation of compost maturity. *Biocycle* 22, 27-2.



## MICROCONTAMINANT REMOVAL IN SECONDARY EFFLUENTS OF VARIABLE COMPOSITION FROM DIFFERENT MUNICIPAL WASTEWATER TREATMENT PLANTS BY SOLAR PHOTO-FENTON IN RACEWAY PONDS REACTORS

**P. Soriano-Molina<sup>a,b</sup>, A. Lorenzo<sup>a</sup>, P. Plaza-Bolaños<sup>a</sup>, A. Agüera<sup>a</sup>,  
J. L. García-Sánchez<sup>a,b</sup>, S. Malato<sup>a,c</sup> and J. A. Sánchez-Pérez<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> Solar Energy Research Centre (CIESOL), Joint Centre University of Almería-CIEMAT, E-04120 Almería, (Spain)

<sup>b</sup> Chemical Engineering Department, University of Almería, E-04120 Almería (Spain)

<sup>c</sup> Plataforma Solar de Almería, CIEMAT, E-04200, Tabernas, Almería (Spain)  
*paula.soriano@ual.es*

The aim of this research was to study the effect of the composition variation of real effluents from municipal wastewater treatment plants (MWWTP) on the microcontaminant removal by the photo-Fenton process at neutral pH with Fe(III)-EDDS. Contaminants such as antibiotics, biocides and pesticides are persistent to the treatments in conventional MWWTPs. Although they are detected at very low concentrations (ng/L - µg/L), the legislation is becoming stricter with its discharge<sup>1</sup>. As a solution, the photo-Fenton process, one of the most efficient advanced oxidation processes, is being studied as a tertiary treatment. Currently, the studies are focused on reducing operating costs. In line with this, the use of the biodegradable Fe(III)-EDDS complex, to maintain iron dissolved, and raceway pond reactors (RPRs) as low-cost systems have been proposed<sup>2</sup>.

The experimentation was conducted outdoors in a 19L-RPR with 5 cm liquid depth under global UV radiations close to 30 W/m<sup>2</sup>, using 0.1 mM Fe(III)-EDDS at 1:1 molar ratio and 0.88 mM hydrogen peroxide. Five effluents from MWWTPs located in different areas of Spain more than 1000 km away were used, and they were classified according to the chloride and sulphate salinity. Around 45 microcontaminants were detected and quantified by direct injection coupled to ultra-high-performance liquid chromatography quadrupole-linear ion trap analyzer (UHPLC-QqLIT-MS/MS). Concerning the effect of anions and organic matter concentration on microcontaminant removal, no linear relationship was found. Nonetheless, the results showed that the type of organic matter could affect the process significantly. In addition to acting as HO<sup>•</sup> scavenger, it could form non-photoactive complexes with the iron remaining after Fe(III)-EDDS decomposition with light, avoiding its reaction with hydrogen peroxide, and consequently the microcontaminant oxidation. According to a pseudo-first order kinetics, a fast removal was obtained in the effluent with the highest initial pollutant load.

The average total pollutant load removal in the five effluents was higher than 80% after 15 min of the reaction, which highlights the efficiency of the low cost RPRs to treat MWWTP effluents by photo-Fenton at neutral pH taking into account the variability in their composition.

*Acknowledgements.* This research has been supported by the Ministry for Economy, Industry and Competitiveness (Spanish Government) and the European Regional Development Fund (ERDF), CTQ2016-78255-R. P. Soriano-Molina is grateful to the Ministry of Education, Culture and Sport for her FPU scholarship (AP2014/01030).

<sup>1</sup> Waters Protection Ordinance (WPO) of 28 October 1998 (Status of 1 June 2018), The Swiss Federal Council.

<sup>2</sup> I. De la Olla, L. Ponce-Robles, S. Miralles-Cuevas, I. Oller, S. Malato, J.A. Sánchez Pérez, Catal. Today 2016, 287, 10-14.

## EVALUACIÓN DEL ESTADO DE MADUREZ DE COMPOST DE ALPEORUJO EN RELACIÓN AL GRADO DE HUMIFICACIÓN, BIODEGRADABILIDAD E ÍNDICES DE GERMINACIÓN

**A. Toribio-Gallardo, M. M. Jurado, F. Suárez-Estrella, M. J. López,  
J. A. López-González y J. Moreno**

*Dpto. Biología y Geología, CITE II-B, Universidad de Almería, Campus de Excelencia  
Internacional Agroalimentario, ceiA3, 04120, Almería.  
atoribio@ual.es*

Una de las cuestiones más importantes para evaluar la calidad, y la viabilidad práctica de los productos obtenidos tras someter a los residuos orgánicos a tratamientos de biodegradación, es la determinación de su estado de madurez. Éste es considerado como la suma de dos conceptos clave: estabilidad biológica y humificación<sup>1, 2</sup>, ambos relacionados con el grado de descomposición de la materia orgánica debido a la acción de los microorganismos. En este trabajo se analizaron distintos índices de respirometría relacionados con el consumo de O<sub>2</sub> y, por ende, con su estabilidad biológica, así como la evolución en el contenido de las distintas fracciones húmicas y fúlvicas<sup>3</sup>. Además, y dada su estrecha relación con el estado de madurez, se evaluó el índice de germinación de las muestras objeto de estudio en semillas de berro, lo que permitió comprobar su potencial fitotoxicidad<sup>4</sup>. Las muestras ensayadas procedían de tres procesos de compostaje distintos, ejecutados en plantas de tratamiento de residuos procedentes de la industria del olivar. Como consecuencia de estos análisis se pudo obtener una imagen fiable del estado de madurez de las tres plantas de compost de alpeorujo estudiadas, lo cual es de interés para valorar su calidad de cara a una potencial aplicación agronómica, así como para alcanzar una mayor comprensión del propio proceso de compostaje en función de la materia prima sometida al tratamiento.

*Agradecimientos.* Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Economía y Competitividad a través del proyecto AGL2012-36434. Este grupo de investigación quiere agradecer la enorme ayuda proporcionada por las Doctoras Teresa Gea y Raquel Barrena, y el Ingeniero Informático, Javier Noguera, sin los cuales habría sido imposible llevar a cabo este trabajo.

<sup>1</sup>C. Ciavatta, M. Govi, L. Vittori Antisari, P. Sequi. Characterization of humified compounds by extraction and fractionation on solid polyvinylpyrrolidone. *J. Chromatogr.* **1990**, 509, 141–146.

<sup>2</sup>E. Iglesias-Jiménez, M.T. Barral, F.C. Marhuenda. *Indicadores de la estabilidad y madurez del compost*. En: *J. Moreno Casco, R. Moral Herrero (Eds) Compostaje*. Ed. Mundi Prensa, Madrid, **2008**; pp. 243–83.

<sup>3</sup>N. Almeida, D. Komilis, R. Barrena, T. Gea, A. Sánchez. *The importance of aeration mode and flowrate in the determination of the biological activity and stability of organic wastes by respiration indices*. *Bioresource Technol.* **2015**, 196, 256-262.

<sup>4</sup>F. Zucconi, M. Forte, A.D.E. Monaco, M. De Bertoldi. *Biological evaluation of compost maturity*. *Biocycle*. **1981**, 22(4), 27-29.

## **ANÁLISIS DE LA RED DE INVESTIGACIÓN AMBIENTAL DE LA UNIVERSIDAD DE ALMERÍA: ESTRATEGIAS PARA FOMENTAR ENFOQUES INTERDISCIPLINARIOS**

**M. C. Betancur-Arenas, M. D. López-Rodríguez y H. Castro**

*Departamento de Biología y Geología, Centro Andaluz para la Evaluación y Seguimiento del Cambio Global (CAESCG), Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain); camila.betancur@udea.edu.co; mlopez@caescg.org; hcn068@caescg.org*

Las Universidades demandan cambio e innovación para fomentar en la investigación la adopción de enfoques interdisciplinarios que contribuyan a proveer soluciones integradas a los complejos problemas ambientales que emergen en el Antropoceno. El objetivo general de este estudio fue analizar la Red de Investigación del Área de Recursos Naturales y Medio Ambiente de la Universidad de Almería con el propósito de identificar estrategias para promover enfoques de investigación interdisciplinaria. Metodológicamente, el estudio combinó (1) un Análisis de Redes Sociales basado en explorar las interacciones que se habían producido entre los investigadores que componen el área analizada para publicar artículos científicos y desarrollar proyectos de investigación desde 1993 a 2017, y (2) la realización de entrevistas semi-estructuradas para explorar la percepción de los investigadores sobre el desarrollo y puesta en práctica de la investigación interdisciplinaria. A lo largo del estudio se analizaron 722 artículos publicados en revistas indexadas, 139 proyectos de investigación y se realizaron 19 entrevistas. Los resultados desvelaron que la Red de Investigación (integrada 140 Investigadores adscritos a 12 Grupos de Investigación y 3 Centros de Investigación) presentaba (1) baja conectividad, alta descentralización y escasez de “Investigadores Puente”, (2) diferentes dinámicas de interacción a la hora de publicar artículos y desarrollar proyectos de investigación, y (3) percepción positiva hacia la práctica de la investigación interdisciplinaria. En base a estos resultados, se identificaron barreras y oportunidades como punto de partida para establecer estrategias que promuevan la adopción de enfoques interdisciplinarios en el área de estudio. El estudio provee una orientación contextual útil para investigadores y gestores de instituciones académicas interesados en progresar hacia la interdisciplinariedad.

*Agradecimientos.* Centro Andaluz para la Evaluación y Seguimiento del Cambio Global.

## AVANCES TÉCNICOS PARA LA INCORPORACIÓN DE IMÁGENES DEL SENSOR REMOTO SENTINEL-2 AL SEGUIMIENTO DEL FUNCIONAMIENTO DE ECOSISTEMAS EN LA RED DE PARQUES NACIONALES DE ESPAÑA.

**M. Escudero, J. Cabello<sup>1,2</sup> y A. Reyes<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> *Dpto. de Biología y Geología. Universidad de Almería. Ctra. Sacramento s/n., 04120 La Cañada (Almería), España.*

<sup>2</sup> *Centro Andaluz para la Evaluación y Seguimiento del Cambio Global. Universidad de Almería. Ctra. Sacramento s/n., 04120 La Cañada (Almería), España.  
montserrat\_escudero@hotmail.com*

En la actualidad, los cambios ambientales a nivel global son una realidad. Por ello, es importante una gestión enfocada al seguimiento de dichos cambios. Una herramienta útil para ello es el empleo de imágenes obtenidas con sensores remotos a bordo de satélites. Estos sensores remotos recogen datos de la emisión de radiación en la superficie terrestre relacionados con el funcionamiento de los ecosistemas. A partir de ellos es posible la estimación de atributos que permiten caracterizar aspectos tales como la producción primaria, o la estacionalidad y fenología del dosel vegetal. Este marco conceptual y tecnológico ha permitido el diseño de un sistema de seguimiento de la red de Parques Nacionales de España. Dicho sistema, llamado REMOTE ha sido elaborado a través del trabajo conjunto del Organismo Autónomo de Parques Nacionales (OAPN), el Centro Andaluz para la Evaluación y Seguimiento del Cambio Global (CAESCG), y TRAGSATEC. REMOTE permanece aún en procesos de mejora, habiendo surgido la necesidad de incorporar nuevos procedimientos para informar adecuadamente de los cambios que sufren los Parques Nacionales y los ecosistemas de reducida extensión, así como de informar de otros aspectos del funcionamiento ecosistémico junto a la dinámica del ciclo del carbono en la vegetación. En concreto, dado que REMOTE está basado en el empleo de imágenes del sensor MODIS con una resolución espacial de 250 x 250 m y temporal de 16 días, se cree conveniente incorporar imágenes procedentes del sensor Sentinel-2 de mayor resolución espacial (10 x 10 m) y temporal (5 días). Con este trabajo se pretende evaluar las posibilidades que ofrecen estas imágenes para los objetivos de REMOTE. Para ello se ha usado Google Earth Engine (GEE), una nueva herramienta de computación en la nube que permite trabajar con grandes volúmenes de información sin necesidad de descargar las imágenes. Además, junto al índice de Vegetación Normalizado (NDVI) que permite caracterizar la dinámica de las ganancias de carbono, se ha incorporado el procesamiento del índice de agua superficial terrestre (LSWI), que informa sobre el contenido de agua en los ecosistemas. Los trabajos de procesamiento se han llevado a cabo en el Espacio Natural de Sierra Nevada, un parque que consideramos modelo por la diversidad de ecosistemas y gradientes ambientales que ofrece.

## AMYLOLYTIC, CELLULOLYTIC AND BETA-GLUCOSIDASE ACTIVITY IN DIFFERENT COMPOSTING PROCESS

**M. J. Estrella-González, F. Suárez-Estrella, M. J. López, M. Jurado, J. A. López y J. Moreno**

*Department of Biology and Geology, Faculty of Experimental Sciences,  
University of Almería, ceiA3  
E04120, Almería (Spain); meg274@ual.es*

Composting is defined as a process of biotransformation of organic waste generated by anthropogenic activities. This process is considered an economic, efficient and environmentally friendly technology<sup>1</sup>. The process can be divided into four distinct phases with respect to the temperature reached within the composting piles: mesophilic, thermophilic, cooling and maturation phases<sup>2</sup>. Thermal variations occur thanks to the activity of a wide variety of microorganisms. The microbial diversity of composting piles will depend on the specific nutritional and environmental conditions of each process<sup>3</sup>.

Composting is a dynamic, aerobic and biological process, mainly influenced by factors such as raw material, temperature and the initial microbial population<sup>3</sup>. In this sense, the main objective of this study was to investigate and quantify the amylase, cellulase and  $\beta$ -glucosidase activities during the different phases that take place in plant waste composting (RV) and sludge from wastewater treatment plants (L).

In general, the enzymatic activities previously indicated decreased considerably from the beginning to the end of the composting process. This evolution was the expected one, taking into account the greater availability of substrate during the initial phases of the process. While the amylolytic and cellulolytic activities were higher in plant residues, the activity of  $\beta$ -glucosidase was similar in both types of processes. This fact maintains that this enzymatic parameter could be considered as a general indicator of the evolution of the composting process, independently of the raw materials used.

*Acknowledgements.* This work has been financed by the Ministry of Economy and Competitiveness through project AGL2015-64512-R.

---

<sup>1</sup> Cooperband, L. (2000). Composting: Art and science of organic waste conversion to a valuable soil resource . *Ce Update - Waste III* , 283 - 288.

<sup>2</sup> Álvarez, J. (2003). Manual de compostaje para agricultura ecológica. Andalucía, España: Albanta creativos, S.l.

<sup>3</sup> López, J., Suárez, F., Vargas, M., López, M., Jurado, M., & Moreno, J. (2015). Dynamics of bacterial microbiota during lignocellulosic waste. *Bioresource Technology*, 406-416

## IMPROVEMENT OF FATTY ACID PROFILE OF *Hermetia illucens*

**D. Fabrikov, L. Gozález-Picón, M. Rodríguez-Rodríguez,  
M. J. González-Fernández and J. Montes-López**

*Departamento de Biología y Geología, Facultad de Ciencias Experimentales,  
Universidad de Almería,  
E04120 Almería (España); df091@inlumine.ual.es*

The current world population is around 7500 million habitants, this number will increase to 9800 million by 2050 according to the UN.<sup>1</sup> This population increase will occur mainly in the underdeveloped countries. Faced with this population growth, makes the search for alternatives to traditional foods imperative, the advantages offered by the breeding of insects in compare to conventional protein sources make us refer to them as a sustainable food.<sup>2</sup> On January 1 of 2018 came into the European Union Regulation (EU) 2015/2283 on new foods, which ends the ambiguity of old regulations and gives the category of food to insects, thus can be marketed as long as they meet a number of conditions.

In the present study larvae of *Hermetia illucens* have been fed with experimental diets rich in bioactive polyunsaturated fatty acids with the objective of accumulating these in the insects. The fatty acids selected (**Figure 1**) were  $\gamma$ -linolenic acid (18:3n6, GLA),  $\alpha$ -linolenic acid (18:3n3, ALA) and stearidonic acid (18:4n3, SDA). The control diet (broiler feed) was enriched with 10% of vegetable oils (borage oil, echium oil and linseed oil) rich in these fatty acids. Results are shown in the **Table 1**.

**Table 1.** Comparison between the percentage of selected fatty acids in *Hermetia illucens* larvae and experimental feeds.

Experimental diets	Fatty acids % in <i>Hermetia illucens</i> larvae			Fatty acids % in Feed		
	ALA	GLA	SDA	ALA	GLA	SDA
<b>Control</b>	-	-	-	-	-	-
<b>Borage oil 10</b>	0,89	9,88	3,6417	1,41	13,27	-
<b>Echium oil 10</b>	13,01	4,17	5,94	23,39	7,39	9,38
<b>Linseed oil 10</b>	22,34	-	2,159	40,12	-	-

<sup>1</sup> "World Population Projected to Reach 9.7 Billion by 2050 | UN DESA Department of Economic and Social Affairs." *United Nations*, United Nations. Retrieved from [www.un.org/en/development/desa/news/population/2015-report.html](http://www.un.org/en/development/desa/news/population/2015-report.html)

<sup>2</sup> D.G.a.B. Ooninx, J. Van Itterbeeck, M.J.W. Heetkamp, H. Van Den Brand, J.J.A. Van Loon, A. Van Huis, *PLoS ONE*, **2010**, *5*, e14445.

## ACTIVIDAD HEMOLÍTICA Y APOPTOSIS EN *K. VENEFICUM*

**L. López<sup>1</sup>, J. J. Gallardo<sup>1</sup>, A. Sánchez<sup>1</sup>, F. García<sup>1</sup>, K. Álvarez, A. Astuya<sup>2</sup>,  
A. Llanos<sup>2</sup>**

*1 Departamento de Ingeniería Química, Escuela Superior de Ingeniería,  
Universidad de Almería,*

*E04120 Almería (España); llr288@ual.es*

*2 Departamento de Oceanografía y COPAS Sur-Austral, Facultad de Ciencias Naturales y  
Oceanografía, Universidad de Concepción,  
Concepción (Chile)*

Los dinoflagelados son un grupo muy extenso de fitoplancton conocidos por ser el origen de la mayoría de las proliferaciones tóxicas de microalgas (HABs). Sin embargo, aún no se conoce con exactitud el papel ecológico de estas toxinas. Los HABs pueden suponer un impacto importante sobre la economía de zonas costeras afectando a centros de cultivo y zonas de extracción de peces y mariscos. Entre las especies de dinoflagelados ictiotóxicos, *Karlodinium veneficum* destaca por ser capaz de producir muerte a concentraciones muy bajas (cientos de células/L). El mecanismo de toxicidad de *K. veneficum* se basa en la liberación de toxinas (karlotoxinas) al medio con actividad hemolítica. Una estirpe de esta especie fue cultivada en una columna de burbujeo de 10 L de capacidad usando las condiciones de cultivo optimizadas previamente<sup>1</sup> usando como medio de cultivo una formulación optimizada para maximizar su productividad celular<sup>1</sup>. El cultivo se realizó en 2 fases, una primera consistente en un cultivo en *batch* seguida de una segunda fase en la que se realizaron adiciones nutrientes y que comenzó tras la entrada del cultivo en estado estacionario. Esta estrategia ha demostrado ser efectiva para conseguir cultivos envejecidos de dinoflagelados<sup>2</sup> y de esta manera maximizar la producción de karlotoxinas (metabolitos secundarios). Tras 15 días de cultivo se cosechó el contenido de la columna por medio de centrifugación. También se evaluó el sobrenadante del cultivo. Se observó el efecto tóxico y la inducción de apoptosis de distintas concentraciones de biomasa y sobrenadante de *K. veneficum*, en huevos y estadios tempranos de pez cebra (*Danio rerio*) por medio de citometría de flujo. La exposición de huevos y larvas de pez cebra a concentraciones sobrenadante de 3.125 mg·L<sup>-1</sup> y concentraciones de extracto de biomasa superiores a 100 mg·L<sup>-1</sup> conllevaron un descenso de porcentaje de eclosión de huevos de un 20% y aparición de deformaciones en larvas. Menores concentraciones de sobrenadante provocan mayores efectos de embriotoxicidad, efectos subletales e inducción de apoptosis de larvas<sup>3</sup>.

*Acknowledgements.* Esta investigación fue financiada por CONICYT (FONDECYT 2017, Ref. 1170515; Chile) y el Ministerio de Economía y Competitividad de España (CTQ2014-55888-C3-02). También agradecemos la financiación de la Universidad de Concepción a través del proyecto de investigación VRID 216.096.067-1.0 IN, la plataforma INNBIO y el programa COPAS Sur Austral (PFB-31/2007).

<sup>1</sup> López-Rosales L, García-Camacho F, Sánchez-Mirón A, Contreras-Gómez A, Molina-Grima E. "An optimisation approach for culturing shear-sensitive dinoflagellate microalgae in bench-scale bubble column photobioreactors." *Bioresour Technol.* **2015**;Vol 197; pp. 375-382.

<sup>2</sup> Molina-Miras A, Morales-Amador A, de Vera CR, et al. "A pilot-scale bioprocess to produce amphidinols from the marine microalga *Amphidinium carterae*: Isolation of a novel analogue". *Algal Res.* **2018**;Vol 31.

<sup>3</sup> López-Rosales L, Sánchez-Mirón A, García-Camacho F, Place AR, Chisti Y, Molina-Grima E. "Pilot-scale outdoor photobioreactor culture of the marine dinoflagellate *Karlodinium veneficum*: Production of a karlotoxins-rich extract." *Bioresour Technol.* **2018**;Vol 253; pp. 94-104

## USO DE VEHÍCULOS AÉREOS NO TRIPULADOS PARA LA RECONSTRUCCIÓN VIRTUAL DEL PATRIMONIO CULTURAL. CASO DE ESTUDIO: CORTIJO DEL FRAILE (NÍJAR-ALMERÍA)

**P. Martínez-Carricondo, F. Carvajal-Ramírez, F. Agüera-Vega y L. Yero-Paneque**

*Servicio Periférico de Investigación y Desarrollo basado en Drones  
Universidad de Almería,  
04120 Almería (España); drones@ual.es*

El patrimonio cultural es el conjunto de bienes heredados y dignos de protección que han sido producidos por la humanidad. El deterioro de estos bienes constituye un empobrecimiento cultural de todos los pueblos, por lo que es imprescindible su conservación. Con este fin, resulta necesario disponer de información precisa y actualizada, entre la que destaca la documentación geométrica y su caracterización arquitectónica.<sup>1</sup>

Los métodos de digitalización o virtualización 3D basados en imágenes, se han convertido en los últimos años en una técnica de gran utilidad y versatilidad en el área de patrimonio cultural; en concreto, el algoritmo *SfM* (*Structure from Motion*) permite la obtención de nubes de puntos tridimensionales de cualquier objeto, a partir de fotografías superpuestas obtenidas con una cámara digital y un software especializado.<sup>2</sup> Tomando esta digitalización como punto de partida, obtenida de forma precisa<sup>3</sup>, y basándose en información histórica del estado original recopilada de diferentes fuentes, es posible la reconstrucción virtual de cualquier elemento del patrimonio cultural a partir de herramientas informáticas de modelado arquitectónico.

En este estudio se ha aplicado esta metodología para la reconstrucción virtual del Cortijo del Fraile en Níjar (Almería). La Fig. 1 muestra una nube de puntos de alto densificado con el estado actual en que se encuentra la edificación.



