

LIBRO DE ABSTRACTS

V Mini simposio

de Investigación en Ciencias Experimentales

Festividad de San Alberto Magno
Patrón de CC Experimentales

15 de Noviembre 2016



Libro de Abstracts

2016



experimentales

Editores: Miriam Álvarez Corral, M^a Carmen Cerón García, Ignacio Fernández de las Nieves y Asterio Sánchez Mirón

Edición: Universidad de Almería

ISBN: 978-84-16642-49-6

DEPÓSITO. LEGAL: AL 1731-2016

V Minisimposio de Investigación en Ciencias Experimentales

Festividad de San Alberto Magno
15 de noviembre de 2016

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. Carta del Decano de la Facultad de Ciencias Experimentales	3
3. Carta del Comité Organizador	4
4. Información importante del Minisimposio	6
5. Programa	7
6. Patrocinio del Minisimposio	8
7. Lista de títulos de pósteres	9
8. Resúmenes de los pósteres	
Biotecnología y bioprocesos industriales	13
Ciencias aplicadas y medioambientales	34
Matemáticas	45
Química	51
9. Resúmenes de las conferencias plenarias	77
10. Lista de los autores principales	79

1. Organización

Comité Organizador

Miriam Álvarez Corral
M^a del Carmen Cerón García
Ignacio Fernández de las Nieves
Asterio Sánchez Mirón

Comité Científico Evaluador

Ana Agüera López
Francisco Javier Cabello Piñar
Juan Capel Salinas
Francisco García Camacho
Blas Torrecillas Jover

2. Saluda del Decano de la Facultad de Ciencias Experimentales

Alcanzamos la quinta edición del Minisimposio de Investigación en Ciencias Experimentales, una experiencia en la que esta Facultad ha puesto un empeño y un cariño extraordinarios desde sus inicios, allá por 2011. Y como siempre, se celebra al abrigo de las celebraciones conmemorativas de la festividad de San Alberto, nuestro patrón.

Se vuelve a trabajar en una dinámica de mañana y tarde, lo que supone una consolidación de la participación e implicación de nuestros investigadores en la tarea de plasmar sobre el papel, con vuestros pósteres, y de comunicar, en sesiones flash, vuestros resultados más recientes. Pretendemos, en particular, que sea el impulso imprescindible que tanto se necesita cuando das los primeros pasos como investigador. Es el reto principal para el que nació esta experiencia: impulsar a los investigadores más jóvenes.

Por ello es por lo que se sigue confiando en la distribución los trabajos presentados según los diferentes Programas de Doctorado en los que está implicada nuestra Facultad: "Biotecnología y Bioprocesos Industriales", "Ciencias Aplicadas y Medioambientales", "Matemáticas" y "Química". Quiero aquí aprovechar la disponibilidad del Director de la EIDUAL, profesor Dr. Antonio Fernández Barbero, que se ha concretado en la posibilidad de contar con investigadores de reconocido prestigio que nos acompañarán en las dos mini-conferencias vespertinas.

Concluyo este saludo agradeciendo el enorme esfuerzo llevado a cabo por el equipo de colegas que ha hecho realidad esta edición un año más, plasmado ahora en este volumen que tienen entre tus manos. Y, como siempre, hago explícito este agradecimiento en la profesora Dra. María del Carmen Cerón García y en el profesor Dr. Ignacio Fernández de las Nieves. Sus ilusiones siguen intactas desde el origen de esta experiencia, y su disposición va en aumento. A todos ellos, y en general a todos los participantes, os deseo un fructífero V Minisimposio y un feliz San Alberto 2016.

Enrique de Amo Artero

Decano

Facultad de Ciencias Experimentales

3. Carta del Comité Organizador

Desde el Comité organizador nos complace introducir y contextualizar un año más el libro de abstracts o resúmenes. En esta festividad de San Alberto Magno damos el pistoletazo de salida a una nueva edición, y ya van cinco, del Minisimposio de Investigación en Ciencias Experimentales. Como cada año, la combinación de conferencias plenarias, comunicaciones flash y exposición de pósteres conformarán la jornada de divulgación de la ciencia que en los ámbitos de ciencias experimentales se genera.

Al igual que el año pasado, y con el objetivo de transformar el Minisimposio en un evento más parecido a los congresos y reuniones que tienen lugar fuera de nuestras fronteras, se abarca también la tarde. En ella se han incluido este año dos conferencias plenarias y algunas comunicaciones flash adicionales. De este modo, durante la mañana contaremos con la ponencia de San Alberto Magno titulada "Química, el elemento humano" impartida por el Dr. Javier García Martínez, mientras que, en sesión de tarde, tendremos la oportunidad de atender a las ponencias "Big Data. Una perspectiva estadística" y "Las Ciencias Ambientales en el Antropoceno", impartidas por los profesores de la Universidad de Almería Dr. Antonio Salmerón Cerdán y Dr. Javier Cabello Piñar, respectivamente. Estas conferencias plenarias se alinean con la formación transversal que desde los programas de doctorado deben proporcionar a sus estudiantes, y que este año va especialmente dirigido a aquellos involucrados en los programas de ciencias ambientales y matemáticas.