Figura 1. Levantamiento 3D del Cortijo del Fraile, Níjar (Almería), obtenido por fotogrametría UAV, mediante el software *Agisoft PhotoScan*.

La Fig. 2 muestra dos vistas de la fachada principal del edificio, una vez llevado a cabo todo el proceso de modelado a partir de software de diseño y renderizado arquitectónico.



Figura 2. Renderizado final obtenido con el software *Lumion*.

<sup>1</sup> Asamblea Legislativa, 'Convención Para La Protección Del Patrimonio Mundial, Cultural y Natural', 1976.

<sup>2</sup> Verhoeven, 'Taking Computer Vision Aloft - Archaeological Three-Dimensional Reconstructions from Aerial Photographs with Photoscan', *Archaeological Prospection*, 2011, 67-73 <<https://doi.org/10.1002/arp.399>>.

<sup>3</sup> Martínez-Carricondo and others, 'Assessment of UAV-Photogrammetric Mapping Accuracy Based on Variation of Ground Control Points', *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 72, February (2018), 1-10 <<https://doi.org/10.1016/j.jag.2018.05.015>>.



## MEDIDA DE LA ACEPTACIÓN DE LA TEORÍA DE LA EVOLUCIÓN POR PARTE DE ESTUDIANTES DE LOS GRADOS DE CIENCIAS AMBIENTALES, BIOTECNOLOGÍA Y BIOLOGÍA

**F. Martínez-Hernández, M. Mota-Merlo, P. Mota-Merlo, C. Abaurre-Ortega y B. Teruel-Giménez**

*Department of Biology and Geology, Faculty of Experimental Sciences,  
Universidad de Almería,  
E04120 Almería (Spain); fmh177@ual.es*

La Teoría de la Evolución (TE), desarrollada extensamente por Charles R. Darwin en su libro *El origen de las especies*<sup>1</sup>, es la teoría unificadora de la Biología. Theodosius Dobzhansky lo expresó de una manera sublime: “nothing in biology makes sense except in the light of evolution”<sup>2</sup>. Es evidente que títulos universitarios como los grados de Biología, Biotecnología o Ciencias Ambientales tienen una relación directa con las implicaciones de la TE, de manera que la comprensión de la misma debe ser considerado un hito clave en el logro las competencias de estos graduados. Atendiendo a esa premisa, el principal objetivo de esta investigación fue el de evaluar la aceptación y comprensión que los estudiantes de los grados mencionados tienen de la TE. Para cumplir este objetivo se utilizó una test denominado Medida de la Aceptación de la Teoría de la Evolución (MATE)<sup>3</sup> que consta de 20 preguntas que evalúan el conocimiento y la aceptación de la TE utilizando una escala de Likert (de 1 a 5). De acuerdo con este cuestionario, si se comprende bien y se acepta plenamente la TE la puntuación final será de 100. Utilizando este test se encuestó a 200 alumnos de los grados de Ciencias Ambientales (CA), Biotecnología (BT) y Biología (BI) en las universidades de Almería y Granada.

De acuerdo con los resultados, los alumnos de CA mostraron una aceptación alta de la TE (84), si bien los alumnos de BT y BI obtuvieron valores superiores (de 90 y 93 respectivamente) lo que refleja una aceptación muy alta ( $p < 0,01$ ). Al comparar estos resultados con encuestas previas llevadas a cabo con alumnos de enseñanza secundaria<sup>4</sup> se observa que los valores de los universitarios son claramente superiores. Sin embargo, en el caso de CA estos valores están muy próximos a los de los estudiantes de secundaria con vocación científica<sup>5</sup>. Este dato apunta a que los estudiantes de CA no perciben plenamente las implicaciones de la TE en relación con el medio ambiente, a pesar de cursar asignaturas relacionadas con la ecología y la biodiversidad. Del análisis de las diferentes preguntas incluidas en el test se observa que se repite el patrón reflejado en investigaciones anteriores<sup>4,5</sup>, de manera que las preguntas que obtuvieron los valores más bajos (e.g. *La teoría evolutiva genera predicciones comprobables con respecto a las características de la vida*) son las que requieren una mayor comprensión y conocimiento de la TE.

*Acknowledgements.* Estamos en deuda con los componentes del grupo RNM344.

<sup>1</sup> C. R. Darwin, *The origin of species by means of natural selection; or, the preservation of favoured races in the struggle for life*, John Murray, London (UK), 1859.

<sup>2</sup> T. Dobzhansky, *Am. Biol. Teach.* 1973, 35, 125-129.

<sup>3</sup> M. L. Rutledge and K. C. Sadler, *Am. Biol. Teach.* 2007, 69, 332-335.

<sup>4</sup> Martínez-Hernández, F., Mendoza-Fernández, A. J., Salmerón-Sánchez, E., Pérez-García, F.J., Garrido-Becerra, J.A., Merlo-Calvente, M.E., & Mota-Poveda, J. F. (2016). Sobre la fiabilidad y utilidad del test MATE (Medida de la Aceptación de la Teoría de la Evolución) para medir el conocimiento de alumnos de bachillerato. *Actas XXVII Encuentros de Didáctica de las Ciencias Experimentales*, 1459-1466.

<sup>5</sup> Martínez-Hernández, F., Mendoza-Fernández, A. J., Salmerón-Sánchez, E., Mota-Poveda, J. F., & Garzón, A. (2017). Sobre el grado de aceptación de la teoría evolutiva de los alumnos de Enseñanza Secundaria Obligatoria. *Enseñanza de las ciencias: revista de investigación y experiencias didácticas*, (Extra), 1281-1288.

## USO DE SERIES TEMPORALES DE TEMPERATURA PARA EVALUAR LA INTERACCIÓN AGUA SUBTERRÁNEA - SUPERFICIAL EN EL RÍO ANDARAX (ALMERIA)

**F. Navarro-Martínez, F. Sánchez-Martos, J. Gisbert-Gallego**

*G.I. Recursos Hídricos y Geología Ambiental. Dpto. de Biología y Geología. Universidad de Almería. Campus Universitario. 04120 Almería.  
fnm206@ual.es; fmartos@ual.es; jgisbert@ual.es*

El análisis de la temperatura del agua mediante series temporales es una herramienta que proporciona información útil para identificar la interacción entre el agua subterránea y la superficial en áreas heterogéneas de una manera rápida, fiable y de bajo coste, siendo una buena alternativa para la caracterización.

El río Andarax presenta tramos de agua permanente, temporales y efímeros con la presencia de diversos tipos de acuíferos que interaccionan con las aguas superficiales. Esta variabilidad geológica condiciona el comportamiento de las aguas a lo largo del cauce.

A lo largo del tramo medio y alto del río se han instalado 10 registradores, obteniendo una serie de datos horarios de temperatura del aire y del agua (superficial y subterránea). Sobre estos datos se realiza un análisis de las series temporales en el dominio del tiempo y la frecuencia, lo que permite identificar periodicidades y observar su continuidad en el tiempo. De esta manera se logra establecer zonas con un distinto comportamiento.

Los tramos de agua superficial cercanos a los grandes acuíferos se ven influenciados por las aguas subterráneas. Las oscilaciones diarias de temperatura del agua superficial se suavizan, lo cual muestra la capacidad que tiene un gran acuífero en la mitigación de la incidencia de la temperatura del aire sobre la temperatura del agua. Esto se observa en dos zonas: en la cabecera (área de Padules) se detecta la influencia relacionada con el acuífero carbonatado de la sierra de Gádor; en el tramo medio del río (área del Puente de los Imposibles) parece estar influenciado por el acuífero detrítico del medio Andarax.

En el tramo ubicado alrededor del pequeño aluvial del medio Andarax (aguas arriba de Terque), donde el río es temporal, se detecta la influencia de la infiltración directa sobre el acuífero detrítico aluvial. Las aguas subterráneas muestran unas oscilaciones diarias similares a las observadas en el río durante el periodo que mantiene el caudal. Por último, la zona de cabecera (Fondón) presenta un comportamiento más complejo, observándose la aparición de periodicidades intermitentes a lo largo de la serie, lo que evidencia un cambio durante el año.

El análisis permite identificar zonas en donde el río se comporta como ganador y el acuífero actúa como regulador, zonas en donde el río es perdedor e influye sobre el acuífero y zonas con un comportamiento fluctuante a lo largo del año.

*Agradecimientos.* Este trabajo se ha realizado en el marco del proyecto P11-RNM-8115 financiado por la Consejería de Economía, Innovación y Ciencia de la Junta de Andalucía. Es una contribución al Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario (ceiA3).

## IDENTIFICACIÓN DE LA INTERACCIÓN AGUAS SUPERFICIALES-SUBTERRÁNEAS EN EL TRAMO MEDIO DEL RÍO ANDARAX (ALMERIA)

**F. Navarro-Martínez, F. Sánchez-Martos, J. Gisbert-Gallego y L. Molina**

*G.I. Recursos Hídricos y Geología Ambiental. Dpto. de Biología y Geología. Universidad de Almería. Campus Universitario. 04120 Almería.  
fmm206@ual.es; fmartos@ual.es; jgisbert@ual.es; lmolina@ual.es*

Conocer la interacción entre las aguas superficiales y las subterráneas en las áreas semiáridas es esencial para realizar una correcta gestión de los recursos, así como para evitar posibles impactos en el medio. En la cuenca media del río Andarax (Almería) existe un tramo de río temporal, altamente dependiente del régimen de precipitaciones, asociado a un acuífero aluvial de pequeña magnitud. Mediante el estudio hidrológico y su relación con las aguas subterráneas se ha podido establecer la interacción entre ambas aguas y su variación temporal. Para ello se utilizan datos de precipitación, altura de la lámina de agua de una estación de aforos, temperatura del agua superficial, nivel piezométrico y temperatura del agua subterránea durante dos años hidrológicos (2015/16 y 2016/17), así como datos de tres muestreos hidroquímicos e isotópicos (noviembre 2015, febrero 2016 y abril 2016).

La aparición de caudal superficial en el otoño favorece la infiltración del agua del río hacia el acuífero y modifica su nivel piezométrico, elevándolo durante el invierno/primavera. También puede observarse una disminución de las concentraciones del ion cloruro y  $^{222}\text{Rn}$  al final de la primavera, época en la que el río aún no se ha secado.

La temperatura es ampliamente utilizada como trazador de la interacción aguas subterráneas-superficiales. La infiltración del agua superficial provoca oscilaciones de temperatura que se manifiestan en el agua subterránea y evidencian su influencia desde el periodo diario hasta el mensual. Grandes episodios tormentosos pueden modificar la estabilidad de las oscilaciones de la temperatura del agua subterránea, repercutiendo de manera instantánea y permaneciendo su afección durante largos periodos, tal y como ocurre con las lluvias en diciembre de 2016 y enero de 2017.

El acuífero aluvial se encuentra influenciado por la infiltración desde el cauce y por las tormentas, modificando el nivel piezométrico, las concentraciones iónicas y la temperatura. Se observa que el efecto directo de las lluvias ejerce una influencia más intensa que la infiltración procedente del río, sobre todo cuando éstas son de gran magnitud. Una vez cesan las perturbaciones el acuífero tiende a alcanzar su estado de estabilidad, que se manifiestan mediante el descenso del nivel y el mantenimiento constante de la temperatura.

*Agradecimientos.* Este trabajo se ha realizado en el marco del proyecto P11-RNM-8115 financiado por la Consejería de Economía, Innovación y Ciencia de la Junta de Andalucía. Es una contribución al Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario (ceiA3).

# GENERATING QUANTUM CIRCUITS FOR SOLVING ALGEBRAIC EQUATIONS USING GROVER'S ALGORITHM

**F. Orts, G. Ortega, E. M. Garzón**

*Supercomputation-Algorithms Group, Informatics Department,  
University of Almería,  
04120 Almería (Spain); francisco.orts@ual.es*

The way of solving a problem using a Quantum Computer is usually different from a classic one, as each kind of computer has their own properties and paradigms. Such differences can be perceived even in the most simplistic elements of a circuit: the logic gates. Quantum Computers use several logic gates whose rules are based on quantum mechanics. These rules give them computing capabilities which were unthinkable using classic computers<sup>1</sup>.

In this work, a software tool to solve equations using quantum circuits is presented. A classic paradigm would involve identifying the kind of equation, choosing the adequate way of solving it and isolating the variable/s according to the chosen methodology. Instead of using such a paradigm, this work proposes a method based on one of the most known quantum algorithms: Grover's search algorithm. Grover's algorithm is the faster method used to search in a vector currently known. Its strength is based on the principle of quantum superposition. Superposition lets to work with several quantum states simultaneously. Applying this idea to mathematical operations with variables, it implies that we can calculate every possible result of such an operation computing it only a time<sup>2</sup>. As an example, if it is necessary to get all the results for the expression  $X + 2$ , with  $X$  between 0 and 9, ten operations will be computed. However, this can be done with Quantum Computers using only one operation.

Nevertheless, quantum mechanics also has disadvantages. In this work, the main problem is the wave-particle duality. Following the example in the last paragraph, it is possible to achieve 10 different values with a unique operation. However, if you try to get the values of  $X$ , you will only get one of them randomly. So, for example, the value of  $X$  for the case  $X + 2 = 5$  cannot be obtained, as  $X$  will collapse into a random value. This is known as decoherence. Luckily, Grover's search algorithm takes decoherence into account and it is able to recover the desired state (that is, the solution of the equation) manipulating the probabilities of the quantum states which satisfy the equation. It does not let a value which is not a solution to be recovered when the variable is checked (that is the moment when decoherence happens).

The software tool is being implemented using Python. It builds quantum circuits using the most actual and optimized versions of the quantum available circuits and joining them, creating the Grover's Oracle. The Oracle consists on a circuit which computes the parts of the equation with variables and adding a single qubit. This single qubit has the responsibility to alert when a result is correct through a simple comparison with the coefficient. This Oracle is followed by a diffusion phase, which is another circuit. The diffusion phase is responsible for manipulating the probabilities of the states. Then, it is possible to recover only the valid solutions.

*Acknowledgements.* This work has been supported by the Spanish Science and Technology Commission (CICYT) under contract TIN2015-66680; Junta de Andalucía under contracts P11-TIC7176 and P12-TIC-301 in part financed by the European Regional Development Fund (ERDF).

---

<sup>1</sup> Nielsen, M. Chuang, I. Quantum Computation and Quantum Information, 10th edition. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 2017.

<sup>2</sup> Orts, F., Ortega, G., Garzón, E. M. A quantum circuit for solving divisions using Grover's search algorithm. In *Proc. 18th Int. Conf. Comput. Math. Method. Sci. Eng.* 2018.

## **EFECTO DEL CAMBIO GLOBAL EN LOS ESPARTALES DEL SE IBÉRICO: IMPORTANCIA DE LA TOPOGRAFIA EN LA DISPONIBILIDAD DE AGUA**

**B. Rodríguez-Lozano, E. Rodríguez-Caballero & Y. Cantón**

*Departamento de Biología y Geología, Facultad de Ciencias Experimentales,  
Universidad de Almería,  
E04120Almería (España); brl169@hotmail.com*

Los espartales son uno de los ecosistemas más representativos del SE de la península Ibérica. La aridez característica de esta región da lugar a paisajes abiertos con una cobertura vegetal dispersa dentro de una matriz de suelo desnudo, que actúan como sistemas complejos desde el punto de vista eco-hidrológico. En estos sistemas, la topografía juega un papel fundamental controlando los procesos de redistribución de agua entre los espacios abiertos y la vegetación. Este fenómeno maximiza la productividad de la vegetación y podría amortiguar la disminución de la cobertura, biomasa y productividad que se predicen para los espartales Mediterráneos como consecuencia del cambio climático.

Para evaluar la respuesta de los espartales del SE Ibérico a cambios de precipitación y evapotranspiración y analizar el efecto de la topografía en la disponibilidad de agua para la vegetación, y por tanto en su funcionamiento actual y futuro, hemos realizado un estudio de sustitución de espacio por tiempo en 17 parcelas situadas a lo largo de un gradiente de aridez que refleja los cambios en el clima que predice el IPCC para esta región. Para ello se emplearon imágenes SENTINEL-2 e índices topográficos derivados de modelos digitales del terreno.

Nuestros resultados demuestran que el Índice de Vegetación Normalizado (NDVI), que es un indicador de la biomasa y la cobertura de vegetación, presenta una clara estacionalidad, controlada por el estado previo de la vegetación y la aridez. Además, el análisis de la relación entre el NDVI y las variables topográficas relacionadas con la evapotranspiración y redistribución de agua, demuestra que la topografía desempeña un papel fundamental, controlando las variaciones espaciales de NDVI, el cual presenta valores superiores en las zonas de acumulación de agua. La aplicación de este modelo, que describe la respuesta de la vegetación (NDVI) a partir de su estado previo, la aridez y del TWI (de sus siglas en inglés "Topographical Wetness Index"), a los diferentes escenarios del IPCC predice una reducción del NDVI en los espartales mediterráneos para finales de siglo. Sin embargo, esta reducción se verá amortiguada en las zonas de acumulación de agua de escorrentía, dando lugar a cambios en los patrones de distribución de la vegetación y a un nuevo equilibrio eco-hidrológico con una mayor concentración de vegetación en las zonas donde el almacenamiento de agua se ve favorecido.

## LOS INSECTOS COMO ALIMENTO ALTERNATIVO

**M. Rodríguez y D. Fabrikov**

*Departamento de Biología y Geología, Facultad de Ciencias Experimentales,  
Universidad de Almería,  
E04120 Almería (España); mrr960@ual.es*

Se estima que en 2050 la población mundial contará con más de 9.000 millones de personas. En un mundo creciente, en el que la población cada vez es mayor, la alimentación supone un grave problema debido a la gran demanda de alimentos y la escasez de recursos para atender esas necesidades<sup>1</sup>. En este marco la entomofagia o ingesta de insectos, que se realiza en unos 113 países con más de 2.000 especies comestibles<sup>2</sup> podría ser una gran aliada para solucionar la escasez de alimentos en el mundo según las Naciones Unidas<sup>3</sup>. Los insectos contienen niveles de proteínas, grasas y micronutrientes equiparables a la carne o el pescado, esto lo hace interesante para utilizarse como alimento para peces. En este sentido la harina de insecto podría tener beneficios económicos y ambientales aplicada en la acuicultura, ya que debido a la sobrepesca existe una disminución de la harina de pescado, que sirve como fuente de alimentación en las piscifactorías<sup>4</sup>.

En el presente estudio se pretende mostrar la importancia del uso de fuentes de proteína de insectos como alternativa a otras fuentes tradicionales. Para ello se ha realizado una revisión bibliográfica de artículos científicos comprendidos entre los años 2013 y 2018, utilizándose para ello bases de datos como Scopus o PubMed e introduciendo como palabras clave “entomophagy”, “nutrition” o “edible insects”. Uno de los hallazgos significativos más importantes encontrados fue que el valor nutricional de los insectos varía según la especie, la etapa en la que se encuentra en su ciclo de vida y su alimentación, esto hace que su utilización sea flexible a nuestras necesidades. En conclusión, el uso de los insectos como fuente de alimentación alternativa puede resultar satisfactoria, aunque aún tiene por delante una gran cantidad de retos por resolver con ayuda de una mayor investigación.

---

<sup>1</sup> Kouřimská, Lenka & Adámková, Anna. (2016). Nutritional and sensory quality of edible insects. NFS Journal. 4. 10.1016/j.nfs.2016.07.001.

<sup>2</sup> Jongema, Y. (2017). List of edible insects of the world (April 1, 2017)-WUR. Available at: [www.wur.nl/en/Expertise-Services/Chairgroups/Plant-Sciences/Laboratory-of-Entomology/Edible-insects/Worldwide-species-list.htm](http://www.wur.nl/en/Expertise-Services/Chairgroups/Plant-Sciences/Laboratory-of-Entomology/Edible-insects/Worldwide-species-list.htm) (accessed 1 September 2017).

<sup>3</sup> van Huis, A. ; Van Itterbeeck, J. ; Klunder, H. ; Mertens, E. ; Halloran, A. ; Muir, G. ; Vantomme, P., (2013). Edible insects - Future prospects for food and feed security. FAO Forestry Paper 171.

<sup>4</sup> van Huis, A. (2015). Edible insects contributing to food security? *Agriculture & Food Security*, 4, 1-9.

## EVALUACIÓN DEL IMPACTO DE LOS SEDIMENTOS DE ALPECHÍN DE BALSAS DE EVAPORACIÓN MEDIANTE ANÁLISIS BIOLÓGICOS

**J. Salinas, M. R. Martínez-Gallardo, A. Siles-Castellano, M. J. López, M. M. Jurado, J. A. López-González, F. Suárez y J. Moreno**

*Área de Microbiología, Dpto. Biología y Geología, CITE II-B, Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3 E04120, Almería, España; kenkezonee@gmail.com*

El acúmulo en balsas de evaporación del alpechín, residuo líquido de la extracción del aceite de oliva, ha constituido una práctica común desde los años 80. Actualmente muchas de estas balsas no están en uso, debido que el método de extracción de aceite más extendido, la centrifugación a dos fases, no genera alpechín. Sin embargo, el efecto contaminante del alpechín de las balsas abandonadas persiste, debido a que la mayoría de ellas no presentan una impermeabilización adecuada o están mal dimensionadas, de modo que contaminan suelos y acuíferos.

El objetivo de este trabajo fue determinar la extensión de la contaminación en una balsa de alpechín ubicada en el término municipal de Mora (Toledo), principalmente en lo referente a su impacto sobre la biota del suelo. Los parámetros que describen las funciones, cantidad, estructura y diversidad de los microorganismos se emplean como indicadores de la calidad y salud de los suelos y permiten determinar el estado de los mismos como respuesta a cambios ambientales.

El área de estudio estuvo constituida por una balsa de alpechín desecada de 80 m x 30 m, que se parceló en una rejilla de 18 puntos, en los que se tomaron muestras de superficie (S, 0-45 cm) y profundidad (P, 45-80 cm). En estas muestras se analizó el carbono de biomasa y la respiración del suelo como medida global de la abundancia y actividad metabólica microbiana; la diversidad taxonómica y funcional de la comunidad microbiana, que permite determinar el estado de la misma y su potencialidad para procesos de biorremediación; y la fitotoxicidad y ecotoxicidad, parámetros empleados para la evaluación de los riesgos ecológicos provocados por agentes contaminantes.

En general la zona superficial, en la que se concentró la mayor parte de sedimentos del alpechín, presentó un mayor efecto fitotóxico y ecotóxico y sobre la biodiversidad funcional, que la zona profunda. El carbono de biomasa fue bastante elevado para un material con una potencial alta carga contaminante. Sin embargo, el análisis respirométrico reveló que la actividad metabólica microbiana se encuentra bastante limitada. Estos resultados ponen de manifiesto la existencia de claras limitaciones a la actividad microbiana derivadas de la escasa biodegradabilidad del material de la balsa, especialmente en la capa superficial. Como consecuencia, no se produce biotransformación natural de la materia orgánica. Además, el hecho de que en la capa profunda, a pesar de la menor cantidad de biomasa microbiana, se produzcan ciertos niveles de biodegradación, indica que la pluma de contaminación no excede los primeros 45 cm. La biodiversidad funcional y tipos de actividades presentes en la microbiota residente indican la presencia de una importante potencialidad metabólica, no afectada de forma considerable por las condiciones imperantes, y que se puede estimular mediante el manejo adecuado.

*Acknowledgements.* Este trabajo ha sido financiado a través del proyecto LIFE+REGROW (LIFE16 ENV/ES/000331) “Reclamation of olive oil waste abandoned lagoons using bio-recovering strategies in a circular economy”

## A NEW APPROACH ON LIPSCHITZ COMPACT OPERATORS

**M. G. Cabrera-Padilla and A. Jiménez-Vargas**

*Department of Mathematics, Faculty of Experimental Sciences,  
Universidad de Almería,  
E04120 Almería (Spain); m\_gador@hotmail.com and ajimenez@ual.es*

Based on the ideas given by A. Jiménez-Vargas, J. M. Sepulcre and M. Villegas-Vallecillos in their paper *Lipschitz compact operators*<sup>1</sup>, in which the Lipschitz versions of compact and weakly compact operators from a pointed metric space to a Banach space are introduced, in this work we continue developing their theory for maps defined between two pointed metric spaces X and Y, which also runs parallel to the theory for compact and weakly compact linear operators defined between Banach spaces. We start this task by presenting the notions of Lipschitz-free compact operators and Lipschitz-free weakly compact operators and, after that, we give their corresponding nonlinear versions of the well-known Schauder's theorem and Gantmacher's theorem, as well as the Davis-Figiel-Johnson-Pelczynski factorization theorem for Lipschitz-free weakly compact operators. The key tools which allow us to define these new concepts without worrying about the lack of linear structure for Y and get the aforementioned results are the notion of Lipschitz-free space over a pointed metric space and a linearization process stated by N. J. Kalton in *Spaces of Lipschitz and Hölder functions and their applications*<sup>2</sup>.

---

<sup>1</sup> A. Jiménez-Vargas, J. M. Sepulcre and M. Villegas-Vallecillos, *Lipschitz compact operators*, J. Math. Anal. Appl., **415** (2014), pp. 889-901.

<sup>2</sup> N. J. Kalton, *Spaces of Lipschitz and Hölder functions and their applications*, Collect. Math **55** (2004), pp. 171-217.



## IMPLEMENTATION OF ALGORITHMS IN MATLAB FOR THE MEASUREMENT OF ROOTS

**F. Ferrón-Carrillo, J.C. Gómez, J.C. Regalado, M. Urrestarazu**

*Department of Agronomy, Center for Research in Mediterranean Intensive Agrosystems and Agri-Food Biotechnology (CIAIMBITAL), University of Almería, Road of Sacramento s/n, E04120 Almería (Spain); fcf109@ual.es*

Thermography is a visual analysis tool that has found applications in agriculture<sup>1</sup>. The efficiency of root growth in cabbage crops subject to different experiments with different types of lights in a chamber with controlled humidity and temperature is analyzed. This article discusses the efficiency of a visual analysis using thermal imaging and digital processing in the analysis of radical growth. There are advantages in the use of thermographic images compared to the use of RGB images.

In RGB images it is possible to separate the root through the digital processing of images, in the same way it is also possible to measure the area of the image. The results are obtained by processing the RGB images with the algorithm created, to calculate the root area of the front and back.

The percentage of the root area occupied in the total area of the substrate is calculated for the pots of different capacities expressed in liters, and the percentage of use of the roots in the total surface of the substrate. Speaking of thermal images, it is possible to record the roots in a specific size. When a temperature change is applied to the substrate, the temperature difference is not yet significant for an accurate analysis of the root. It is recommended to use higher resolution thermal imaging cameras to capture roots less than 1 mm thickness.

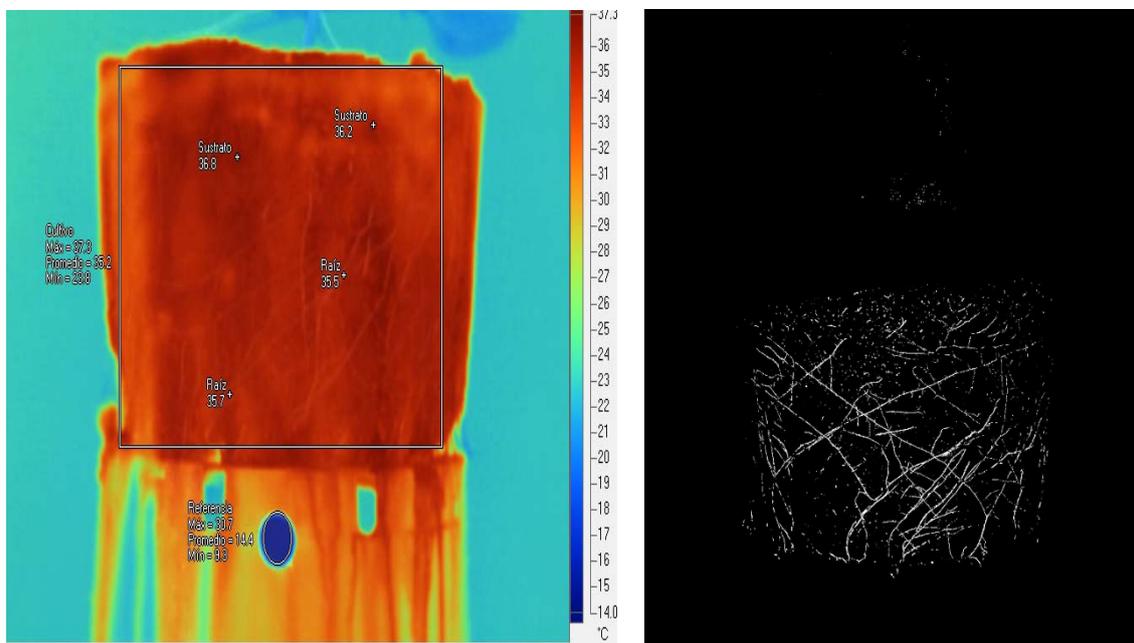


Figure 1. Close thermal photography of roots and binarization of the same in RGB image.

<sup>1</sup> Urrestarazu, M. (2013). Infrared thermography used to diagnose the effects of salinity in a soilless culture. *Quantitative Infrared Thermography Journal*, 10, 1-8.

## THE DISTRIBUTION FUNCTION OF A PROBABILITY MEASURE ON A LOTS

**J. F. Gálvez-Rodríguez and M. A. Sánchez-Granero**

*Department of Mathematics, Faculty of Experimental Sciences,  
Universidad de Almería,  
E04120 Almería (Spain); jgr409@ual.es*

In<sup>1</sup> and <sup>2</sup> we describe a theory of a cumulative distribution function on a separable linearly ordered topological space (LOTS) from a probability measure defined in this space. This function can be extended to the Dedekind-MacNeille completion of the space where it does make sense to define the pseudo-inverse. Moreover, we study the properties of both functions (the cdf and the pseudo-inverse) and get results that are similar to those which are well-known in the classical case. For further reference about the classical case see, for example,<sup>3</sup>

The cumulative distribution function (in short, cdf) of a probability measure  $\mu$  on a separable LOTS,  $(X, \leq)$ , is a function  $F: X \rightarrow [0,1]$  defined by  $F(x) = \mu(\leq x)$ , where  $(\leq x) = \{y \in X: y \leq x\}$ . This function is monotonically non-decreasing, right  $\tau$ -continuous ( $\tau$  is the order topology),  $\sup F(X) = 1$  and, if there does not exist  $\min X$ , then  $\inf F(X) = 0$ .

From  $F$  we define  $F_-: X \rightarrow [0,1]$  by  $F_-(x) = \mu(< x)$ , which plays a similar role to that played by  $\lim_{x \rightarrow a^-} F(x)$  in the classical case.

Let  $DM(X)$  be the Dedekind-MacNeille completion of  $X$ ,  $A^u$  be the set of upper bounds of  $A \in DM(X)$  and  $\phi: X \rightarrow DM(X)$  be the embedding defined by  $\phi(x) = (\leq x)$ , for each  $x \in X$ . Next result shows that  $\mu$ , and its cdf,  $F_\mu$ , are univocally determined.

**Theorem.** Let  $X$  be a separable LOTS, such that  $DM(X) \setminus \phi(X)$  is countable and  $F: X \rightarrow [0,1]$  a monotonically non-decreasing and right  $\tau$ -continuous function satisfying  $\sup F(X) = 1$ ,  $\sup F(A) = \inf F(A^u)$ , for each  $A \in DM(X)$  and, if there does not exist  $\min X$ , then  $\inf F(X) = 0$ . Then there exists a probability measure,  $\mu$ , on  $X$  such that  $F = F_\mu$ .

The previous theorem let us give a result on the decomposition of a cdf as a convex sum of two cdfs: a step one and one satisfying that its probability measure is null in each point.

Moreover, the pseudo-inverse of a cdf  $F$  is defined by  $G(r) =$ the set of lower bounds of  $\{x \in X: F(x) \geq r\}$ , for each  $r \in [0,1]$ .  $G$  is monotonically non-decreasing and left  $\tau$ -continuous. Indeed, we can also recover  $\mu$  from the pseudo-inverse:

**Theorem.** Let  $X$  be a separable LOTS such that that  $DM(X) \setminus \phi(X)$  is countable and let  $G: [0,1] \rightarrow DM(X)$  be a monotonically non-decreasing and left  $\tau$ -continuous function such that  $G(1) = \max DM(X)$ ,  $G(0) = \min DM(X)$  and  $\sup G^{-1}(< A) = \inf G^{-1>(> A)$ , for each  $A \in DM(X)$ . Moreover, if there does not exist  $\min X$ , then  $G^{-1}(\min DM(X)) = \{0\}$ . Under the previous conditions, there exists a probability measure such that  $G$  is the pseudo-inverse of  $F_\mu$ .

<sup>1</sup> J. F. Gálvez-Rodríguez, M. A. Sánchez-Granero, *Equivalence between cdfs and probability measures on a LOTS*, preprint.

<sup>2</sup> J. F. Gálvez-Rodríguez, M. A. Sánchez-Granero, *The distribution function of a probability measure on a linearly ordered topological space*, preprint.

<sup>3</sup> A. M. Juan González, *Probabilidad*, Universidad de Almería, Almería, 2016.

<sup>4</sup> D. J. Lutzer, *On generalized ordered spaces*, Dissertationes Math. 89 (1971).

## EIGENVALUES OF A DIFFERENTIAL OPERATOR RELATED TO GEGENBAUER-SOBOLEV ORTHOGONAL POLYNOMIALS

**J. F. Mañas-Mañas and J. J. Moreno-Balcázar**

*Department of Mathematics, Faculty of Experimental Sciences,  
Universidad de Almería,  
E04120 Almería (Spain); jmm939@ual.es; balcazar@ual.es*

In this work, we consider the following discrete Sobolev inner product involving the Gegenbauer weight

$$(f, g)_S := \int_{-1}^1 f(x)g(x)(1-x^2)^\alpha dx + M[f^{(j)}(-1)g^{(j)}(-1) + f^{(j)}(1)g^{(j)}(1)],$$

where  $\alpha > -1$ ,  $j \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ , and  $M > 0$ . Let  $\{q_n^{(\alpha, j, M)}\}_{n \geq 0}$  be the sequence of orthonormal polynomials with respect to the above inner product. These polynomials are eigenfunctions of a differential operator  $\mathbf{T}$  (see <sup>1</sup>). We establish the asymptotic behavior of the corresponding eigenvalues which we denote by  $\lambda_n$ . This asymptotic behavior of  $\lambda_n$  poses a new problem because, as far as we know, it is the first time in the framework of Sobolev orthogonality that this asymptotic behavior is studied, so it opens up a new line of research.

The asymptotic behavior of these eigenvalues is mainly determined by the behavior of the  $j$ -th derivatives of the corresponding standard kernel polynomials evaluated at  $x = 1$ , where we located the perturbation, and also by the asymptotic behavior of the eigenvalues of the differential operator related to the classical Gegenbauer polynomials.

The asymptotic behavior of the  $\lambda_n$  is essential to obtain the value  $r_0$ , given by

$$r_0 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log(\max_{x \in [-1, 1]} |q_n^{(\alpha, j, M)}|)}{\log(\lambda_n)}, \quad \alpha \geq -1/2.$$

The value  $r_0$  is the least number such that for each  $r > r_0$  the reproducing kernel  $K(x, y; r)$ , defined by  $K(x, y; r) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{q_i^{(\alpha, j, M)}(x)q_i^{(\alpha, j, M)}(y)}{\lambda_i^r}$ , converges absolutely in a certain left-definite Hilbert space.

Finally, following the techniques of <sup>3</sup> and <sup>4</sup>, we focus our attention on Mehler–Heine type formulae as they describe in detail the asymptotic behavior of these polynomials around  $x = 1$ , just the point where we have located the perturbation of the standard inner product. These results have been published in <sup>2</sup>.

*Acknowledgements.* The authors are partially supported by the Ministry of Science, Innovation and Universities of Spain and European Regional Development Fund (ERDF) grant MTM2017-89941-P and by Research Group FQM-0229 (belonging to Campus of International Excellence CEIMAR). The author JFMM is funded by a grant of Plan Propio de la Universidad de Almería. The author JJMB is also partially supported by the research centre CDTIME of Universidad de Almería.

<sup>1</sup> H. Bavinck, J. Koekoek, in “Differential operators having symmetric orthogonal polynomials as eigenfunctions”, *J. Comput. App. Math.* **1999**, 106, 369-393.

<sup>2</sup> L. L. Littlejohn, J. F. Mañas-Mañas, J. J. Moreno-Balcázar, R. Wellman, in “Differential operator for discrete Gegenbauer-Sobolev orthogonal polynomials: Eigenvalues and asymptotics”, *J. Approx. Theory*, **2018**, 230, 32–49.

<sup>3</sup> J. F. Mañas-Mañas, F. Marcellán, J. J. Moreno-Balcázar, in “Asymptotic behavior of varying discrete Jacobi-Sobolev orthogonal polynomials and zeros”, *J. Comput. Appl. Math.* **2016**, 300, 341-353.

<sup>4</sup> J. F. Mañas-Mañas, F. Marcellán, J. J. Moreno-Balcázar, in “Asymptotic for varying discrete Sobolev orthogonal polynomials”, *Appl. Math. Comput.* **2017**, 314, 65-79.

# **<sup>1</sup>H NMR-BASED METABOLOMICS APPROACH TO EVALUATE THE EFFECT OF LIGHT INTENSITY AND TEMPERATURE ON *Isochrysis galbana***

**L. M. Aguilera-Sáez<sup>1</sup>, T. Violet<sup>1</sup>, A. C. Abreu<sup>1</sup>, J. Camacho-Rodríguez<sup>2</sup>,  
C. V. González-López<sup>2</sup>, M. C. Cerón-García<sup>2,\*</sup>, I. Fernández<sup>1,\*</sup>**

(1) Department of Chemistry and Physics, Research Centre CIAIMBITAL, Universidad de Almería, Ctra. Sacramento, s/n, Almería, E-04120 (Spain); las768@ual.es

(2) Department of Chemical Engineering, Research Centre CIAMBITAL, Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)

The high degree of biodiversity of marine microalgae makes them promising sources of valuable and bioactive compounds with potential applications on nutraceuticals, cosmetics, horticultural and aquaculture sectors, and as feedstock for pharmaceutical industries.<sup>1,2</sup> NMR spectroscopy coupled with multivariate data analysis techniques was applied to obtain meaningful information about non-targeted metabolic changes on *Isochrysis galbana*, a microalga of high interest in aquaculture applications, upon acclimation to different environmental conditions at indoor lab-scale. We aim to report the optimal conditions that maximize the production or accumulation of several compounds of interest in *I. galbana*.

Experiments were performed indoor under continuous mode operation in glass bubble column photo bioreactors (1.8 L, 0.07 m diameter × 0.50 m height) continuously bubbled at 0.5 v·v<sup>-1</sup>·min<sup>-1</sup> rate with air by an inlet at the bottom of the column. Experiments were initiated at 0.17 g<sub>biomass</sub>·L<sup>-1</sup>. The effects of temperature (15, 20, 25 and 30 °C) and incident irradiance (250, 500, 1000 and 1600 μE/m<sup>2</sup> s) at a constant dilution rate of 0.3 h<sup>-1</sup> were evaluated. Extracts of biomass were made in two solvent systems: (1) a mixture of CH<sub>3</sub>OH-d<sub>4</sub> and phosphate D<sub>2</sub>O buffer solution at pH 7 (50:50, v/v); (2) a mixture of CH<sub>3</sub>OH-d<sub>4</sub> and CDCl<sub>3</sub> in 20:80 (v/v) ratio. <sup>1</sup>H NMR spectra were recorded on Bruker Avance III 600 spectrophotometer equipped with a 5 mm QCI quadruple resonance pulse field gradient cryoprobe using a NOESY presaturation pulse sequence (Bruker 1D noesygprr1d) with water suppression. The spectra obtained were processed through the TOPSPIN 3.2 software (Bruker BioSpin GmbH) and then subjected to a multivariate analysis using the SIMCA-P software (v. 14.0, Umetrics).

High light intensity promoted a decrease on photosynthetic pigments, such as chlorophyll a and fucoxanthin, accompanied by the conversion of polar fatty acids (phospholipids, glycolipids) to neutral (saturated and unsaturated) fatty acids and a reduction on amino acids content. Moreover, both high temperatures (30 °C) and irradiances (1600 μE/m<sup>2</sup> s) decreased the content on PUFA. Simultaneously, a decrease on amino acids (tyrosine, alanine and glutamate) and carbohydrates (glucose, trehalose and galactose) contents was observed. Omega-3 fatty acids (DHA, EPA) were enhanced under 250-500 μE/m<sup>2</sup> s and 15-20 °C. Finally, an increase on organic osmolytes (as homarine, DMSP, GBT and glycerol) was observed at lower temperatures.

We have demonstrated the usefulness and power of NMR spectroscopy coupled to multivariate data analysis techniques to provide meaningful information about non-targeted metabolic changes on *I. galbana* upon acclimation to different environmental conditions. This strategy allows to save time with respect to laborious isolation and quantification procedures employed so far.

*Acknowledgements.* This research has been funded by the National R+D+i Plan project number CTQ2017-84334-R of the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities and by the Junta de Andalucía project number P12-FQM-2668.

<sup>1</sup> Stengel, D. B. *et al.* Algal chemodiversity and bioactivity: Sources of natural variability and implications for commercial application. *Biotechnol. Adv.* **2011**, *29*, 483-501.

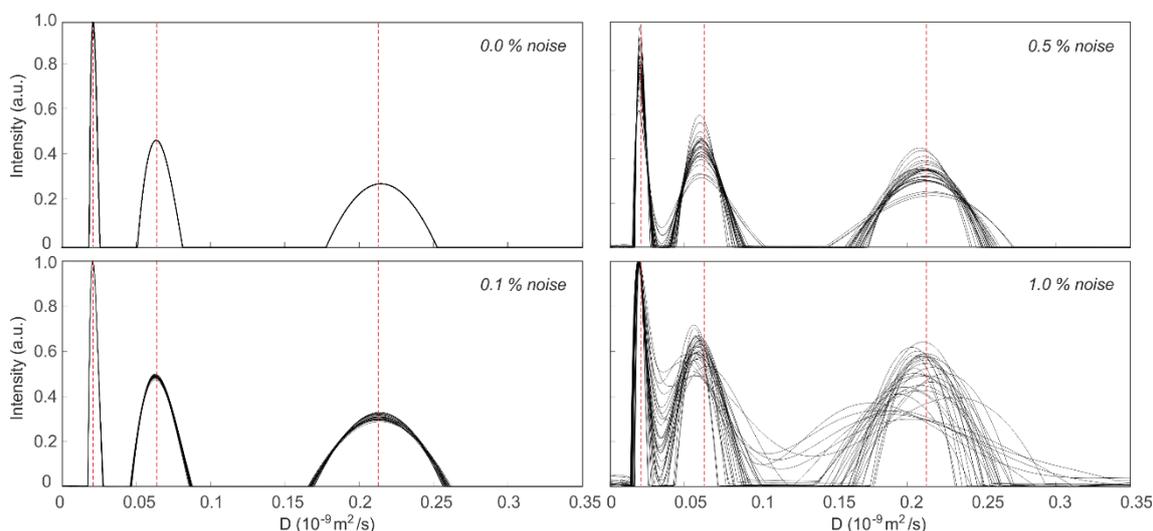
<sup>2</sup> Craigie, J. S. Seaweed extract stimuli in plant science and agriculture. *J. App. Phycol.* **2011**, *23*, 371-393.

## dART: AN ALGEBRAIC RECONSTRUCTION TECHNIQUE FOR DIFFUSION NMR EXPERIMENTS. CAN WE SOLVE POLYMER BLENDS?

**F. M. Arrabal-Campos, L. M. Aguilera-Sáez and I. Fernández\***

*Department of Chemistry and Physics, Research Centre CIAIMBITAL, Universidad de Almería, Ctra. Sacramento, s/n, Almería, E-04120 (Spain); fmarrabal@ual.com*

Most of the algorithms employed in diffusion NMR are optimization methods based on diverse regularized methods such as Tikhonov's, which decompose the multiexponential detected signal attenuation as a sum of mono exponential signals. Our approach uses projections over hyperplanes of the Hilbert space using Laplace transform kernel, which is a special case of projection onto convex sets. This new application of an algebraic reconstruction technique for diffusion NMR experiments (dART) has been applied for the first time in both simulated and real systems, and then compared with established methods such as ITAMeD and TRIn.<sup>1</sup>



**Figure 1.** dART processing of the simulated dataset with added Gaussian noise levels of 0.0, 0.1, 0.5 and 1.0%. Reference D-values are marked with dotted lines.

The new algorithm provides excellent results in systems with overlapped signals and more importantly performs more rapidly than any other one assayed. One of the main advantages is that the reported method does not need a regularization parameter, which allows to explore largest spaces. In addition, we have provided the Universal Calibration Curve (UCC) for weight-average Mw prediction of poly-propylene polymers with no dependence on the solvent used.

*Acknowledgements.* Financial support was given by Bruker Española SA, Junta de Andalucía (Spain) under the project number P12-FQM-2668 and Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (Spain) under the project number CTQ2017-84334-R.

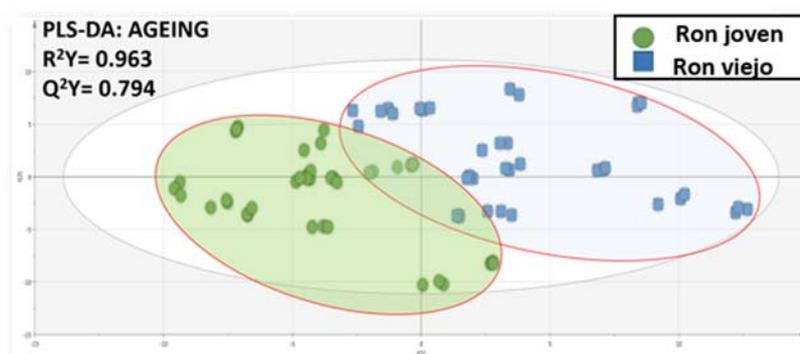
<sup>1</sup> F. M. Arrabal-Campos, L. M. Aguilera-Sáez, I. Fernández, *J. Phys. Chem. A*, **2018**, accepted.