Queremos también agradecer un año más a las empresas privadas que de nuevo sustentan parcialmente la jornada científica. En primer lugar, a "Dicsa SL" que vuelve a estar presente no sólo financiando la clásica copa de vino sino también con premios destinados a las mejores comunicaciones. También debemos hacer extensivo el agradecimiento a "Equilabo SL", "Control Técnica", "Albus" y a "Fisher Scientific", que de nuevo apuestan por el Minisimposio subvencionando premios a las mejores contribuciones, o aportando material de oficina muy útil para el seguimiento académico durante el resto del año. De igual modo, el comité organizador quiere agradecer a los campus de excelencia CeiMar y Ceia3, así como al centro de investigación CIAIMBITAL, por su apoyo incondicional en la financiación de varios de los premios que se otorgan a las mejores contribuciones.

Un año más, nos mueve y nos motiva la posibilidad de crear un entorno adecuado de debate científico, y en donde, principalmente, los estudiantes de doctorado discutan acerca de las investigaciones propias y no propias, básicas y aplicadas, en un mismo lugar durante una misma franja horaria. La existencia de varios premios otorgados a las mejores comunicaciones flash, que este año se consolidan con un total de veinte, esperamos sean un acicate para que todos los investigadores participantes intenten expresar en tamaño póster su dedicación diaria al mundo de la investigación, de gran sacrificio, pero también de grandes satisfacciones.

La jornada que este año 2016 presentamos pretende ser eso, una jornada en el que la dedicación diaria al mundo científico desde las innumerables facetas y aristas, se vea recompensada con la discusión y agradecimiento por parte de profesores e investigadores de nuestro ámbito, y que finalmente pueda cristalizar en el deseado premio de 300 Euros con el que al menos invitar a sus compañeros de laboratorio.

Por último, nos gustaría plasmar en unas pocas palabras nuestro agradecimiento al comité científico, Dr. Blas Torrecillas Jover, Dr. Dr. Javier Cabello Piñar, Dra. Ana Agüera López, Dr. Francisco García Camacho y Dr. Juan Capel Salinas, como representantes de los cuatro programas de doctorado que conforman la oferta doctoral de la Facultad de Ciencias Experimentales de la Universidad de Almería, por su gran disposición diciendo sí prácticamente al minuto de hacerles llegar la invitación, y por su complicado trabajo de visión global, que quedará traducido en los premiados de este año 2016.

Sin alargar más esta pequeña contextualización inicial, os queremos trasladar desde el comité organizador nuestra más sincera bienvenida al V Minisimposio y desearles un aprovechamiento científico y social de nuestra festividad de San Alberto Magno.

Comité Organizador

Ignacio Fernández de las Nieves (Prof. Titular, Área Química Orgánica)

María del Carmen Cerón García (Prof. Titular, Área Ingeniería Química)

Miriam Álvarez Corral (Prof. Titular, Área Química Orgánica)

Asterio Sánchez Mirón (Prof. Titular, Área Ingeniería Química)

4. Información importante del Minisimposio

Participan en este V Minisimposio cualquier alumno de doctorado o de máster de la Facultad de Ciencias Experimentales (FCCEE) de la UAL. También investigadores postdoctorales de cualquier grupo de investigación de la FCCEE.

El Comité Científico será el encargado de valorar todos los trabajos en formato póster presentados, 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.

De esas 20 exposiciones orales, el comité científico escogerá los mejores, atendiendo a los criterios de evaluación expuestos en las bases. Los premios serán de 300 euros, pudiendo otorgarse más de uno por temática, dependiendo del número de contribuciones. La resolución de los mismos se dará a conocer el mismo día en el acto de clausura, el 15 de noviembre de 2016.

Criterios de valoración y Jurado

Los trabajos serán valorados en función de su carácter divulgativo, contenido y calidad científica así como la presentación del mismo. El jurado estará compuesto por los coordinadores de los programas de doctorado o en investigadores en quién deleguen. La persona que defiende el póster deberá estar presente durante toda la sesión de presentación de los mismos, para poder optar así a los premios otorgados por la organización.

El hecho de concurrir a este concurso presupone la aceptación total de las presentes bases y la conformidad con las decisiones que el comité científico establezca. La FCCEE podrá solicitar a los premiados la exposición de sus trabajos en futuras exposiciones, ferias o sesiones de divulgación de la Ciencia.