## APLICACIÓN DE HERRAMIENTAS METABOLÓMICAS PARA LA CLASIFICACIÓN DE RONES DORADOS MEDIANTE EL USO DE UHPLC-ORBITRAP-MS

**J. R. Belmonte-Sánchez, R. Romero-González, F. J. Arrebola-Liébanas,  
J.L. Martínez-Vidal, A. Garrido-Frenich.**

*Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Almería, Carretera Sacramento s/n, E-04071 Almería, España  
joseraulbs@gmail.com*

El ron es una bebida alcohólica con un elevado consumo mundial (más de 1 billón de litros por año) y un aumento esperado del 1.9% en términos de volumen consumido entre los años 2016-202<sup>1</sup>. La compleja elaboración de esta bebida (fermentación, destilación, dilución, envejecimiento y mezcla) provoca que sea una matriz compleja respecto al número y concentración de los componentes en la misma. En los últimos años se ha demostrado que el enfoque de huella dactilar metabolómica es la mejor opción para una caracterización completa de las matrices complejas. En este estudio se proporciona, por primera vez, una estrategia para la clasificación de rones dorados basada en diferentes categorías, como el tipo de barril usado para la fermentación, la materia prima y la edad de envejecimiento. Con este objetivo se ha aplicado un enfoque metabolómico basado en cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (analizador de masas Exactive-Orbitrap), para la clasificación de más de 30 rones diferentes. La información metabolómica obtenida del análisis de las muestras ha sido evaluada mediante análisis de componentes principales (PCA), además de utilizar otras herramientas quimiométricas, como el análisis discriminante de mínimos cuadrados parciales (PLS-DA) para crear distintos modelos. Para la selección de los bio-marcadores más significativos en la clasificación de los rones se ha realizado el análisis de importancia de las variables en las proyecciones (VIP), seguido de su identificación mediante el estudio de la de masa exacta obtenida, del ajuste isotópico para la fórmula molecular predicha y la coincidencia con las bases de datos disponibles. Se han encontrado distintos productos de fermentación y envejecimiento esperados como derivados de los furfurales (p.ej. hidroximetilfurfural) y azúcares (p.ej. glucosa, manitol). La capacidad de clasificación de los modelos obtenida ha sido óptima, con una tasa de clasificación de casi el 100% de eficacia (*Figura 1*).



**Figura 1.** Gráfico de análisis discriminante de mínimos cuadrados (PLS-DA) basado en el envejecimiento de rones.

<sup>1</sup> <https://blog.euromonitor.com/2017/08/top-25-countries-by-rum-consumption-per-capita.html> (accedido el 20 de Octubre de 2018).

## APPLICATION OF LC-QTOF-MS AND RETROSPECTIVE DATA ANALYSIS TO OPIOIDS IDENTIFICATION IN WATER MATRICES.

**M. C. Campos-Mañas, A. Lorenzo, S. Arzate, J. A. Sánchez Pérez, A. Agüera**

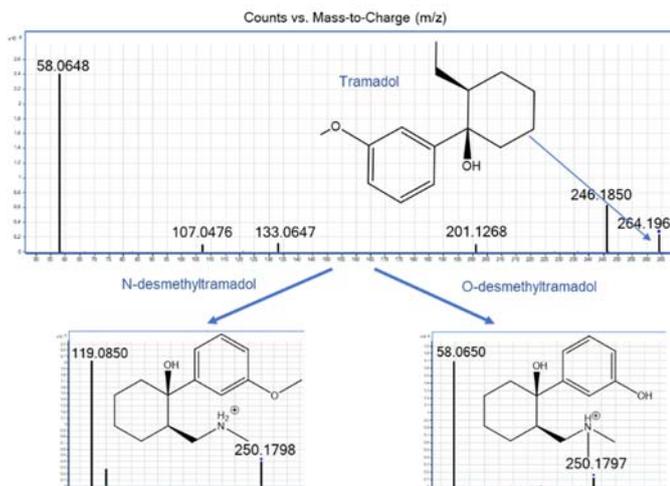
*Solar Energy Research Centre (CIESOL). Joint Centre University of Almería-CIEMAT. Ctra de Sacramento s/n. 04120. Almería. Spain.*

Opioids reach the environment after human excretion, through the sewage system, being the aqueous environment one of the lastly destinations. The use of high resolution mass spectrometry (HRMS) allows both the extension of the list of opioids that have already been studied to others not investigated so far, and the identification of their unknown metabolites or transformation products (TPs). In this work, a retrospective analysis for the identification of opioids and their metabolites was applied to water samples already analyzed by liquid chromatography/quadrupole time-of-flight mass spectrometry.

Samples of surface water and wastewater were collected from various locations in the United States. An off-line SPE was used for the pre-concentration of the water samples. The separation of the analytes was carried out using an HPLC system connected to an ultra high definition quadrupole time-of-flight mass spectrometer Model 6540 Agilent.

The results of the database search, together with a manual revision of the extracted-ion chromatograms and the re-analysis of the samples using Auto MS-MS mode, allowed the identification of 17 opioids and metabolites. Eleven out of the seventeen proposed opioids were confirmed. The work compiles the exact masses, elemental composition and retention time of all the opioids confirmed, as well as the exact mass for all the fragment ions obtained by Auto MS-MS experiments.

Moreover, an interesting opioid metabolite identified is N-desmethyltramadol ( $m/z$  250.1802). **Figure 1** shows the mass spectra of tramadol and its metabolites in wastewater. Tramadol metabolites, O-desmethyltramadol and N-desmethyltramadol, presented the same exact mass for the protonated molecule but they can be identified by their mass spectrum fragments and the retention times. Other relatively abundant opioid compounds found in municipal wastewater included methadone and its metabolite EDDP, the cough suppressant dextromethorphan and two of its major metabolites, N-demethyl dextropropranolol and dextropropranolol.



**Figure 1.** Mass spectra of Tramadol and its metabolites in wastewater effluent.

*Acknowledgements.* The authors gratefully acknowledge the financial support by the Ministry of Economy and Competitiveness of Spain and the European Regional Development Fund (ERDF), project CTQ2016-78255-R. M.C. Campos-Mañas is grateful for her pre-doctoral grant from University of Almería.

## MESOPOROUS MIL-100(Fe) NANOMOF DERIVATIVES AS DRUG NANOCARRIERS

**G. Cutrone<sup>a</sup>, J. M. Casas-Solvas<sup>a</sup>, M. Menéndez-Miranda<sup>b</sup>, G. Benkovics<sup>c</sup>,  
M. Malanga<sup>c</sup>, R. Gref<sup>b</sup>, A. Vargas-Berenguel<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Department of Chemistry and Physics, Universidad de Almería,  
E04120 Almería (Spain); cutrone@ual.es*

<sup>b</sup>*Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay – UMR 8214, Université Paris-Sud,  
Rue André Rivière Bâtiment 520, 91405 Orsay Cedex, France*

<sup>c</sup>*Cyclolab Kft, Illatos út 7, H-1097, Budapest, Hungary*

The development of new nanocarriers is a promising solution to overcome multidrug resistance of many bacteria that survive the action of an antibiotic and escape from the immune system. These devices can be engineered for delivering antibiotics directly into infected cells. Our project involves the surface modification of mesoporous materials, such as nanosized metal-organic frameworks (nMOFs), for the preparation of efficient drug nanocarriers. Among those, MIL-100(Fe) is composed of iron(III) octahedral trimers and trimesate (1,3,5-benzene tricarboxylate) linkers giving rise a porous structure that reaches unprecedented loadings within the 20-70 wt% range.<sup>1</sup> The use of nMOFs as a drug nanocarrier requires of a delivery vector that interacts with receptors on the cells surface. Mannose was selected for this role as it takes part in the mechanism used by different bacteria to infect cells through lectins such as DC-SIGN and FimH. In this communication, we present a “green” post-synthetic coating method for MIL-100(Fe) directly in water.  $\beta$ -Cyclodextrin ( $\beta$ -CD) and dextran (DXT) were used as scaffolds for the preparation of shell coating derivatives as they present a large number of hydroxyl groups easy to modify. In addition they are non-toxic and stable in biological conditions, and can increase bioavailability and solubility of the nanodevice. These derivatives contain simultaneously phosphate groups as anchoring moieties (this strategy takes advantage of the ability of phosphate groups to bind the Fe(III) sites on the nMOFs surface),<sup>2,3</sup> and motifs of mannose, tetra(ethylene glycol) (TEG), or large chains of poly(ethylene glycol) (PEG). Mannose residues are intended to act as biological vectors, while TEG and PEG chains are expected to stabilize and increase the biocompatibility of the systems protecting them from degradation processes within biological environments and increasing circulation times. The phosphate/phosphonate conjugates were tested as self-assembled coating building blocks for previously drug-loaded MIL-100(Fe) nMOFs. The preliminary shell formation and stability studies are reported in addition to the cellular uptake tests.

*Acknowledgements.* We acknowledge the Spanish Ministry of Economy and Competitiveness—ERD Fund (Grant CTQ2017-90050-R) and the EU through a Marie Curie ITN program (CYCLON HIT 608407) for financial support.

<sup>1</sup> P. Horcajada, T. Chalati, C. Serre, B. Gillet, C. Sebrie, T. Baati, J. F. Eubank, D. Heurtaux, P. Clayette, C. Kreuz, J.-S. Chang, Y. K. Hwang, V. Marsaud, P.-N. Bories, L. Cynober, S. Gil, G. Férey, P. Couvreur, R. Gref, *Nat. Mater.* **2010**, *9*, 172-178.

<sup>2</sup> V. Agostoni, P. Horcajada, M. Noiray, M. Malanga, A. Aykaç, L. Jicsinszky, A. Vargas-Berenguel, N. Semiramoth, S. Daoud-Mahammed, V. Nicolas, C. Martineau, F. Taulelle, J. Vigneron, A. Etcheberry, C. Serre, R. Gref, *Sci. Rep.* **2015**, *5*, 7925.

<sup>3</sup> A. Aykaç, M. Noiray, M. Malanga, V. Agostoni, J. M. Casas-Solvas, É. Fenyvesi, R. Gref, A. Vargas-Berenguel, *Biochim. Biophys. Acta* **2016**, *1861*, 1606-1616.



## ELIMINACIÓN DE RODAMINA B DE DISOLUCIONES ACUOSAS EMPLEANDO BIOADSORBENTES BASADOS EN HIDROGELES DE ALGINATO

**J.M. González-Gallego, M. Villafranca-Sánchez, M Fernández-Pérez,  
F. Flores-Céspedes**

*Departamento de Química y Física, Centro de Investigación CIAIMBITAL  
Universidad de Almería, Ctra. de Sacramento s/n  
E04120 Almería (España); gonzalezgallegojose@gmail.com*

Bioadsorbentes basados en hidrogeles de alginato, modificados con orujo de oliva y lignina kraft, han sido utilizados para la eliminación de rodamina B de efluentes acuosos. La caracterización de los adsorbentes se llevó a cabo mediante estudios de FTIR, TGA y la determinación del punto cero de carga ( $pH_{pzc}$ ).

Estudiar la cinética de los procesos de adsorción es crucial para poder predecir el diseño de los sistemas de adsorción en el campo industrial. En función de las características que presente el adsorbente, como su naturaleza y propiedades, dependerá la velocidad del proceso de adsorción, así como de las condiciones en las que se desarrolle el experimento. Los datos cinéticos del proceso de adsorción fueron ajustados a las ecuaciones cinéticas de pseudo primer orden, introducida por Lagergren<sup>1</sup>, el modelo cinético de pseudo segundo orden propuesto por Ho y McKay<sup>2</sup> y El modelo de difusión de intrapartículas descrito por Weber y Morris<sup>3</sup>. A la vista de los valores obtenidos, podemos inferir que la adsorción de rodamina B sobre los adsorbentes estudiados se ajusta mejor a un modelo cinético de pseudo segundo orden.

Asimismo, se han obtenido las isothermas experimentales de adsorción de rodamina B sobre los hidrogeles, observándose que dichas isothermas se pueden clasificar como tipo L de la clasificación de Giles<sup>4</sup> lo cual indica una mediana afinidad del adsorbato por los centros activos de la superficie de los adsorbentes

Para poder describir y evaluar la capacidad de adsorción de los hidrogeles de alginato modificados con orujo procedente de la extracción de aceite de oliva y lignina kraft como adsorbentes para la eliminación de moléculas de rodamina B en disolución acuosa, se han aplicado a los datos experimentales de adsorción los modelos propuestos por Freundlich<sup>5</sup> y Langmuir<sup>6</sup>.

La ecuación de Freundlich es la que mejor describe la adsorción de rodamina B sobre los hidrogeles modificados con orujo, mientras que en caso de los modificados con lignina se ajustan mejor al modelo propuesto por Langmuir. De forma general podemos observar que un incremento de la cantidad de alginato en las muestras favorece la adsorción.

<sup>1</sup> S. Lagergren, *Kungliga Svenska Vetenskapsakademiens Handlingar* **1898**, 24, 1-39

<sup>2</sup> Y.S Ho, G. McKay, *Chem. Eng. J.* **1998**, 70, 115-124. [https://doi.org/10.1016/S0923-0467\(98\)00076-1](https://doi.org/10.1016/S0923-0467(98)00076-1)

<sup>3</sup> W.J. Weber, J.C. Morris, *J. Sanit. Eng. Div. Am. Soc. Civ. Eng.* **1963**, 89, 31-59

<sup>4</sup> C.H. Giles, T.H. MacEwan, S.N. Nakhwa, D.J. Smith, *Chem. Soc.* **1960**, 786, 3973-3993

<sup>5</sup> F. H. Freundlich, *Z. Phys. Chem.* **1906**, 57, 384-470

<sup>6</sup> I. Langmuir, *J. Am. Chem. Soc.* **1918**, 40, 1361-1403. <https://doi.org/10.1021/ja02242a004>

## NUEVA FAMILIA DE POLÍMEROS DE COORDINACIÓN BASADOS EN DICLOFENACO CON PROPIEDADES ANTILEISHMANIA

**A. García-García<sup>1</sup>, J. M. Méndez-Arriaga<sup>1</sup>, J. Cepeda<sup>2</sup>, S. Gómez-Ruiz<sup>3</sup>,  
A. Salinas-Castillo<sup>4</sup>, J. M. Seco<sup>2</sup>, M. Sánchez-Moreno<sup>5</sup>, D. Choquesillo-Lazarte<sup>6</sup>,  
C. Marín<sup>5</sup> y A. Rodríguez-Diéguez<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071 Granada (España); amaliagarcia@correo.ugr.es

<sup>2</sup>Departamento de Química Aplicada, Facultad de Química, Universidad del País Vasco (UPV/EHU), 20018 San Sebastián (España)

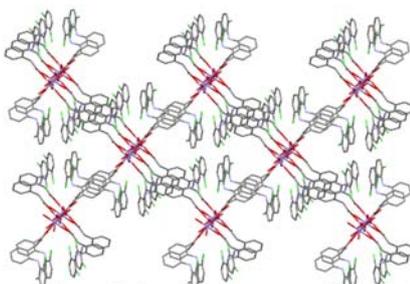
<sup>3</sup>Departamento de Biología y Geología, Física y Química Inorgánica, Universidad Rey Juan Carlos, 28933 Móstoles, Madrid (España)

<sup>4</sup>Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071 Granada (España)

<sup>5</sup>Departamento de Parasitología, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071 Granada (España)

<sup>6</sup>Laboratorio de Estudios Cristalográficos, IACT (CSIC-UGR), 18100 Armilla, Granada (España)

La leishmaniasis es una enfermedad provocada por parásitos del género *Leishmania* que se da principalmente en zonas tropicales y subtropicales del planeta, aunque hoy en día afecta a 98 países, provocando numerosas muertes y graves problemas económicos.<sup>1</sup> Los medicamentos usados actualmente, como Glucantime o AmBisome, son bastante inespecíficos, producen efectos secundarios graves y son muy caros. Esto ha creado la necesidad urgente de buscar otras alternativas a estos fármacos. Una alternativa muy atractiva son los complejos metálicos, en particular la unión de un fármaco orgánico ya existente con metales, para mejorar sus propiedades terapéuticas.<sup>2</sup> Siguiendo esta aproximación, se ha logrado sintetizar una nueva familia de polímeros de coordinación basados en el conocido fármaco diclofenaco y metales de la primera serie de transición. Dichos compuestos son isoestructurales y responden a la fórmula general  $[M(\text{diclof})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot (\text{EtOH})_2$ , donde M puede ser Mn(II), Ni(II) o Co(II). Además se ha ensayado la actividad antiparasitaria de los tres compuestos frente a tres cepas de *Leishmania*, obteniendo en todos los casos valores de IS mayores de los que presenta el fármaco de referencia Glucantime.



**Figura 1.** Estructura en cadena de los compuestos vista a lo largo del eje *c* cristalográfico.

*Acknowledgements.* Junta de Andalucía (P12-FQM-1484).

<sup>1</sup> D. Sterverding, *Parasites Vectors* **2017**, *10*, 82.

<sup>2</sup> A. B. Caballero, A. Rodríguez-Diéguez, M. Quirós, J. M. Salas, O. Huertas, I. Ramírez-Macías, F. Olmo, C. Marín, G. Chaves-Lemaury, R. Gutierrez-Sánchez, M. Sánchez-Moreno, *Eur. J. Med. Chem.* **2014**, *85*, 526.

## REMOVAL OF ORGANIC MICROCONTAMINANTS FROM URBAN WASTEWATER USING A MICROALGAE-BASED PHOTOBIOREACTOR

**E. García-Gómez<sup>1</sup>, P. Plaza-Bolaños<sup>1</sup>, A. Gilabert Belmonte<sup>1</sup>, A. Morillas España<sup>2</sup>, C. Gómez Serrano<sup>2</sup>, A. Agüera<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*CIESOL, Joint Centre from University of Almeria-CIEMAT, 04120 Almeria, Spain.*

<sup>2</sup>*Department of Chemical Engineering, University of Almeria, 04120 Almeria, Spain.  
egg966@ual.es*

It is well known that organic microcontaminants (OMCs), such as pharmaceuticals, endocrine disruptors or pesticides, are not efficiently removed in conventional wastewater treatment plants (WWTPs) and, consequently, they are continuously discharged into the aquatic environment. In the last years, microalgae-based WW treatment systems in open raceways have been proposed as a promising alternative for WW treatment<sup>1</sup>. However, data related to the efficiency of these systems to remove OMCs are still scarce<sup>2</sup>. Moreover, the accumulation of these compounds in the algal biomass, which can be further used as fertilizer or for animal feeding, represents a new input of OMCs to the food chain and environment.

This study aimed to evaluate the performance of a microalgae-based wastewater (WW) treatment process performed in outdoor raceway, into the removal of OMCs. Crude WW collected, after primary treatment to remove large solids, from El Ejido (Almería, Spain) was daily treated at a hydraulic residence time of 5 days. A multi-residue method was applied for the analysis of 90 OMCs in both influent and effluent of the photobioreactor. Additionally, a QuEChERS-based method was validated for the monitoring of the remaining biomass. The obtained results showed that 60% of the compounds present in the WW reached removal percentages > 90% and 20% were in the 70-90% range. Biomass analyses also revealed presence of OMCs at high concentrations (up to 30  $\mu\text{g g}^{-1}$  d.w.), suggesting a possible microalgae bioaccumulation or uptake as the main route of removal for the OMCs, in addition to oxidization by the high dissolved oxygen concentration and UV radiation impinging during the process.

*Acknowledgements:* P. Plaza-Bolaños acknowledges University of Almeria for her PhD research contract (Hipatia Program). This research is performed in collaboration with European Union's Horizon 2020 Research and Innovation Program under Grant Agreement No. 727874 SABANA.

<sup>1</sup> C. Gómez-Serrano, M.M. Morales-Amaral, F.G. Acién, R. Escudero, J.M. Fernández-Sevilla, E. Molina-Grima, *Appl. Microbiol. Biotechnol.* **2015**, *99*, 6931-6944.

<sup>2</sup> V. Matamoros, E. Uggetti, J. García, J.M. Bayona, *J. Hazard. Mater.* **2016**, *301*, 197-205.

## SÍNTESIS DE DOS NUEVOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN TRIDIMENSIONALES DE ZINC BASADOS EN ÁCIDO 1H-INDAZOL-5-CARBOXÍLICO Y LIGANDOS AROMÁTICOS NITROGENADOS CON INTERESANTES PROPIEDADES LUMINISCENTES Y DE ADSORCIÓN.

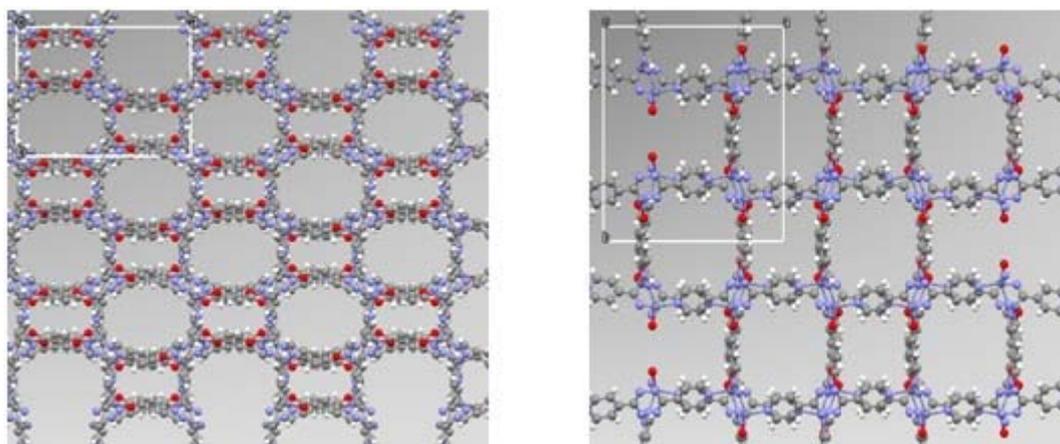
**A. A. García-Valdivia<sup>1</sup>, M. Pérez-Mendoza<sup>1</sup>, G. Mínguez-Espallargas<sup>2</sup>, J. Cepeda<sup>3</sup> y A. Rodríguez-Diéguez<sup>1</sup>**

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

<sup>2</sup>*Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), Universidad de Valencia, c/ Catedrático José Beltrán, 2, 46980 Paterna*

<sup>3</sup>*Departamento de Química Aplicada, Universidad del País Vasco (UPV/EHU), 20018 San Sebastián, antonioandresgarval@correo.ugr.es*

Se han sintetizado 2 nuevos compuestos de coordinación tridimensionales de Zn basados en el ácido 1H-indazol-5-carboxílico y diferentes ligandos nitrogenados (4,4'-Bipiridina y 3,6-Di(4-piridilo)-1,2,4,5-tetrazina). Su estructura viene definida por la coordinación al metal de 2 moléculas de ácido y 1 molécula de ligando nitrogenado formando las estructuras de la Figura 1. Los compuestos muestran unas buenas capacidades luminiscentes y adsorbentes.



**Figura 1.** Perspectiva de ambos compuestos desde el eje *C* cristalográfico. A la Izquierda el compuesto con 4,4-bipiridina. A la derecha el compuesto con 3,6-Di(4-piridilo)-1,2,4,5-tetrazina.

*Agradecimientos:* Junta de Andalucía por el Proyecto (FQM-1484).

## CARACTERIZACIÓN DE LA ENZIMA INMOVILIZADA HISTIDÍN AMONIO LIASA DE *Geobacillus kaustophilus*

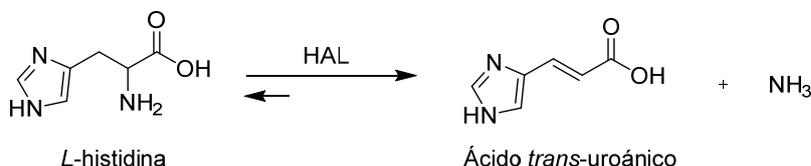
**A. Hernández-Zanoletty, J. M. Clemente-Jiménez, F. J. Las Heras-Vázquez y F. Rodríguez-Vico**

*Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales,  
Universidad de Almería,  
CP 04120 Almería (España); alba.zanoletty@gmail.com*

La biocatálisis moderna exige enzimas robustas, eficientes y reutilizables, estas características las convertirán en auténticos biocatalizadores desde el punto de vista industrial. Una estrategia para conseguir este fin es la inmovilización de proteínas. Este proceso consiste en la localización total o parcial de una enzima en un soporte, de forma que el biocatalizador retiene la actividad catalítica durante varios ciclos de reutilización. El objetivo principal de la inmovilización es conseguir la mayor interacción posible entre la enzima y el soporte con la menor pérdida de actividad.<sup>1</sup>

Se ha purificado y caracterizado la enzima recombinante histidín amonio liasa de *Geobacillus kaustophilus* (*GkHAL*) y se ha inmovilizado utilizando varios soportes comerciales. Esta enzima es una de las transaminasas que participan en la degradación de L-histidina a glutamato.<sup>2</sup> Esta degradación se lleva a cabo según la reacción de la Figura 1, dando lugar a ácido *trans*-urocánico y NH<sub>3</sub>, estando la reacción muy desplazada hacia la formación del ácido.

**Figura 1.** Reacción propuesta para la enzima HAL con los intermedios de reacción L-histidina y ácido *trans*-urocánico.



Se han estudiado hasta 12 soportes de inmovilización (10 soportes de partícula y 2 de membrana) para inmovilizar la enzima *GkHAL*, determinándose que los mejores soportes son IB-350, IB-150-P e IB-A171. Se han puesto a punto las condiciones de inmovilización de *GkHAL* y medida de actividad de estos tres soportes, evidenciándose una elevada estabilidad térmica tras 1 hora de incubación.

También se han determinado las constantes cinéticas  $K_m$  (0,84 mM),  $V_{m\acute{a}x}$  (0,07  $\mu\text{mol}\cdot\text{min}^{-1}$ ), actividad específica (0,34  $\mu\text{mol}\cdot\text{min}^{-1}\cdot\text{mg}^{-1}$  de proteína),  $K_{cat}$  ( $7,80\cdot 10^{-4}$  s<sup>-1</sup>) y eficiencia catalítica ( $9,20\cdot 10^{-4}$  mM<sup>-1}\cdot\text{s}^{-1}) en el soporte IB-350 para *GkHAL* inmovilizada.</sup>

Con el fin de evaluar si *GkHAL* inmovilizada ha sufrido cambios o variaciones de actividad, se comparan los parámetros cinéticos y las condiciones óptimas de reacción de ésta frente a *GkHAL* libre, verificando que la enzima *GkHAL* inmovilizada mejora los parámetros de  $K_m$  y actividad específica, y presenta una ventaja muy importante como biocatalizador industrial, ya que puede ser reutilizada durante 52 ciclos de actividad, mientras que la enzima *GkHAL* libre permite un solo uso.

<sup>1</sup> Arroyo, M.; "Inmovilización de enzimas. Fundamentos, métodos y aplicaciones", *Ars. Pharm.*, **1998**, 39, 12-39.

<sup>2</sup> Seff, A.; Pilbák S.; Silaghi-Dumitrescu, I.; Poppe, L. "Computational investigation of the histidine ammonia-lyase reaction: a modified loop conformation and the role of the zinc (II) ion". Springer-Verlag, **2010**, 17, 1551–1563.

## ¿ES POSIBLE ENCONTRAR MICOTOXINAS EN FRUTOS SECOS? DETERMINACIÓN MEDIANTE UHPLC-QqQ-MS/MS

**J. L. Hidalgo-Ruiz, R. Romero-González, J. L. Martínez-Vidal, A. Garrido-Frenich**

*Departamento de Química y Física, Área de Química Analítica, Universidad de Almería, Centro de Investigación en Agrosistemas Intensivos Mediterráneos y Biotecnología Agroalimentaria (CIAIMBITAL), Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario (ceiA3), Carretera de Sacramento s/n,*

*C.P.: 04120 Almería, España; \*jhr228@ual.es, Tel: +34-950-214-720*

Las micotoxinas son metabolitos secundarios producidos por diversas especies de mohos y hongos que pueden aparecer en alimentos en determinadas condiciones de humedad y temperatura. Entre ellas se encuentran las aflatoxinas, producidas por la especie *Aspergillus*<sup>1</sup>. Todas ellas son tóxicas tanto para las células humanas como para las células animales, y según la Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura (FAO), que estima que más del 25% de todos los productos agrícolas están contaminados con micotoxinas, no debe haber una cantidad de ellas en un producto alimenticio mayor que 15 µg/kg. Los frutos secos se contaminan fácilmente con micotoxinas debido a determinadas condiciones climatológicas, como elevada temperatura, humedad relativa y precipitaciones, por lo que resulta de interés disponer de métodos de análisis validados para su determinación.

En el presente estudio se propone un método analítico basado en la extracción de las micotoxinas  $\alpha$ -zearalenol ( $\alpha$ -ZOL) y zearalenona (ZEA), y las aflatoxinas B1, B2, G1 y G2 en cinco variedades de frutos secos (almendra, avellana, cacahuete, nuez y pistacho) mediante un método QuEChERS (acrónimo inglés de *quick, easy, cheap, effective, rugged and safe*)<sup>2</sup>. El análisis del extracto obtenido se realiza mediante cromatografía de líquidos de ultra alta resolución acoplada a espectrometría de masas en tándem (UHPLC-MS/MS) con analizador de triple cuadrupolo (QqQ). Como matriz representativa se ha elegido cacahuete ya que es el que presenta un menor efecto matriz respecto al resto de matrices y además ofrece unos valores de recuperación entre 93 y 102% con valores de precisión en términos de RSD menores del 10% para todas las matrices evaluadas. El límite de detección alcanzado es de 0.5 µg/kg para las aflatoxinas B1, B2, G1 y G2 y de 1 µg/kg para  $\alpha$ -ZOL y ZEA. El método desarrollado tiene las ventajas de alta sensibilidad, precisión y selectividad. Dicho método se ha aplicado a muestras de frutos secos, detectándose aflatoxina G2 en la mayoría de ellas.

<sup>1</sup> M. L. Martins, H.M. Martins and F. Bernardo, *Food Addit. Contam.* **2001**, *18*, 315–319.

<sup>2</sup> A. Garrido-Frenich, J. L. Martínez-Vidal, R. Romero-González, R. and M. del M. Aguilera-Luiz, *Food Chem.* **2009** *117*, 705–712

## MONITORIZACIÓN, MEDIANTE UHPLC-MS/MS, DE PIPERACILINA Y TAZOBACTAM EN SOLUCIONES SALINAS EN BOLSA DOBLE EMPLEADAS PARA PERFUSIÓN INTRAVENOSA

**M. López-García<sup>1</sup>, A. L. Fuentes-Colmenero<sup>2</sup>, R. Romero-González<sup>1</sup>,  
M. C. Olvera-Porcel<sup>3</sup>, A. Garrido-Frenich<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Grupo de Investigación “Química Analítica de los Contaminantes”, Departamento de Química y Física, Centro de Investigación en Biotecnología Agroalimentaria (BITAL), Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentaria, ceiA3, E-04120 Almería

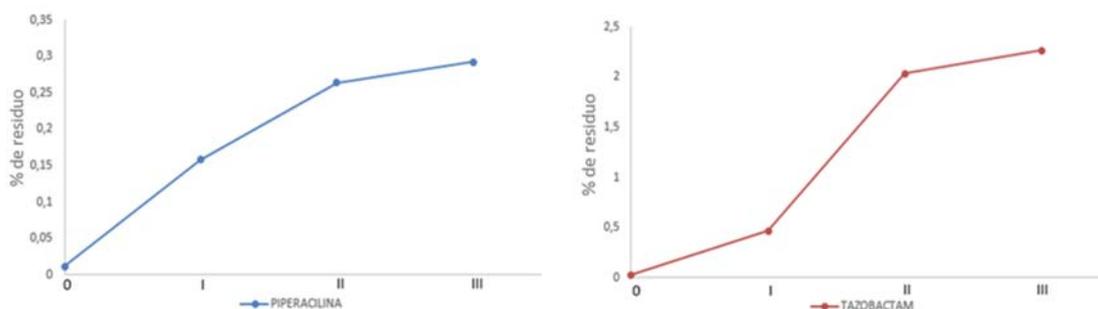
<sup>2</sup>Complejo Hospitalario Torrecárdenas, Almería

<sup>3</sup>Fundación para la Investigación Biosanitaria de Andalucía Oriental (FIBAO)

\*mlg169@inlumine.ual.es, Tel: 950214720, Fax: 950015985

Algunos de los fármacos intravenosos (IV) más usados en 2016 fueron amoxicilina, ácido clavulánico, piperacilina, tazobactam y metamizol. Piperacilina 4g/Tazobactam 0,5g IV se emplea como medicamento en varias enfermedades cada 6, 8 o 12 horas diluido en solución salina 0,9% alojada en bolsa simple. Sin embargo, el diseño actual de bolsa simple no incorpora la función de limpieza, y se puede perder la dosis correcta que el paciente debe recibir, por lo que se ha desarrollado un prototipo de bolsa doble para la administración de fármacos. Esta ha sido protegida industrialmente por la patente nacional concedida ES1106455 y con la publicación internacional de referencia WO/2015/110685. La bolsa consta de dos cámaras: una para almacenar la dilución del fármaco y la otra para lavar el equipo de infusión con 30 mL de solución salina al 0,9 %.

El objetivo principal del presente trabajo es determinar la presencia de piperacilina y tazobactam en el contenido que queda alojado dentro del equipo de infusión IV tras el uso de la bolsa doble con 30 mL de solución salina al 0,9% en la cámara de lavado, mediante cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS). Se ha usado el equipo de infusión IV constituido por tres dispositivos diferentes (I, II y III) siendo el punto 0 el adyacente a la cámara de goteo. Para este estudio, se analizaron cinco muestras en las mismas condiciones de uso con los pacientes. El contenido de cada dispositivo se ha analizado mediante LC-MS/MS. La Figura 1 muestra los resultados obtenidos en los dispositivos probados para piperacilina y tazobactam. Como se puede observar, los residuos de los fármacos aumentan del punto 0 al sistema III, existiendo diferencias estadísticamente significativas entre el punto 0 vs II ( $p < 0,001$ ) y 0 vs III ( $p < 0,001$ ).



**Figura 1.** Porcentaje de los residuos de Piperacilina y Tazobactam en los sistemas evaluados.

*Acknowledgements.* Los autores agradecen al Instituto de Salud Carlos III y a los fondos FEDER por su financiación en el proyecto DTS16/00077.

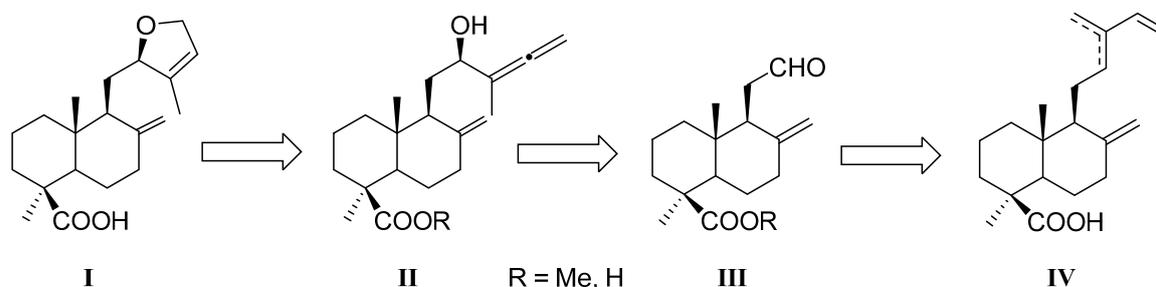
## STEREOSELECTIVE AND CONCISE SYNTHESIS OF A NATURAL DIHYDROFURANIC LABDANE FROM *Platycladus orientalis*

**J. L. López-Martínez, R. Martínez-Martínez, I. Torres-García, M. Álvarez-Corral, M. Muñoz-Dorado, I. Rodríguez-García**

*Organic Chemistry, Faculty of Experimental Sciences, ceiA3, University of Almería  
E04120 Almería (Spain); pepaloma91@hotmail.com*

The development of new synthetic strategies is essential for the progress in the total synthesis of natural products, which consistently holds among the leading areas of research. Advances in this field have an immediate impact on a vast range of compounds with applications in the medical, agrochemical and materials industry.<sup>1</sup>

Terpenoids with labdane skeleton are a type of natural product with many notorious representatives for their applications in the perfumery industry or for their biological activities.<sup>2</sup> The present work shows the synthesis of a natural dihydrofuranic labdane (**I**) using as raw material a mixture of communic acids (**IV**), readily available from juniper's berries.



**Scheme 1.** Retrosynthetic scheme of the formal and total synthesis of the natural product **I**.

In this way, we have achieved the synthesis of **I** by means of new synthetic strategy recently developed by our research group based in two key steps: Silver (I) catalyzed cyclization of the allenol **II** and CpTi<sup>III</sup>Cl<sub>2</sub> mediated allenylation of aldehyde **III** through Barbier type reaction with a propargyl halide. We have proved that the synthesis can be performed in good yields either with the ester derivatives or the free acids, and that the Ti(III) system is compatible with both functional groups. In addition, the process is highly stereoselective, as the Ti(III) reaction in which the extra chiral center present in **I** is formed shows high diastereoselectivity.

In conclusion, the new strategy here described allows for the preparation of the natural product **I** in only 3 steps, a significant improvement over the 4 steps strategy previously described by Mack *et al.*<sup>3</sup>

*Acknowledgements.* We thank "Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3" and "Ministerio de Economía y Competitividad" (Project CTQ2015-70724-R) for financial support.

<sup>1</sup> Baran, P. S., Natural Product Total Synthesis: As Exciting as Ever and Here To Stay. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140* (14), 4751-4755.

<sup>2</sup> Demetzos, C.; Dimas, K. S., Labdane-type diterpenes: Chemistry and biological activity. In *Studies in Natural Products Chemistry*, Atta ur, R., Ed. Elsevier: 2001; Vol. 25, pp 235-292.

<sup>3</sup> Mack, D. J.; Njardarson, J. T. "Syntheses and Structural Confirmations of Members of a Heterocycle-Containing Family of Labdane Diterpenoids" *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 1543-1547.



## CATALYTIC ISOMERIZATION OF 2-CYCLOHEXEN-1-OL MEDIATED BY $[\text{RuClCp}(\text{PTA})_2]$ AND $[\text{RuCp}(\text{PTA})_2(\text{H}_2\text{O}-\kappa\text{O})](\text{CF}_3\text{SO}_3)\cdot 3.5\text{H}_2\text{O}$ .

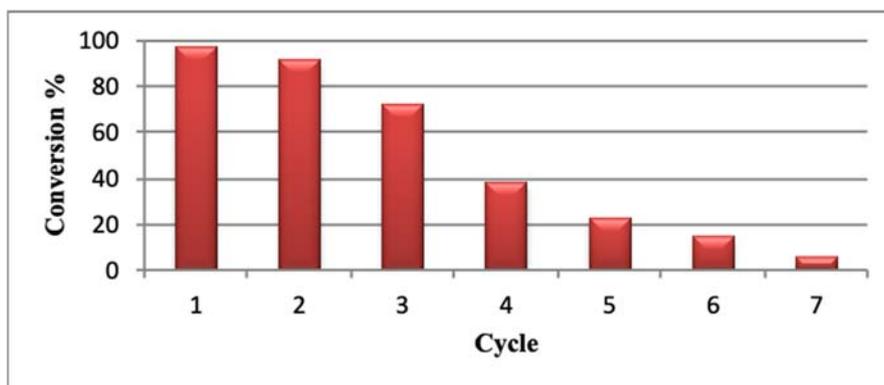
**B. López, F. Scalambra and A. Romerosa**

*Department of Inorganic Chemistry-CIESOL, Faculty of Experimental Sciences,  
Universidad de Almería,  
E04120 Almería (Spain); belenlopezs1993@gmail.com*

The isomerization of allylic alcohols is constituted by a sequence of oxidation and reduction steps, which usually implicates high reaction temperatures and toxic reactants and solvents. All these inconvenient could be avoid by catalytic processes mediated by metal catalyst<sup>1,2</sup> The catalytic isomerization of secondary allylic alcohols has an additional industrial potential as there are a large number of natural allylic alcohols that could be transform by a simple and safe catalytic process into economical relevant chemicals. Some years ago, our group has shown that complexes  $[\text{RuClCp}(\text{PTA})_2]$  (**1**) and  $[\text{RuCp}(\text{PTA})_2(\text{H}_2\text{O}-\kappa\text{O})](\text{CF}_3\text{SO}_3)\cdot 3.5\text{H}_2\text{O}$  (**2**) can catalyze the isomerization of linear allylic alcohols from 3-buten-2-ol to 1-octen-3-ol in water and under mild conditions. This study revealed that the presence of water in the medium is important to achieve a large yield isomerization conversion<sup>3</sup>

In this communication, we present the redox isomerization of the cyclic allylic alcohol 2-cyclohexenol into cyclohexanone mediated by **1** and **2**. Both complexes catalyze this isomerization under mild conditions (70°C) in water and biphasic media. Complex **2** showed to overcome the highest TONs found in bibliography for this reaction, both in water (TON= 647) and biphasic of cyclohexene/water (TON=3420 after 6 recycles) (Figure 1), while **1** showed a lower but also good activity. The reaction intermediate  $[\text{RuCp}(\text{PTA})_2(\eta^2\text{-C}_6\text{H}_9\text{OH})]\text{CF}_3\text{SO}_3$  (**3**) was synthesized and characterized by NMR<sup>4</sup>.

**Figure.1.** Isomerization of 2-cyclohexenol catalyzed by **2** in biphasic ( $\text{H}_2\text{O}/\text{cyclohexane}$  1:1), at 70 °C,  $[\text{Ru}]$  0.1 mol%, 3 h per cycle) in successive recycling runs.



*Acknowledgements.* Thanks are given to European Commission FEDER, Projects CTQ2015-67384-R (MINECO), PAI group FQM-317 (Junta de Andalucía) and COST Action CM1302 (WG1, WG2).

<sup>1</sup> R. Uma, C. Crévisy and R. Grée, *Chem. Rev.*, **2003**, *103*, 27-51.

<sup>2</sup> V. Cadierno, P. Crochet and J. Gimeno, *Synlett*, **2008**, *8*, 1105-1124.

<sup>3</sup> M. Serrano-Ruiz, P. Lorenzo-Luis, A. Romerosa and A. Mena-Cruz, *Dalton Trans.*, **2013**, *42*, 7622.

<sup>4</sup> F. Scalambra, B. López-Sánchez And A. Romerosa, *Dalton Trans.*, **2018**, Advance Article. DOI: 10.1039/C8DT02560F

## RAPID AND SENSITIVE DETERMINATION OF ANTIBIOTICS IN URBAN WASTEWATER EFFLUENTS BY DIRECT INJECTION LC-MS/MS

**A. Lorenzo, P. Plaza-Bolaños, M. M. Simón-Lucas, J. A. Sánchez-Pérez, A. Agüera**

*Solar Energy Research Centre (CIESOL), Joint Centre University of Almería-CIEMAT, 04120, Almería, Spain; ana.lorenzo@ual.es*

A rapid and sensitive multiresidue method based on direct injection (DI) was developed for the determination of 29 antibiotics in urban wastewater effluents (WWE) using liquid chromatography coupled to hybrid quadrupole linear ion trap mass spectrometry (LC-QqLIT-MS/MS). The optimized method was very simple, involving only a sample filtration (0.22  $\mu\text{m}$ ) and an injection volume of 40  $\mu\text{L}$ .

The use of various calibration matrices (urine<sup>1</sup>, simulated WW) was evaluated in order to avoid the problems associated to the absence of WWE blank samples and the high cost of isotope-labelled standards used in quantitative analysis. Diluted urine (1:50, v/v) was selected as the best option because of its similarity with WWE in terms of matrix effect. Even so, the proposed method was validated in both WWE and diluted urine (1:50, v/v) for comparison purposes.

Adequate validation parameters were obtained for linearity ( $R^2 > 0.99$ ) in the range of 0.1-10000  $\text{ng L}^{-1}$  (except for amoxicillin, cefalexin and cefotaxime, 1-100000  $\text{ng L}^{-1}$ ); recovery (60 - 120%) and inter and intra-day precision (expressed as relative standard deviation (RSD),  $\leq 25\%$ ). Limits of detection (LOD) and quantification (LOQ) were in the range 0.1 – 40  $\text{ng L}^{-1}$  and 0.4 – 70  $\text{ng L}^{-1}$  respectively, except for amoxicillin, ciprofloxacin, nalidixic acid, levofloxacin and cefalexin which ranged from 70  $\text{ng L}^{-1}$  (nalidixic acid) to 1000  $\text{ng L}^{-1}$  (amoxicillin) and from 100  $\text{ng L}^{-1}$  to 4000  $\text{ng L}^{-1}$ , respectively.

The validated method was successfully applied to the analysis of a total of 28 urban WWE samples from three wastewater treatment plants (WWTP) in Almería (South-eastern Spain), one of them receiving inputs from a nearby hospital. The most frequently detected antibiotics were ciprofloxacin, clarithromycin, clindamycin, erythromycin, levofloxacin and sulfamethoxazole in the range of 10  $\text{ng L}^{-1}$  (erythromycin) – 8046  $\text{ng L}^{-1}$  (ciprofloxacin), with high occasional discharges of chlortetracycline, norfloxacin and sulfadiazine in the range of 1212 – 4049  $\text{ng L}^{-1}$ .

These results demonstrate the low efficiency of the monitored WWTPs to remove antibiotics and the release of relatively high concentrations of these compounds to the environment.

*Acknowledgement:* The Ministry of Economy and Competitiveness of Spain (CTQ2016-78255-R) is gratefully acknowledged for the financial support. P.P.B. acknowledges University of Almería for her PhD research contract (Hipatia Program).

<sup>1</sup> J. Rossmann, S. Schubert, R. Gurke, R. Oertel, W. Kirch, J. Chromatogr. B. 969 (2014) 162–170

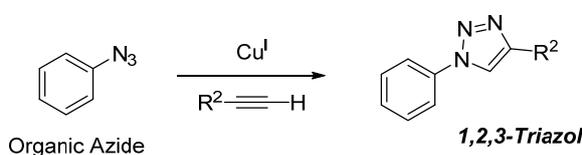
## NEW FRONTIERS IN CLICK CHEMISTRY: PHOSPHONIC DIAMIDES AS *ORTHO*-DIRECTOR GROUPS FOR THE SYNTHESIS OF 5-TRIAZENYL-1,2,3-TRIAZOLES

Y. Navarro, M. J. Iglesias and F. López-Ortiz

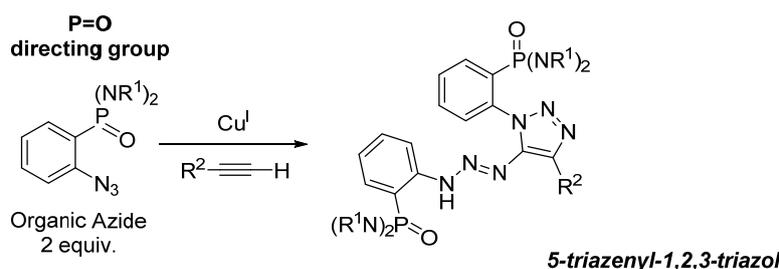
*Área de Química Orgánica, Centro de Investigación CIAIMBITAL, Universidad de Almería, Carretera de Sacramento s/n, 04120 Almería, España; yng453@ual.es*

The copper(I)-catalyzed azide-alkyne cycloaddition (CuAAC), is a prototypical example of the processes known as “click chemistry”. It is a very useful tool in organic chemistry for the construction of 1,2,3-triazoles due to the high efficiency, reliability and broad scope of the procedure.<sup>1</sup> This reaction enables the synthesis of 1,4-disubstituted 1,2,3-triazoles with very high selectivity. However, the CuAAC synthesis of fully substituted 1,2,3-triazoles remains a challenge. This scaffold has a widespread occurrence in different compounds characterized by several bioactivities and properties, such as anticancer, anti-inflammatory, antihemolytic, antimalarial, biomarkers, anion recognition, or photoluminescence.<sup>2</sup> In this work, we describe a novel synthetic method for the synthesis of 5-triazenyl-1,2,3-triazoles in good to excellent yields and under mild reaction conditions. In this process, the presence of the P=O group of a phosphonic diamide in the ortho position of the aromatic azide results crucial. This polar moiety coordinates Cu(I) enabling a tandem reaction of two azide molecules with one terminal alkyne, giving access to 4,5-disubstituted 1,2,3-triazoles with excellent regioselectivity. Moreover, the reaction proceeds efficiently with a wide variety of aliphatic and aromatic alkynes bearing either electron-donating or electron-acceptor substituents.

### CLICK CHEMISTRY



### THIS WORK



*Acknowledgements.* We thank the MICINN and FEDER program for financial support (project: CTQ2014-5715P). YNG thanks MECO for a FPU predoctoral fellowship.

<sup>1</sup> (a) C. W. Tornøe, C. Christensen, M. Meldal, *J. Org. Chem.* **2002**, *67*, 3057-3054. (b) V. Rostovtsev, L. G. Green, V. V. Fokin, K. B. Sharpless, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2002**, *41*, 2596-2599.

<sup>2</sup> (a) B. R. Mullaney, A. L. Thompson, P. D. Beer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 11458-11462. (b) S. W. Robinson, C. L. Mustoe, N. G. White, A. Brown, A. L. Thompson, P. Kennepohl, P. D. Beer, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 499-507. (c) C. Wang, D. Abegg, D. G. Hoch, A. Adibekian, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 2911-2915. (d) R. Kumar, V. Sharma, S. Bua, C. T. Supuran, P. K. Sharma, *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* **2017**, *32*, 1187-1194. (e) B. Sarkar, L. Suntrup, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 8938-8940.

## NUEVOS IMANES MONONUCLEARES MULTIFUNCIÓNALES CON PROPIEDADES ANTIDIABÉTICAS Y ANTIINFLAMATORIAS BASADOS EN COBALTO

**A. Navas<sup>1</sup>, B. Fernández<sup>2</sup>, J. Cepeda<sup>3</sup>, José M. Seco<sup>3</sup>, José L. Quiles<sup>4</sup>, C. Sánchez<sup>4</sup>,  
J. Llopis<sup>4</sup>, F. Reyes-Zurita<sup>5</sup>, M. Medina<sup>5</sup> y A. Rodríguez-Diéguez<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071 Granada (España)*

<sup>2</sup>*Instituto de Parasitología y Biomedicina "López-Neyra", CSIC, Av. Conocimiento, 18600 Granada, España*

<sup>3</sup>*Departamento de Química Aplicada, Facultad de Química, Universidad del País Vasco, San Sebastián, España*

<sup>4</sup>*Departamento de Fisiología, Facultad de Farmacia, Campus Universitario de Cartuja, 18071, Granada, España*

<sup>5</sup>*Departamento de Bioquímica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071 Granada, España.*

*arturosantafe@correo.ugr.es*

Se buscaba era sintetizar compuestos de coordinación multifuncionales con propiedades de imán, propiedades anti-inflamatorias y anti-diabéticas. Para ello, se utilizaron ligandos (agentes terapéuticos) con los que hay muy pocos ejemplos de compuestos de coordinación sintetizados, y metales con gran anisotropía, consiguiendo así materiales multifuncionales con diferentes aplicaciones biomédicas. Estos compuestos presentan estructuras mononucleares y muestran relajación lenta de la magnetización bajo un campo aplicado. En cuanto a las propiedades antidiabéticas, los resultados demuestran que estos compuestos reducen el contenido de glucosa en los nematodos *C. Elegans* en los que se realizaron los ensayos. También se realizaron ensayos antiinflamatorios en macrófagos RAW 264.7 estimulados con lipopolisacáridos mediante la inhibición de la producción de óxido nítrico (NO). Estos ensayos se realizaron bajo concentraciones sub-citotóxicas de los compuestos de coordinación (y los ligandos sin formar complejo), para garantizar que el posible efecto antiinflamatorio se debiera exclusivamente a sus propiedades antiinflamatorias y no a sus efectos citotóxicos. Hay que destacar que el complejo metálico con indometacina fue capaz de inhibir la producción de NO hasta en un 35% de una manera dependiente de la concentración sin mostrar citotoxicidad. El análisis del ciclo celular se determinó mediante citometría de flujo con tinción con yoduro de propidio, y se demostró que la inhibición de la producción de NO iba acompañado de una reversión de los procesos de diferenciación en células RAW 264.7 estimuladas con LPS, debido a una disminución del porcentaje de células en la fase G0 / G1, con el correspondiente aumento en el número de células en la fase S. Ambos compuestos muestran actividad antidiabética con baja toxicidad celular in vitro. Concluimos que la formación de complejos metálicos con ligandos bioactivos es una nueva y prometedora estrategia para encontrar nuevos compuestos con propiedades bioquímicas altas y mejoradas y, debido a que hay estudios sobre los beneficios de los agentes antidiabéticos con propiedades antiinflamatorias en la glucemia y la resistencia a la insulina, la búsqueda de materiales multifuncionales con esta dualidad biológica promete ser un campo de gran interés.

*Acknowledgements.* Junta de Andalucía, FQM-1484.

## PLEGAMIENTO ANÓMALO DE PROTEÍNAS QUIMERA DEL DOMINIO SH3: TIROSINAS QUINASA C-SRC Y FYN

**M. Plaza-Garrido, M. Salinas-García, y A. Cámara-Artigas**

*Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales, ceiA3, CIAIMBITAL, Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain); marina.plaza.garrido@gmail.com*

Debido al aumento en la esperanza de vida en los últimos años las enfermedades neurodegenerativas, como por ejemplo la enfermedad del Alzheimer, se han convertido en un importante problema de salud en los países desarrollados. Algunas de estas enfermedades son causadas por plegamientos anómalos de proteínas, los cuales están asociados al desarrollo de depósitos de fibras amiloides. El estudio de estos procesos es complicado debido a las dificultades para obtener información estructural a nivel atómico de las mismas. Sin embargo, algunas de las proteínas que forman fibras amiloides también forman oligómeros entrecruzados que sí se pueden cristalizar. Este proceso de oligomerización se produce por el intercambio de elementos de la estructura secundaria entre dos cadenas polipeptídicas distintas (protómeros) y puede resultar en la formación de dímeros, trímeros, etc<sup>1</sup>. Intentar comprender dicho fenómeno es importante ya que el mecanismo por el cual la proteína se abre para formar estos oligómeros puede ser común al que sufre en los primeros estadios de formación las fibras amiloides. Un modelo para el estudio de estos fenómenos de plegamiento anómalo y agregación es el dominio SH3 de la c-Src tirosina quinasa, el cual puede formar tanto un dímero entrecruzado como fibras amiloides. Estudios previos realizados por nuestro equipo de trabajo han demostrado que la formación de este tipo de estructuras es dependiente del pH y además es sensible a algunas mutaciones puntuales<sup>2</sup>. Nuestro grupo ha clonado, expresado y purificado proteínas quimeras del dominio SH3 de las tirosinas quinasas c-Src y Fyn, donde los lazos RT y n-Src de cada dominio han sido intercambiados<sup>3</sup>. En la proteína c-Src SH3 el lazo n-Src actúa como una bisagra que facilita la apertura del dominio para formar el oligómero entrecruzado. Hemos estudiado la estabilidad de estas proteínas frente al pH (en un rango de 10-14.0) y en presencia de un desnaturalizante químico como el cloruro de guanidinio, observando que son estables en un amplio rango de pH (pH 5.0-11.0). También, se ha realizado un estudio del estado de oligomerización de las mismas mediante la técnica de dispersión dinámica de la luz, determinando que la formación del dímero se ve favorecida a pHs ácidos mediante la adición de PEGs de bajo peso molecular. Hemos llevado a cabo un cribado de las condiciones de cristalización a diferentes pHs y en presencia de aditivos. En este trabajo presentamos la caracterización biofísica preliminar de estas proteínas y sus estructuras determinadas a varios valores de pH y estados de oligomerización. Los resultados obtenidos muestran que además de los residuos en el lazo bisagra, algunos residuos presentes en el lazo distal pueden jugar un papel fundamental en la apertura del protómero para formar los oligómeros entrecruzados.

*Agradecimientos.* Esta investigación la ha realizado el grupo de investigación PAI BIO328 Estructura de Proteínas que cuenta además con financiación del proyecto MINECO y FEDER (EU) [BIO2016-78020-R]. La toma de datos ha sido financiada por una beca BAG de ALBA, Barcelona, España, (012010072, 2012100378, 2013100658, 2014070982, 2015071316 y 2016091824) y ESRF, Grenoble, Francia, (MX1225, MX1406, MX1541, MX1629, MX1830).

<sup>1</sup> Camara-Artigas, A. *Arch Biochem Biophys.* **2016**, *602*, 116-126.

<sup>2</sup> Bacarizo, J., et al. *PLoS One.* **2014**, *9(12)*, 113-224.

<sup>3</sup> Camara-Artigas, A., et al. *FEBS Lett.* **2009**, *2009583(4)*, 749-53.

## UNTARGETED NMR-BASED METHODOLOGY IN THE STUDY OF DIFFERENT VARIETIES AND RIPENING STAGES OF MELON (*Cucumis melo* L.)

**A. C. Abreu, A. Tristán, L. M. Aguilera-Sáez and I. Fernández\***

*Department of Chemistry and Physics, Research Centre CIAIMBITAL, Universidad de Almería, Ctra. Sacramento, s/n, Almería, E-04120 (Spain); acabreu@ual.es*

The province of Almería has favorable climatic conditions for agriculture, such as mild temperature in winter, little thermal difference between seasons and winds that favor the elimination of humidity and, probably the most important one, high solar radiation (3000-3600 h/year). In Almería, an area of 2,042 hectares (campaign 2017/2018) is devoted to the cultivation of melon (*Cucumis melo* L.). Flavor plays a fundamental role in melon quality as it determines consumer acceptance and is mainly determined by the interaction between sugars, organic acids, amino acids, fatty acids, mineral salts and by volatile components, which give the melon its characteristic smell. The metabolome of the melon highly depends on the variety, environmental conditions and ripening stage.

NMR metabolomics is now becoming a very important tool in the agri-food sector, since it allows to investigate deeply the biochemical composition of the fruits and assess their quality and safety. This study aimed to characterize the metabolome of two different varieties of round melon (variety X01 and variety X02)<sup>1</sup>, from the province of Almería, harvested on July-August 2018) at 3 different ripening stages. Freeze-fried melon samples were extracted using two solvent systems: (1) CH<sub>3</sub>OH-*d*<sub>4</sub> and phosphate D<sub>2</sub>O buffer solution at pH 7 in 50:50 (v/v) ratio; (2) CH<sub>3</sub>OH-*d*<sub>4</sub> and CDCl<sub>3</sub> in 20:80 (v/v) ratio. <sup>1</sup>H NMR spectra were recorded at 293 ± 0.1 K on a Bruker Avance III 600 spectrometer operating at a proton frequency of 600.13 MHz using a 5 mm QCI quadruple resonance pulse field gradient cryoprobe. In addition, the antioxidant capacity of melon extracts was measured by ORAC (Oxygen radical absorption capacity) method. Finally, several techniques of multivariate analysis of data were applied to NMR data for the identification of the characteristic metabolites of each species and ripening stage.

We report herein that during the ripening process, a decrease on the amounts of glucose and fructose was observed for both melon varieties, accompanied by a large increase on sucrose (responsible for the sweetness perception of the fruit). Moreover, decreases on organic acids (citrate), amino acids (citrulline, glutamate, glutamine, methionine, phenylalanine, tyrosine) and trigonelline were observed as well. Mature melons also showed higher amounts of fatty acids (linoleic, oleic, palmitic, stearic, linolenic), and carotenoids. Concerning the difference between both varieties, the variety X01 was always richer in sucrose (thus, sweeter), while the variety X02 contained more glucose and fructose. Moreover, amino acids content varied: variety X01 had more citrulline, glutamate, glutamine and methionine, whereas variety X02 increased its content in tyrosine and phenylalanine. Citrate, the major organic acid, increased on variety X02. The content of fatty acids is the same for both varieties. Finally, the variety X02 showed more antioxidant capacity, which was positively correlated to an increase on polyphenols. The identification of such compounds is currently undergoing. On the contrary, the content on carotenoids was higher for variety X01.

*Acknowledgements.* This research has been funded by the National R+D+i Plan project number CTQ2017-84334-R of the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities and by the Junta de Andalucía project number P12-FQM-2668.

<sup>1</sup> Due to confidential issues, this information is not be revealed.

## BASE-CATALYZED HYDROSILYLATION OF CARBONYLS MEDIATED BY A LITHIUM-HYDRAZONE COMPLEX

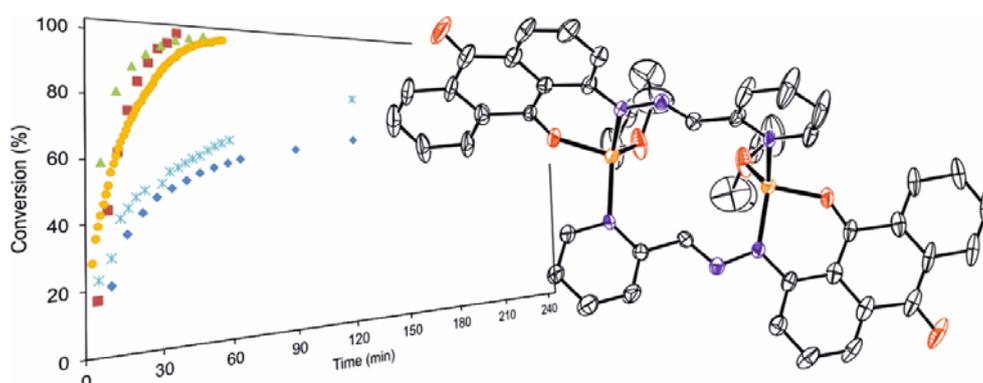
**A. Raya-Barón<sup>a</sup>, P. Oña-Burgos<sup>b</sup>, J. Mercader-Rueda<sup>a</sup>, A. Rodríguez-Diéguez<sup>c</sup>, I. Fernández<sup>a,\*</sup>**

<sup>a</sup> Dept. of Chemistry and Physics, CIAIMBITAL, University of Almería, 04120 Almería

<sup>b</sup> Instituto de Tecnología Química, UPV-CSIC, Avda. de los Naranjos s/n, 46022 Valencia

<sup>c</sup> Dept. of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, University of Granada, 18071 Granada  
arb082@ual.es

A well-defined lithiated hydrazone derivative has been synthesized and fully characterized through various analytical platforms, including multinuclear ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^7\text{Li}$ ) and two-dimensional NMR, high-resolution MS spectrometry, IR, and X-ray diffraction crystallography. It behaves as a binuclear species in the solid state and as a monomeric contact ion pair in solution. It has also been tested as a catalyst in hydrosilylation reactions, being the first lithium hydrazone reported to catalyze the full conversion of carbonyls of different nature into alcohols in short reaction times, at room temperature, and with catalyst loadings equal to or below 0.5 mol %. Kinetic studies have proven fractional order dependences with respect to ketone and silane and first order dependence in the case of the catalyst. The proposed reaction mechanism is characterized by the nucleophilic addition of the lithium hydrazone to the silicon atom of the silane to give a five-coordinate silicon species.<sup>1</sup>



**Figure 1.** Kinetic profiles of some reductions catalyzed by our Li complex (left) and its X-ray structure (right).

*Acknowledgements.* This work was supported by Junta de Andalucía and MINECO (project numbers P12-FQM-2668 and CTQ2017-84334R, respectively). A. R-B. thanks University of Almería for a Ph.D. fellowship.

<sup>1</sup> A. Raya-Barón, P. Oña-Burgos, A. Rodríguez-Diéguez, I. Fernández, *Organometallics* **2018**, *37*, 2682-2689.

## DESARROLLO DE UN MÉTODO MEDIANTE CROMATOGRAFÍA DE LÍQUIDOS ACOPLADA A ESPECTROMETRÍA DE MASAS PARA LA SEPARACIÓN DE CALISTEGINAS A3, A5, B1, B2, B3, B4 Y C1 CON COLUMNA HILIC-ÁCIDA

**A. Romera-Torres, R. Romero-González, F. J. Arrebola-Liébanas,  
J. L. Martínez-Vidal, A. Garrido-Frenich**

*Departamento de Química y Física, Área de Química Analítica, Universidad de Almería, 04120 Almería (España); art291@ual.es*

En los últimos años ha ido creciendo el interés en metabolitos secundarios de plantas, sobre todo en aquellos que tienen o podrían tener aplicaciones médicas, como es el caso de las calisteginas. Estos compuestos fueron descubiertos en 1988 en *Calystegia sepium* y son alcaloides notropánicos polihidroxilados con una alta solubilidad en agua y polaridad. Debido a su similitud estructural con algunos azúcares, actúan como inhibidores de ciertas glucosidasas, siendo algunos de ellos potentes inhibidores de la  $\beta$ -glucosidase and  $\alpha$ -galactosidase.<sup>1</sup> Actualmente se conocen 14 calisteginas las cuales se agrupan en calisteginas A, B o C según posean 3, 4 ó 5 grupos hidroxilo respectivamente.<sup>2</sup>

Están presentes en varias familias de plantas, como Solanaceae, Convolvulaceae, Erythroxylaceae and Brassicaceae.<sup>3</sup> Debido a que un gran número de vegetales de consumo pertenecen a estas familias, el desarrollo de métodos de análisis es de gran interés. Considerando que los grupos hidroxilo varían tanto en posición como en estereoquímica y que las calisteginas pertenecientes a un mismo grupo tienen la misma fórmula molecular,<sup>4</sup> su separación cromatográfica ha sido todo un desafío.

En este trabajo se ha empleado la cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas de alta resolución con analizador Orbitrap (LC-HRMS, por sus siglas en inglés) para la determinación de las calisteginas A3, A5, B1, B2, B3, B4 y C1. Para la optimización cromatográfica se estudiaron diversas fases estacionarias, como C18, vancomycin, tris(5-cloro-2-metilfenilcarbamato) amilosa, amino e HILIC, siendo esta última la que mejor separación proporcionó. Por ello, tres fases estacionarias HILIC diferentes fueron probadas, HILIC-Básica, HILIC-Neutra e HILIC-Ácida. Por otro lado se evaluaron distintas composiciones de fase móvil, como acetonitrilo, metanol, 5 mM de acetato amónico en agua, 5 mM de formiato amónico en agua y 0.1% de ácido fórmico en agua.

Con el método optimizado se consiguió la separación de las 7 calisteginas (entre 12 y 22 min), usando acetonitrilo y 5 mM de acetato amónico en agua como fases móviles, sin embargo, se observó una precipitación de sales. Por ello, se probó con metanol y 5 mM de formiato amónico en agua, obteniéndose la misma separación y evitando la precipitación. La elución de los analitos se realizó en modo de elución de gradiente, con un flujo de 0.3 mL/min y en un tiempo total de análisis de 35 min.<sup>4</sup>

*Agradecimientos.* Los autores agradecen al MINECO y al FEDER (ref. CTQ2015-69899-R) el apoyo financiero recibido.

<sup>1</sup> B. Dräger, *Nat. Prod. Rep.*, **2004**, *21*, 211–223.

<sup>2</sup> N. Asano, *Mech. Ageing Dev.*, **2000**, *116*, 155–156.

<sup>3</sup> N. Asano, R. J. Nash, R. J. Molyneux and G. W. J. Fleet, *Tetrahedron: Asymmetry*, **2000**, *11*, 1645–1680



## INEXPENSIVE AND SCALABLE METHOD FOR THE SYNTHESIS OF NANOGRAFENE PATTERNS ON FLEXIBLE SUBSTRATES

**F.J. Romero<sup>1</sup>, A. Rivadeneyra<sup>1</sup>, A. Salinas<sup>2</sup>, D. P. Morales<sup>1</sup> and N. Rodriguez<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Pervasive Electronics Advanced Research Laboratory (PEARL), Department Electronics and Computer Technology, University of Granada, 18071 Granada (Spain);  
franromero@ugr.es; arivadeneyra@ugr.es; diegopm@ugr.es; noel@ugr.es*

<sup>2</sup>*Department of Analytic Chemistry, University of Granada, 18071 Granada (Spain);  
alfonsos@ugr.es*

Flexible and stretchable electronics is one of the most promising fields for diverse scientific and industrial areas such as electronic skin, wearables devices or biosensing<sup>1,2</sup>. In this way, there is a big emerging effort devoted to the synthesis of flexible conductive materials as an alternative to the conventional rigid silicon-based technology to satisfy the requirements of this kind of applications (flexibility, lightness, transparency, etc.). In this context, graphene has attracted the interest of many researchers due to its unique electrochemical, mechanical and optical properties<sup>3</sup>. However, although it is a perfect candidate for the use in flexible and stretchable electronics, these expectations have not been yet materialized into end-user applications since the current synthesis methods remain costly and unscalable<sup>4</sup>. For these reasons, the interest of some research activities around graphene is shifting to the graphene-derived materials which, even though they do not present a pristine monolayer structure, capitalize part of the unique graphene's properties and are paired with synthesis processes suitable for a mass-production of samples. Amongst all these materials, several works have demonstrated the potential of the reduced-Graphene-Oxide (rGO) in flexible electronics<sup>5,6,7</sup>. Nevertheless, most of these works are based on a chemical reduction of graphene oxide.

In this communication, we will present an inexpensive and scalable method to obtain flexible rGO sheets based on the laser assisted photothermal lithography of graphene oxide which, in addition to allow a high precision reduction without the use of masks and fine tuning of the conductivity of the samples, is compatible with the roll-to-roll techniques.

*Acknowledgements.* This work has been partially funded by the Spanish Ministry of Education, Culture and Sport (MECD) through the pre-doctoral grant FPU16/01451 and the National Excellence Research Project TEC2017-89955-P and by the Marie Curie Post-doctoral Research Fellowship H2020-MSCA-IF-2017.

<sup>1</sup> H. Jang, Y. Ju Park, X. Chen, T. Das, M.S. Kim, J.H. Ahn, *Adv. Mater.* **2016**, *28*, 4184–4202.

<sup>2</sup> Nathan et al., *Proceedings of the IEEE* **2012**, *100*, 1486–1517.

<sup>3</sup> M.J. Allen, V.C. Tung, R.B. Kaner, *Chem. Rev.* **2010**, *110*, 132–145.

<sup>4</sup> R. Bogue, *Sensor Review* **2014**, *34*, 233–238.

<sup>5</sup> K. Toda, R. Furue, S. Hayami, *Anal. Chim. Acta* **2015**, *879*, 43–53.

<sup>6</sup> X. Peng, L. Peng, C. Wu, Y. Xie, *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 3303–3323.

<sup>7</sup> G. Eda, G. Fanchini, M. Chhowalla, *Nat. Nanotechnol.* **2008**, *3*, 270–274.

## ESTUDIOS PRELIMINARES PARA LA PREPARACIÓN DE FORMULACIONES DE LIBERACIÓN CONTROLADA DE FÁRMACOS SOLUBLES EN AGUA

**L. Ruedas-Calvo, M. Villafranca-Sánchez, M Fernández-Pérez, F. Flores-Céspedes**

*Departamento de Química y Física, Centro de Investigación CIAIMBITAL  
Universidad de Almería, Ctra. de Sacramento s/n  
E04120 Almería (España); luis\_ruedas1990@hotmail.com*

En las últimas décadas son numerosas las tecnologías basadas en hidrogeles desarrollados para aplicaciones biomédicas, incluyendo estas la administración controlada de fármacos. En este estudio, se han preparado diferentes hidrogeles de alginato modificados con etilcelulosa y carbón activado mediante un método de gelificación ionotrópica para la liberación controlada de 5-fluorouracilo (5-FU), usado como fármaco modelo.

Se han estudiado las características morfológicas, estructurales y térmicas de los gránulos obtenidos, así como la capacidad de absorción de agua y el perfil de liberación de 5-FU. La adición de carbón activado mejora la eficiencia de encapsulación y ralentiza la liberación del 5-FU en disolución. Esto indica que el carbón activado puede ser un modificador efectivo para ajustar las propiedades de hinchamiento, mecánicas y el perfil de liberación de los gránulos de alginato.

## SÍNTESIS DE COMPUESTOS DE COORDINACIÓN MULTIFUNCIONALES CON ACTIVIDAD BIOLÓGICA: PROPIEDADES LUMINISCENTES, MAGNÉTICAS Y ANTICANCERÍGENAS

**C. Ruiz<sup>1</sup>, A. A. García-Valdivia<sup>1</sup>, B. Fernández<sup>2</sup>, J. Cepeda<sup>3</sup>, E. San Sebastián<sup>3</sup>, E. Abas<sup>4</sup>, M. Laguna<sup>4</sup>, A. Rodríguez-Diéguez<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071 Granada (España)*

<sup>2</sup>*Instituto de Parasitología y Biomedicina "López-Neyra", CSIC, Av. Conocimiento, 18600 Granada, España*

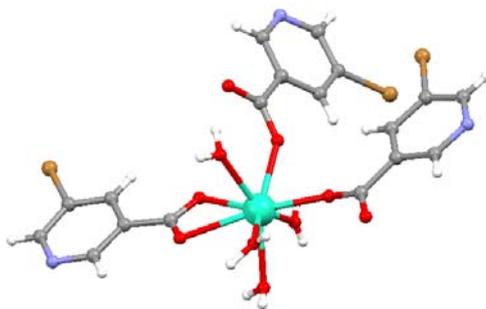
<sup>3</sup>*Departamento de Química Aplicada, Facultad de Química, Universidad del País Vasco, San Sebastián, España*

<sup>4</sup>*Dept. of Inorganic Chemistry, University of Zaragoza, C/ Pedro Cerbuna 12, 50009, Zaragoza, Spain.*

*cristina.ruiz.mart@gmail.com*

La búsqueda de nuevos tratamientos para enfermedades ya conocidas conduce la investigación hacia nuevos fármacos de diseño, y la química de coordinación en solución acuosa juega un papel importante. Las especies complejadas producen citotoxicidad en las células cancerosas, a través del marcado de proteínas específicas (terapia dirigida), al mismo tiempo que son excretadas limpiamente. Si estos añaden propiedades como la luminiscencia se estaría proporcionando un seguimiento a lo largo de estos procedimientos.

Este trabajo plantea la síntesis de nuevos compuestos de coordinación basados en iones lantánidos  $\text{Ln}^{3+}$ , que poseen estas características fotofísicas, y el ligando ácido 5-bromonicotínico, el cual ha demostrado potencial formando redes metalorgánicas con propiedades luminiscentes, magnéticas y adsorbentes. Para ello se planteó en un primer paso la síntesis hidrotermal en estufa convencional empleando diferentes sales metálicas, realizando un *screening* amplio de condiciones de reacción con objetivo de obtener materiales cristalizados. Sobre los cristales de suficiente tamaño y calidad se procede en una segunda etapa a la resolución de la estructura del sólido por difracción de rayos X de monocristal y espectroscopía infrarroja FT-IR. Por último, medidas de excitación y emisión, así como de susceptibilidad magnética, son realizadas para corroborar la multifuncionalidad de estos sistemas con propiedades anti-cancerígenas.



**Figura 1.** Perspectiva del compuesto de coordinación multifuncional de disprosio.

*Acknowledgements.* Junta de Andalucía, FQM-1484.

## IDENTIFICATION AND REMOVAL OF CONTAMINANTS OF EMERGING CONCERN IN LANDFILL LEACHATE

**A. Ruiz-Delgado<sup>1,2</sup>, E. García-Gómez<sup>1</sup>, P. Plaza-Bolaños<sup>1</sup>, S. Malato<sup>1,2</sup>, I. Oller<sup>1,2</sup>, A. Agüera<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*CIESOL, Joint Centre from University of Almeria-CIEMAT, 04120 Almeria, Spain.*

<sup>2</sup>*Plataforma Solar de Almería-CIEMAT, 04200 Tabernas (Almería), Spain.*

*anruiz@psa.es*

Landfill leachate results from the percolation of water through solid waste. Although the composition and properties of leachate depends on several variables, dissolved organic matter, inorganic macrocomponents, heavy metals, and xenobiotic organic compounds are described as the main pollutants<sup>1</sup>. This type of wastewater presents low biodegradability and normally high acute toxicity. Leachates are usually discharged into the environment or end in municipal wastewater treatment plants (WWTPs), which are not effective in the treatment of biorecalcitrant landfill leachate. Therefore, it is critical to find an adequate remediation for such effluents, which would allow their reuse. The main technologies used to treat landfill leachate have been biological processes, commonly used for leachates containing high BOD<sub>5</sub>, and physicochemical processes, applied as pre-treatment and/or full treatment for leachates with low BOD<sub>5</sub>/COD ratio. However, the application of strategies based on integrated chemical–physical–biological processes is usually required. Advanced Oxidation Processes (AOPs) have been proposed in the recent years as an effective alternative for the mineralization of recalcitrant organics in landfill leachate. Their application provides COD reduction and biodegradability improvement of the treated effluent making it compatible with a subsequent biological treatment. AOPs that can be operated by using solar energy are especially interesting to reduce operating costs<sup>2</sup>. Characterization of landfill leachates have been usually performed by determining several global parameters. These parameters do not provide information about the organic pollution and potential environmental impact if reach groundwater or surface waters and thus efforts have been made for their characterization at molecular level. Compounds reported include among others a variety of aromatic hydrocarbons, phenols, chlorinated aliphatics, pesticides, or plastizers. However, knowledge on the presence of contaminants of emerging concern (CECs), although relevant, is still very limited<sup>3</sup>.

So, the objective of this work has been defining a treatment line for landfill leachate remediation and evaluate the removal of CECs during the treatment process through direct injection liquid chromatography tandem mass spectrometry (DI-LC-MS/MS) taking into account the evaluation of the presence and fate of 115 CECs. A three step treatment line was applied including: i) a physicochemical pre-treatment ii) an advanced chemical oxidation, based on solar photo-Fenton process and iii) an advanced biological treatment, based on an immobilized biomass reactor (IBR). Results obtained reveals that, even when a high removal rate (>90%) is reached at the end of the treatment, the final effluent still contain relevant concentrations (>50 mg·L<sup>-1</sup>, expressed as total charge of CECs), similar than those reported in municipal wastewaters, thus reinforcing the relevance of this pollution source.

*Acknowledgements.* The authors acknowledge the Junta de Andalucía (RNM-1739) and the European Regional Development Fund (ERDF) for funding this investigation. P. Plaza-Bolaños acknowledges University of Almeria for her PhD research contract (Hipatia Program).

<sup>1</sup> P. Kjeldsen, M.A. Barlaz, A.P. Rooker, A. Baun, A. Ledin, T.H. Christensen. *Crit. Rev. Environ. Sci. Technol.* **2002**, 32, 297–336.

<sup>2</sup> E. De Torres-Socias, L. Prieto-Rodríguez, A. Zapata, I. Fernández-Calderero, I. Oller, S. Malato. *Chem. Eng. J.* **2015**, 216, 60-66.

<sup>3</sup> L. Jimenez, R. Alzaga, J.M. Bayona. *Intern. J. Environ. Anal. Chem.* **2002**, 82, 415–430.

## GOLD NANOSPHERES AND NANOTRIANGULAR PRISMS IMMOBILIZED ON POLYACRYLIC ACID POLYMER BRUSHES WITH ANTHRAQUINONE PENDANTS

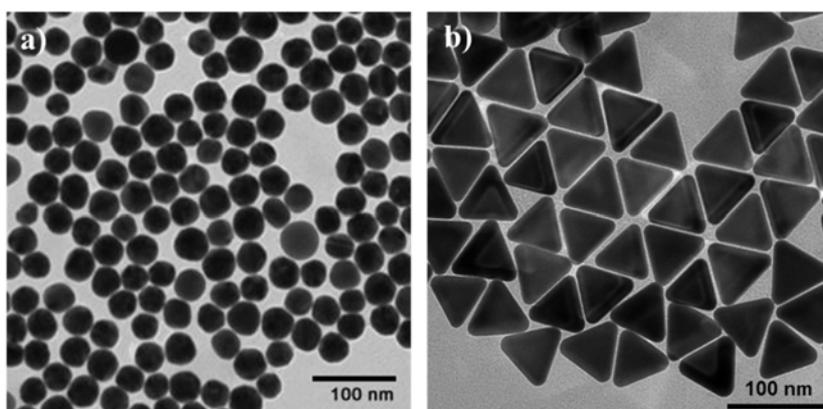
**A. B. Ruiz-Muelle<sup>a</sup>, R. Contreras-Cáceres<sup>b</sup>, J. M. López-Romero<sup>b</sup>, P. Uhlmann<sup>c</sup>,  
and I. Fernández<sup>a,\*</sup>**

<sup>a</sup> *Department of Chemistry and Physics, Research Centre CIAIMBITAL, University of Almería, 04120 Almería, (Spain).*

<sup>b</sup> *Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, University of Málaga, 29071 Málaga, (Spain).*

<sup>c</sup> *Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden e.V., Hohe Str. 6, 01069 Dresden, Germany. arm350@ual.es*

Continuing with the development of new functional materials,<sup>1</sup> we describe herein the fabrication of silicon substrates composed by covalently incorporated gold nanoparticles (AuNPs) with and without organic pendants. Amino-terminated spherical and triangular prisms gold nanoparticles as well as a redox-active anthraquinone derivatives were immobilized onto polyacrylic acid (PAA) polymer brushes by amidation reactions. Cysteamine was used as a molecule to functionalize with amino terminal groups both spherical and triangular prisms Au nanoparticles, which in a further step were covalently immobilized onto PAA polymer brushes. Colloidal particle sizes and morphologies were analyzed by transmission electron microscopy (TEM) investigations (Figure 1) and UV-visible spectroscopy. The new functional materials were studied in terms of particle nature and distribution on the silicon wafer by field emission scanning electron microscopy (FESEM). The presence of bonded-cysteamine and bonded-anthraquinone on the AuNPs surface was confirmed by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and surface enhanced Raman spectroscopy (SERS).<sup>2</sup>



**Figure 1.** Representative TEM images for a) AuNSs and b) AuNTs.

*Acknowledgements.* This research has been funded by the National R+D+i Plan project number CTQ2017-84334-R of the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities and by the Junta de Andalucía project number P12-FQM-2668.

<sup>1</sup> A.B. Ruiz-Muelle; R. Contreras-Cáceres; P. Oña-Burgos; A. Rodríguez-Diéguez; J.M. López-Romero; I. Fernández, *Appl. Surf. Sci.* **2018**, *428*, 566.

<sup>2</sup> A. B. Ruiz-Muelle, R. Contreras-Cáceres, J. M. López-Romero, P. Uhlmann, I. Fernández, *J. Mater. Chem. A*, **2018**, *submitted*.

## ESTRUCTURAS DE QUIMERAS DE DOMINIOS SH3 EN PRESENCIA DE UREA

**M. C. Salinas-García, M. Plaza-Garrido y A. Cámara-Artigas**

*Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Experimentales,  
CIAIMBITAL, ceiA3, Universidad de Almería,  
Almería (España); msg200@inlumine.ual.es*

Varias enfermedades neurodegenerativas, como la enfermedad del Alzheimer, están asociadas a la formación de fibras amiloides. Sin embargo, el mecanismo molecular por el cual se forman estos agregados y su papel en la enfermedad, aún se desconoce. Su estudio a nivel molecular se ve dificultado debido a las limitaciones que existen a la hora de obtener información estructural de alta resolución, ya que estas fibras no cristalizan y por tanto no es posible obtener su estructura mediante difracción de rayos X<sup>1</sup>. Nuestro grupo ha diseñado varias proteínas quiméricas de los dominios SH3 tirosina-quinasa, algunas de los cuales forman fibras amiloides (c-Src-SH3, Abl-SH3 y Fyn-SH3) para utilizarlas como proteínas modelo con el objetivo de abordar tales estudios. En este caso, es posible la obtención de información estructural mediante rayos X, ya que estas proteínas son fácilmente cristalizables. De esta forma se han intercambiado los lazos RT y n-Src del dominio c-Src-SH3, por aquellos presentes en los dominios Abl-SH3 y Fyn-SH3, y viceversa. Estudios estructurales llevados a cabo bajo condiciones cercanas a la desnaturalización podrían ayudar a entender los pasos iniciales que conducen al desplegamiento en proteínas. Teniendo en cuenta este enfoque, hemos estudiado la unión del desnaturalizante químico, urea, a varias construcciones quiméricas del dominio c-Src-SH3. Además, hemos cristalizado estas proteínas en presencia de diferentes concentraciones de urea para determinar su interacción. Anteriormente, hemos analizado el desplegamiento de estas en presencia de urea a pH 5.0 y pH 7.0 midiendo la fluorescencia intrínseca de la proteína. Algunas quimeras Src-SH3 donde los lazos RT y n-Src han sido intercambiados por los presentes en el dominio Fyn SH3 (quimeras SF) no se ajustan a un modelo de desnaturalización de dos estados, lo que podría indicar la presencia de algún intermedio en el proceso de desplegamiento como se ha descrito en otros dominios SH3<sup>2</sup>. Cristales de estas quimeras que crecieron en presencia de urea difractan a resolución atómica, lo que nos ha permitido modelar las moléculas de urea que interactúan con los residuos en la superficie de la proteína. En todas las estructuras resueltas, las moléculas de urea se modelaron reemplazando las moléculas de agua superficiales, que modificarían la red de enlace de agua-hidrógeno. Hemos analizado los resultados considerando los cambios estructurales debidos a la unión de la urea: en la posición de la cadena principal de la proteína; cambios en la cadena lateral del rotámero; y, desplazamiento de moléculas de agua no superficiales. En algunas estructuras, se modela una molécula de urea interactuando con el Glu106, lo que es crítico, ya que el enlace de hidrógeno entre este residuo y la Ser123 es el que permite el plegamiento del dominio c-Src-SH3.

*Agradecimientos.* Esta investigación la ha realizado el grupo de investigación PAI BIO328 Estructura de Proteínas que cuenta además con financiación del proyecto MINECO y FEDER (EU) [BIO2016-78020-R]. La toma de datos ha sido financiada por una beca BAG de ALBA (Barcelona, España) [BAG-ID 2015071316 y 2016091824] y MX1830 (ESRF, Grenoble, Francia).

<sup>1</sup> Cámara-Artigas, A. *Archives of Biochemistry and Biophysics*. **2016**, *602*, 116-126.

<sup>2</sup> Dasgupta, A., Udgaonkar, J. B., Das, P. *The Journal of Physical Chemistry*. **2014**, *118*, 6380-6392.

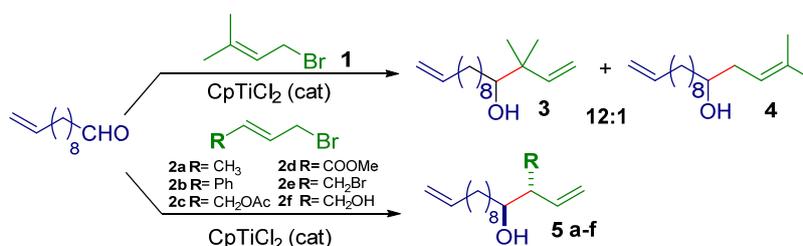
## CpTi<sup>III</sup>Cl<sub>2</sub>: A NEW CATALYST FOR THE REGIOSELECTIVE ALLYLATION OF ALDEHYDES

**I. Torres-García, J. L. López-Martínez, M. Álvarez-Corral, M. Muñoz-Dorado, I. Rodríguez-García**

*Organic Chemistry, Faculty of Experimental Sciences, ceiA3, University of Almería  
E04120 Almería (Spain); irene.tg.94@gmail.com*

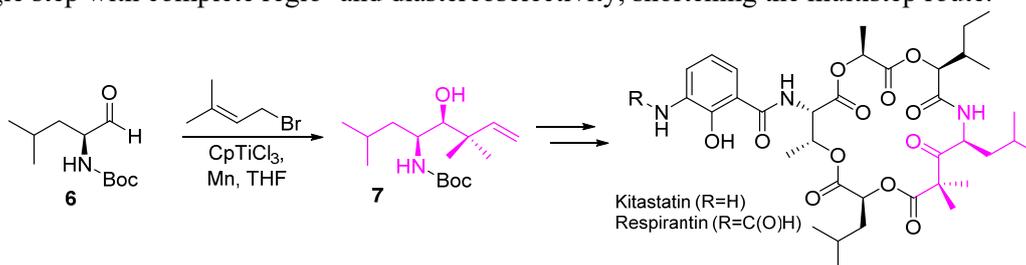
The species CpTiCl<sub>2</sub>, prepared *in situ* by manganese reduction of CpTiCl<sub>3</sub>, is an excellent new system for the Barbier-type allylation and propargylation of carbonyl compounds.<sup>1</sup> This system can be used in catalytic amounts when combined with Et<sub>3</sub>N•HBr/TMSBr, which act as regenerating system.<sup>2</sup>

Here we report a study on the regio- and stereoselectivity of the reaction and its application to the synthesis of bioactive natural products. In this way, using undec-10-enal as substrate, we prepared homoallylic alcohols by addition of a selection of allyl bromides in which the double bond has two or three substituents or incorporates some other functional groups. The reaction proved to be completely regioselective in all the studied examples and compatible with the functional groups. In addition, *anti* stereoisomers were mainly or even exclusively formed.



**Scheme 1.** Substituted allyl bromides in the allylation reactions with Ti<sup>III</sup>. (i): CpTiCl<sub>3</sub>, Mn, Et<sub>3</sub>N•HBr, TMSBr, THF.

In order to prove the synthetic potential of the reaction, we prepared compound **7**, an intermediate in the total synthesis of the macrocyclic natural depsipeptides kitastatin and respirantin, which exhibit nanogram cancer cell growth inhibitory activity. It was obtained in a single step with complete regio- and diastereoselectivity, shortening the multistep route.<sup>3</sup>



**Acknowledgements.** We thank “Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3” and “Ministerio de Economía y Competitividad” (Project CTQ2015-70724-R) for financial support.

<sup>1</sup> For examples of allylations and propargylations with Cp<sub>2</sub>TiCl: Muñoz-Bascón, J.; Sancho-Sanz, I.; Álvarez-Manzaneda, E.; Rosales, A.; Oltra, J. E. *Chem. Eur. J.* **2012**, *18*, 14479–14486.

<sup>2</sup> Roldan-Molina, E.; Padial, N.; Lezama, L.; Oltra, J. *Eur. J. Org. Chem.* **2018**, doi: 10.1002/ejoc.201801120.

<sup>3</sup> Beveridge, R. E.; Batey, R. A., *Org. Lett.* **2014**, *16* (9), 2322–2325.

## CUÁL ES EL EFECTO AMBIENTAL DE LA DEGRADACIÓN DE LOS PESTICIDAS EN EL AGUA

**M. Vargas-Pérez, F. J. Egea-González, A. Garrido-Frenich**

*Grupo de Investigación “Química Analítica de los Contaminantes”, Departamento de Química y Física, Centro de Investigación en Agrosistemas Intensivos Mediterráneos y Biotecnología Agroalimentaria (CIAIMBITAL), Universidad de Almería. Campus de Excelencia Internacional en Agroalimentaria, ceiA3, E-04120 Almería, España  
mvp864@inlumine.ual.es, Tel: +34-950-214-720, Fax: +34-950-015-008*

Con el fin de evaluar y comprender el impacto de la materia activa Propoxycarbazone en aguas subterráneas y superficiales, hemos estudiado su comportamiento a lo largo de un periodo de tiempo. Los datos obtenidos han sido útiles para predecir la posible fitotoxicidad de este plaguicida en agua. Se han planificado estudios de laboratorio para: (i) establecer el método analítico para la determinación simultánea de propoxycarbazone y su metabolito (2-hydroxy-propoxycarbazone) en muestras de agua, y (ii) caracterizar la capacidad de disipación del producto fitosanitario (PPP) que contiene propoxycarbazone en dos situaciones, una con agua subterránea y otra con agua superficial.

Con relación al método analítico, la extracción de la muestra de agua se realizó mediante una extracción en fase sólida (SPE). La técnica analítica utilizada para la determinación de ambos compuestos fue cromatografía líquida acoplada a un espectrómetro de masas de alta resolución (UHPLC-Orbitrap-MS). El método fue validado de acuerdo en lo descrito en la guía SANTE. La linealidad se obtuvo del análisis de muestras blancas fortificadas a cinco niveles de concentración en el rango de 10 a 100 µg/kg. Los coeficientes de determinación ( $R^2$ ) fueron 0.99 y la desviación relativa del factor de respuesta (RSD) para cada recta fue menor de  $\pm 20\%$ . El límite de cuantificación (LOQ) de propoxycarbazone y su metabolito en muestras de agua fue 10 µg/kg. La recuperación y precisión fueron estudiadas a 0.1 y 1 µg/kg, dieron recuperaciones de 73-117%, precisión intra-día (5-10%) y precisión inter-día (11-17%) para propoxycarbazone y su metabolito respectivamente.

Respecto a el experimento de disipación bajo condiciones de laboratorio, se realizó durante 150 días después de la aplicación del PPP *Attribut*®. A ambos tipos de condiciones simuladas se les estudio la disipación a dos dosis, 1 y 5 g/l, como concentración final en la muestra de agua a estudio. La mayor disipación tuvo lugar durante los primeros 90 días del estudio, donde la concentración de Propoxycarbazone decreció aproximadamente un 70% de la concentración inicial. Después de esto, los residuos permanecen bastante constantes hasta el final del estudio; esto ocurre tanto en condiciones de oscuridad como de luz a los dos niveles de concentración estudiados.

El metabolito 2-hydroxypropoxycarbazone y otros metabolitos encontrados en todas las muestras han aumentado su concentración durante el ensayo, las condiciones de luz no afectan al proceso de disipación. Nuevos compuestos desconocidos (2-hydroxy-N-metyl-propoxy-triazolinone sulfonamide metil ester, N-metil-propoxy-triazolinone) se cuantificaron en todas las muestras.

No se puede descartar la posibilidad de que se produzca algún impacto ambiental a largo plazo de la Propoxycarbazone y sus metabolitos en plantas u otros organismos, por lo que en la evaluación de riesgos debería de tenerse en cuenta los resultados obtenidos en este estudio con respecto a los nuevos metabolitos



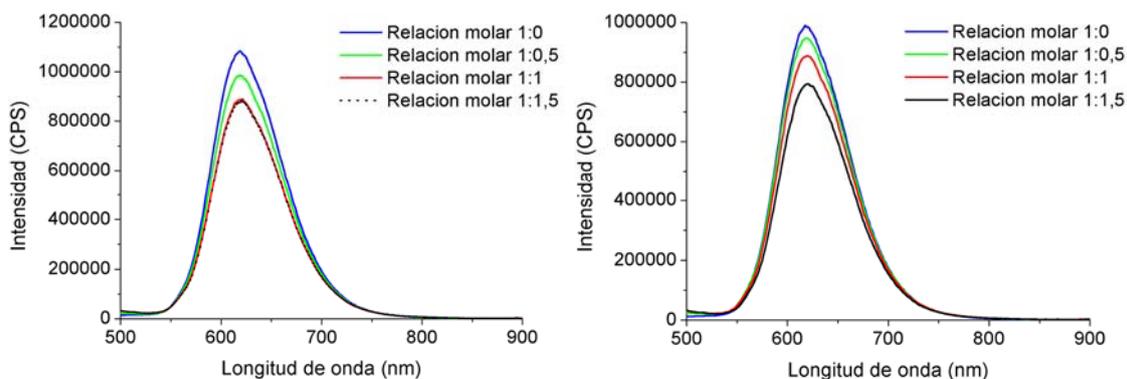
## SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF *cis*-[Ru(Dcbpy)<sub>2</sub>(PTA)<sub>2</sub>]Cl<sub>2</sub>: STUDY OF ITS OPTICAL PROPERTIES AND USE AS A Cd<sup>2+</sup> SENSOR

**J. M. Veiga del Pino, F. Scalambra and A. M. Romerosa-Nievas**

*Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales,  
Universidad de Almería,  
E04120 Almería (Spain); jvd270@ual.es*

Transition metals are present in the biological organisms and in the environment but, depending on their concentration, they can be essential elements or can be dangerous pollutants.<sup>1</sup> For this reason, the research on chemical sensors capable of detecting their presence in solution is nowadays an issue of primary importance. In this context, molecular sensors play a crucial role.<sup>2</sup> Ruthenium polypyridyl complexes has been extensively investigated due to their excited state reactivity, optical and redox properties.<sup>3</sup> The emission properties of this family of compounds can be modulated upon modification or substitution of the ligands but also upon interaction between the ligands and small molecules or ions present in the environment.

Recently our group synthesised and fully characterized the complex *cis*-[Ru(dcBpyH)<sub>2</sub>(PTAH)<sub>2</sub>]Cl<sub>2</sub> (DcBpy = 4,4'-Dicarboxy-2,2'-bipyridine) (PTA = 1,3,5-Triaza-7-phosphaadamantane) with the aim of study its behaviour as dye for Grätzel solar cells, as well as sensor for metals in water. The study of its fluorescence in water in the presence of various alkali and transition metals salts revealed that its emission is quenched by the presence of Cd<sup>2+</sup> cations, while it is not affected by the presence of the ions which are normally present in water, like Na<sup>+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Ca<sup>2+</sup>, Fe<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>.



**Figure 1.** Emission spectra of  $4,7 \cdot 10^{-4}$  M *cis*-[Ru(DcBpyH)<sub>2</sub>(PTAH)<sub>2</sub>]Cl<sub>2</sub> in water at 20°C ( $\lambda_{exc.} = 350$  nm) in the presence of a) CdCl<sub>2</sub> and b) Cd(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> in molar ratios 1:0; 1:0,5; 1:1; 1:1,5.

*Acknowledgements.* This research has been supported by the Spain Ministry of Economy and Competitiveness (Project CTQ2015-67384-R).

<sup>1</sup> N. Ercal, H. Gurer-Orhan, N. Aykin-Burns, *Current topics in Medicinal Chemistry*, **2001**, *1*, 529-539

<sup>2</sup> Y. Zhang, V. A. Blatov, T. Zheng, C. Yang, L. Qian, K. Li, B. Li, B. Wu, *Journal of Luminescence* **2018**, *199*, 126-132.

<sup>3</sup> P. D. Beer, J. Cadman, *Coord. Chem. Rev.* **2000**, *205*, 131-155.

## **LAS VÍAS DE TRANSFERENCIA DE LOS RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN: PATENTES, SPIN OFF E INVESTIGACIÓN COLABORATIVA**

**F. Diáñez<sup>1,2</sup>, M. Santos<sup>2</sup>**

*Oficina de Transferencia de Resultados de Investigación (OTRI)<sup>1</sup>/  
Departamento de Agonomía<sup>2</sup>,  
Universidad de Almería,  
E04120 Almería (Spain); fdianez@ual.es*

Actualmente vivimos inmersos en un mundo enormemente cambiante, nos basta simplemente con mirar unos pocos años atrás, para darnos cuenta de cómo todos hemos cambiado enormemente la forma de hacer la mayoría de nuestros pequeños actos cotidianos. Es evidente, que existe un elemento fundamental dinamizador de este cambio continuo y de este proceso de nuevas formas de hacer lo cotidiano, este elemento no es otro que la innovación tecnológica.

La innovación tecnológica es la consecuencia final de la actividad de investigación, que se desarrolla tanto en las empresas como en las instituciones públicas. En el caso de las empresas, la vía de traducir la innovación en nuevos productos, procesos o servicios es mucho más directa. Pero en el caso de las instituciones públicas, en las que en ocasiones la vinculación entre la inversión en investigación y la rentabilización de la misma, no están siempre alineadas, es necesario realizar un mayor esfuerzo orientado a la transferencia de la innovación y la tecnología hacia las empresas y la sociedad en general.

Por otro lado, no cabe duda que la competitividad de las empresas en este mundo global esta forzosamente vinculada a su capacidad para subirse al carro de la innovación tecnológica, mediante la creación en el seno de las empresas, de departamentos propios de I+D+i. Los departamentos de I+D+i de las empresas, tienen la necesidad en ocasiones de colaborar con los equipos de investigaciones de las instituciones públicas, para lograr objetivos comunes. Aunque son muchas las diferencias que existen y separan el mundo empresarial y el mundo académico de las universidades y centros públicos de investigación, también lo es, que existen múltiples razones que hacen necesario que ambos mundos se entiendan y conecten. Para facilitar esa la interacción entre ambos ámbitos, se crearon en España las OTRIs hace tres décadas. La función que las Oficinas de Transferencia de Resultados de Investigación (OTRIs) tienen que desarrollar es precisamente facilitar el entendimiento entre el mundo empresarial y el académico, poniendo en contacto a las partes, buscando la contraparte cuando es necesario, identificando y promoviendo determinadas oportunidades y regulando las condiciones en que se producen las diversas colaboraciones.

Las actuaciones conjuntas entre las empresas y la universidad pueden ser de índole muy diversa, podemos clasificarlas en tres grandes grupos en función de donde se origina la demanda, así tendríamos: Actividades que tienen su origen en un necesidad de la empresa, actividades que tienen su origen en una necesidad de la universidad y aquellas que tienen un origen conjunto de ambas instituciones.

Dentro del primer grupo, encontramos los contratos de investigación con empresas e instituciones. Estos permiten atender una demanda cuyo objetivo puede ser muy diverso, desde iniciar una nueva línea de investigación según las necesidades de un promotor, confirmar mediante evaluación objetiva las bondades de un producto o servicio de una empresa y ayudar a su divulgación, prestar servicios de naturaleza científico – técnica, o prestar servicios de formación en temáticas de interés a las empresas e instituciones que lo necesiten.

En el segundo grupo, encontramos dos actividades bien diferenciadas la protección de resultados de investigación (patente, marca, protección intelectual, software,...) y la creación de Empresas de Base Tecnológica. El impulso de la protección de resultados de investigación de alta calidad es una de las prioridades de la OTRI, aunque de nada sirve esta protección si finalmente no se llega a una situación de licencia de esta tecnología hacia nuestras empresas, que permita materializar la investigación en productos y servicios de consumo para la sociedad. Otra forma de hacer que los resultados de investigación, den lugar a nuevos productos y servicios son las Empresas de Base Tecnológica (Spin off). Muchas de estas empresas requieren durante su

constitución o expansión, de la sinergia que representa la simbiosis de los investigadores promotores con el sector empresarial.

En el tercer grupo de actuaciones, encontramos aquellas en las que las empresas o instituciones junto con los investigadores de la universidad forman consorcios para solicitar proyectos que financien la investigación en diferentes convocatorias. Dentro de estas convocatorias encontramos los Proyectos internacionales y europeos (actualmente con Horizonte 2020 como buque insignia) y los Proyectos colaborativos empresa-universidad. En el caso de los Proyectos internacionales y europeos muchas de las convocatorias de financiación de investigación marcan como requisito de partida que se realicen propuestas que vinculen a instituciones de investigación y empresas de un consorcio de varios países. En el caso de los Proyectos colaborativos empresa-universidad aunque son convocatorias nacionales, también es un valor relevante que las solicitudes sean realizadas conjuntamente por empresas y organismos públicos de investigación.

Las competencias que han tenido que asumir las universidades, se han incrementado con el paso de los siglos, desde que se crearan las primeras universidades en el mundo. Durante siglos las universidades fueron centros de acopio, conservación y transmisión del conocimiento, con el tiempo pasaron a ser centros de generación de nuevos conocimientos basados en la investigación, y posteriormente se vio la necesidad de que toda esta innovación fluyera hacia la sociedad y contribuyese al desarrollo socioeconómico de ésta. Actualmente la Ley Orgánica de Universidades (2007) reconoce además de la DOCENCIA y la INVESTIGACIÓN, la TRANSFERENCIA como la Tercera Misión de las universidades.

La TRANSFERENCIA de la investigación es además de una misión que se nos encomienda a las universidades, una vía para potenciar un desarrollo económico del país basado en la innovación, al tiempo que una vía alternativa a la pública, para financiar la propia actividad investigadora de las universidades. Como hemos señalado son muchas las rutas posibles para hacer transferencia y muchas otras que no hemos indicado y ya existen o están por inventarse en el futuro próximo. A los investigadores nos toca “cambiar el chip” y poner en valor “lo aplicado”, siendo plenamente conscientes, de que los criterios con los que las empresas valoran el impacto de nuestra actividad investigadora se miden en términos de rentabilidad económica o social en la mayoría de los casos, y no con criterios como “la posición en rankings de JCR de los resultados actualmente tan valorados en el mundo científico”.

## MOVILIDAD INTERNACIONAL DE INVESTIGADORES: ACCIONES MARIE SKLODOWSKA-CURIE

**J. A. Chaichio-Moreno**

*Oficina de Proyectos Europeos e Internacionales de I+D+I de la OTRI,  
Universidad de Almería,  
E04120 Almería (Spain); chaichio@ual.es*

La Comisión Europea, a través de las Acciones Marie Sklodowska-Curie (MSCA), ofrece posibilidades de movilidad internacional, interdisciplinar e intersectorial como instrumento de fortalecimiento de la carrera investigadora en todas sus fases. Las MSCA están enmarcadas dentro del programa Horizonte 2020 en su pilar de Ciencia Excelente y financian proyectos para aumentar, no sólo las capacidades científicas e innovadoras de los investigadores, sino también otras capacidades transversales que les permitan aumentar su competitividad, potenciar sus carreras y adaptarlas a las necesidades del mercado laboral. Las MSCA ofrecen unas excelentes condiciones de trabajo y están dirigidas a investigadores de cualquier edad, nacionalidad o disciplina.

Las convocatorias Marie Sklodowska-Curie se publican anualmente y tienen un enfoque “bottom-up” lo que permite que los proyectos puedan estar dirigidas a cualquier línea de investigación, sin que estas sean definidas o marcadas por la convocatoria.

Las modalidades de convocatorias MSCA con movilidad de investigadores son:

- Individual Fellowships (IF): Son proyectos individuales en los que un investigador desarrolla un proyecto en una entidad de un país distinto al que ha residido en los últimos años. El investigador ha de ser doctor o con más de 4 años de experiencia en investigación a tiempo completo. Existen dos modalidades de IF:
  - European Fellowships (EF): Movilidad entre países europeos y de terceros países hacia Europa.
  - Global Fellowships (GF): Movilidad para realizar un período de investigación en un tercer país con una fase final de retorno a Europa.
- Innovative Training Networks (ITN): Son proyectos solicitados en consorcio, es decir por varias instituciones de diferentes países, en el marco del cual se contratarán a investigadores predoctorales de cualquier nacionalidad. Existen 3 modalidades de ITN:
  - European Training Networks (ETN): Son redes de formación compuestas al menos por 3 entidades de 3 países elegibles que permiten la contratación de un máximo de 15 investigadores predoctorales, que no tienen la obligación de realizar la tesis doctoral.
  - European Industrial Doctorates: Doctorados industriales compuestos al menos por 2 beneficiarios de 2 países elegibles, tanto del sector académico como del no académico, en el que los doctorandos tendrán que pasar al menos el 50% de su tiempo en entidades del sector no académico.
  - European Joint Doctorates: Los Programas de Doctorado Conjuntos deben estar compuestos por un mínimo de 3 entidades que puedan otorgar el título de doctor, que sean al menos de 3 países elegibles. Estos permiten la contratación de 15 doctorandos como máximo.

Research and Innovation Staff Exchange (RISE): son proyectos consorciados como mínimo por 3 instituciones de 3 países distintos y su objetivo es el intercambio de personal como instrumento de refuerzo de colaboración entre países y sectores.

## ALGEBRA NO CONMUTATIVA

**P. A. Guil Asensio**

*Departamento de Matemáticas,  
Universidad de Murcia,  
E30100 Murcia (España); paguil@um.es*

El objetivo de esta charla es presentar un ejemplo de las diversas aplicaciones del Álgebra no Comutativa. En concreto, a todo conjunto parcialmente ordenado se le puede asociar un grafo dirigido  $Q$  que represente el orden entre sus elementos. A su vez, el estudio y clasificación de estos grafos dirigidos puede 'linealizarse' mediante su representación dentro de lo que suele conocerse como su matriz de incidencia. Así el problema de clasificar dichos grafos se convierte en un problema de clasificación de matrices sobre un cuerpo.

En esta charla veremos cómo un resultado clásico de tipo geométrico de P. Gabriel determina la complejidad de estas posibles representaciones en términos de la forma cuadrática asociada a dicho grafo. Seguidamente, veremos diversas aplicaciones de este resultado, así como la interpretación geométrica que explica sus conexiones con otros resultados similares.

## ELEMENTOS GEOMÁTICOS PARA LA VALORACIÓN Y SEGUIMIENTO DE LA MADUREZ ECOLÓGICA EN ECOSISTEMAS TERRESTRES

**G. del Barrio, M. E. Sanjuán, A. Ruiz and J. Martínez-Valderrama**

*Estación Experimental de Zonas Áridas (CSIC),  
Campus de la Universidad de Almería,  
E04120 Almería (Spain); [gabriel@eeza.csic.es](mailto:gabriel@eeza.csic.es)*

La madurez ecológica se refiere aquí a la posición de un ecosistema en un gradiente definido por fuerzas contrapuestas de auto-organización y explotación humana. La primera está asociada a la sucesión ecológica y tiende a acumular biomasa, aumentar la Producción Primaria Bruta, y reducir el turno de renovación. La segunda es causada por la extracción humana de Producción Primaria Neta (PPN), que resulta así favorecida en detrimento de la biomasa acumulada, lo que a su vez promueve un alto turno de renovación. La pérdida de complejidad por explotación aleja del equilibrio a los ecosistemas afectados, que devienen inherentemente inestables. Por ello esta bipolaridad indica, respectivamente, sostenibilidad frente a degradación.

La aproximación aceptada hoy día para examinar la madurez ecológica en grandes territorios usa bases de datos geospaciales. De los diversos productos disponibles mediante Observación Terrestre, el Índice de Vegetación de Diferencias Normalizadas (NDVI) sigue siendo uno de los más utilizados por su sencillez y fiabilidad. El NDVI indica la cantidad de biomasa verde, y su integral se considera un indicador fiable de la PPN. Dada la alta dependencia de ésta respecto a la precipitación, la razón entre ambas magnitudes (Eficiencia en el Uso de la Lluvia, RUE) es un estimador preferible en zonas áridas.

Por razones prácticas, un sistema geomático de vigilancia de la madurez ecológica debe considerar separadamente los estados ecológicos y sus tendencias, que pueden entenderse como variables de nivel y flujo respectivamente. Determinar el estado de una localización requiere compararla sincrónicamente con todas las que sean comparables. El RUE a corto y largo plazo produce estimadores de productividad y biomasa respectivamente. Por otra parte, el seguimiento de una localización requiere la comparación diacrónica consigo misma a lo largo de un período. Sin embargo, para que el resultado sea indicativo, es necesario distinguir entre dos componentes de variación de NDVI: la debida a fluctuaciones climáticas, y la intrínseca al ecosistema en cuestión. Solo ésta puede interpretarse en términos de sucesión e explotación.

Esta aproximación ha sido ensamblada en un método llamado 2dRUE. Sus algoritmos han sido publicados<sup>1</sup>, y hay un pequeño vídeo que muestra sus aspectos principales<sup>2</sup>. El método está disponible como una aplicación<sup>3</sup>. Las aplicaciones de 2dRUE suelen ser a niveles nacional o regional, e incluyen Iberia, el Magreb, Mongolia Interior o el NE de Brasil, por ejemplo. Todas arrojan importantes proporciones de territorio degradado que reflejan la historia ecológica de explotación de cada zona, y relativamente pequeñas proporciones de degradación activa que identifican los procesos extractivos actuales. En el caso de España, dos aplicaciones realizadas entre 1989 y 2010 revelan que el 50% del territorio se encuentra en estados simplificados o directamente degradados, un 33% aumenta su biomasa en el curso del tiempo, y solo el 1% experimenta degradación activa. Estos datos alimentan oficialmente los informes periódicos a la Convención de Naciones Unidas para la Lucha contra la Desertificación.

<sup>1</sup> del Barrio, G.; Sanjuan, M.E.; Hirche, A.; Yassin, M.; Ruiz, A.; Ouessar, M.; Martinez Valderrama, J.; Essifi, B; Puigdefabregas, J.. Land degradation states and trends in north-western Maghreb drylands, 1998-2008. *Remote Sensing*, **2016**, 8(7): 603.

<sup>2</sup> Sanjuan, M.E.; Ruiz, A.; del Barrio, G. *The 2dRUE Tool for Assessment and Monitoring of Land Cover Status*. <http://www.eeza.csic.es/es/medioteca.aspx?id=60>

<sup>3</sup> Ruiz, A.; Sanjuan, M.E.; del Barrio, G.; Puigdefabregas, J. *r2dRue: 2d Rain Use Efficiency library*. R Package Version 1.0.4. <http://CRAN.R-project.org/package=r2dRue>

## 9. Lista de los autores principales

<i>Póster</i>	<i>Autor</i>	<i>Pág.</i>	<i>Póster</i>	<i>Autor</i>	<i>Pág.</i>
B-P1	S. Arzate	15	Q-P1	L. M. Aguilera-Sáez	47
B-P2	A. Camelo-Castillo	16	Q-P2	F. M. Arrabal-Campos	48
B-P3	A. Camelo-Castillo	17	Q-P3	J. R. Belmonte-Sánchez	49
B-P4	I. De la Obra-Jiménez	18	Q-P4	M. C. Campos-Mañas	50
B-P5	R. Sales	19	Q-P5	G. Cutrone	51
B-P6	J. J. Gallardo	20	Q-P6	J. M. González-Gallego	52
B-P7	M. R. Martínez-Gallardo	21	Q-P7	A. García-García	53
B-P8	A. Molina-Miras	22	Q-P8	E. García-Gómez	54
B-P9	J. M. Mora	23	Q-P9	A. A. García-Valdivia	55
B-P10	G. Romero	24	Q-P10	A. Hernández-Zanoletty	56
B-P11	E. Salmerón-Sánchez	25	Q-P11	J. L. Hidalgo-Ruiz	57
B-P12	A. Sánchez-Zurano	26	Q-P12	M. López-García	58
B-P13	A. Siles-Castellano	27	Q-P13	J. L. López-Martínez	59
B-P14	P. Soriano-Molina	28	Q-P14	B. López	60
B-P15	A. Toribio-Gallardo	29	Q-P15	A. Lorenzo	61
			Q-P16	Y. Navarro	62
CA-P1	M. C. Betancur-Arenas	30	Q-P17	A. Navas	63
CA-P2	M. Escudero	31	Q-P18	M. Plaza-Garrido	64
CA-P3	M. J. Estrella-González	32	Q-P19	A. C. Abreu	65
CA-P4	D. Fabrikov	33	Q-P20	A. Raya-Barón	66
CA-P5	L. López	34	Q-P21	A. Romera-Torres	67
CA-P6	P. Martínez-Carricondo	35	Q-P22	F. J. Romero	68
CA-P7	F. Martínez-Hernández	36	Q-P23	L. Ruedas-Calvo	69
CA-P8	F. Navarro-Martínez	37	Q-P24	C. Ruiz	70
CA-P9	F. Navarro-Martínez	38	Q-P25	A. Ruiz-Delgado	71
CA-P10	F. Orts	39	Q-P26	A. B. Ruiz-Muelle	72
CA-P11	B. Rodríguez-Lozano	40	Q-P27	M. C. Salinas-García	73
CA-P12	M. Rodríguez	41	Q-P28	I. Torres-García	74
CA-P13	J. Salinas	42	Q-P29	M. Vargas-Pérez	75
			Q-P30	J. M. Veiga del Pino	76
M-P1	M. G. Cabrera-Padilla	43			
M-P2	F. Ferrón-Carrillo	44	CP-1	F. Diánez	77
M-P3	J. F. Gálvez-Rodríguez	45	CP-2	J. A. Chaichio-Moreno	79
M-P4	J. F. Mañas-Mañas	46	CP-3	P. A. Guil Asensio	
			CP-4	G. del Barrio	81