5. Programa

9:30 h	Entrega de documentación
10:00-11:00 h	Sesión de pósteres distribuida por doctorados: <ul style="list-style-type: none">✓ Biotecnología y bioprocesos industriales✓ Ciencias aplicadas y medioambientales✓ Química✓ Matemáticas
10:30 h	Café
11:00-12:15 h	Conferencia San Alberto Magno Dr. Javier García Martínez "Química, el elemento humano"
12:15-12:30 h	Acto homenaje a antiguos Decanos Entrega de distinción honorífica por parte del Colegio de Químicos (sede Almería)
12:30-13:30	Comunicaciones Flash
13:30 h	Copa de vino (cortesía de DICSA SL)
16:30-17:00 h	Conferencia Plenaria Dr. Antonio Salmerón Cerdán "Big Data. Una perspectiva estadística"
17:00-17:30 h	Comunicaciones Flash
17:30-18:00 h	Café
18:00-18:30 h	Conferencia Plenaria Dr. Javier Cabello Piñar "Las Ciencias Ambientales en el Antropoceno"
18:30-19:00 h	Comunicaciones Flash
19:15 h	Entrega de premios y clausura del Minisimposio

6. Patrocinio del Minisimposio



7. Lista de títulos de pósteres

Biotecnología y bioprocesos industriales

- P-1. Efecto del tiempo de residencia hidráulico en la degradación de microcontaminantes en efluentes secundarios de EDAR mediante el proceso foto-Fenton solar operado en modo continuo en reactores raceway S.Y. Arzate-Salgado
- P-2. Un modelo acoplado de digestión y cultivo celular *in vitro* para la evaluación del potencial antitumoral de extractos alimentarios: ensayo con tomate y gazpacho M.J. Aznar-García
- P-3. Assessment of mass transfer coefficient in open raceways M. Barceló-Villalobos
- P-4. Does micropollutant removal by solar photo-fenton reduce ecotoxicity in municipal wastewater? A comprehensive study at pilot scale in open reactors M.C. Campos-Mañas
- P-5. Optimización de los protocolos existentes de rotura de la pared celular y una evaluación de la eficiencia en términos de extracción de proteína de la levadura *R. mucilaginosa* y la comparación con una levadura comercial *S. cerevisiae*. M.J. Céspedes
- P-6. LED como fuente de radiación para eliminar plaguicidas industriales mediante foto-Fenton I. de la Obra
- P-7. Evaluación del poder fotocatalítico de escorias metalúrgicas para degradar microcontaminantes B. Esteban-García
- P-8. Variación de los distintos grupos microbianos amilolíticos a lo largo del proceso de compostaje de residuos hortofrutícolas M.J. Estrella
- P-9. Evaluación de estrategias de encapsulación del probiótico *Shewanella putrefaciens* SpPdp11 para su aplicación en el cultivo de peces marinos J. Ezzizaoui
- P-10. Optimization of heavy metals removal with microalgae C. Gómez-Serrano
- P-11. Producción de *Tisochrysis lutea* (*Isochrysis galbana* T-Iso) en fotobioreactores tubulares cerrados A.M. González-Céspedes
- P-12. Avances en extracción de carotenoides en microalgas: desarrollo de un método y cuantificación C.V. González-López
- P-13. El compostaje como fuente de agentes de control biológico eficaces frente a *damping-off*: orden actinomycetales M.M. Jurado
- P-14. Optimisation of microalgae harvesting at large scale A. Martínez-García
- P-15. Purificación de biogás a biometano mediante microalgas A. Morillas

- P-16. Influence of polar lipid content on biodiesel production through transesterification catalyzed by *Rhizopus oryzae* lipase E. Navarro-López
- P-17. Functional characterization of the tomato *pollen deficient1 (pod1)* mutant reveals a key role of the *MEDIATOR COMPLEX SUBUNIT 18 (MED18)* in regulating pollen development F. Pérez-Martín
- P-18. Optimización del cultivo de cepas de cianobacterias para su aplicación en restauración de suelos degradados B. Roncero-Ramos
- P-19. Selection of microalgal strains for CO₂ capture from household waste incineration fumes C. Sepúlveda
- P-20. Efecto de la temperatura y la absorción de fotones en la cinética de degradación de microcontaminantes mediante foto-Fenton solar en reactores tipo "raceway" P. Soriano-Molina
- P-21. A methodological study of adhesion dynamics in a batch culture of the marine microalga *Nannochloropsis gaditana* O. Zeriuoh

Ciencias aplicadas y medioambientales

- P-22. Caracterización molecular y morfológica de la *Chaenorhinum exile* (Coss. & Kralik) Lange (*Antirrhinea*, Plantaginaceae). Descripción de dos nuevas subespecies A. Bujaldón-Berruezo
- P-23. Mecanismos compensatorios de alimentación o cómo adaptarse al cambio climático E. Fenoy
- P-24. Functional diversity of aquatic hyphomycetes in leaf litter of contrasting quality across an aridity gradient E. Fenoy
- P-25. Una solución óptima al problema de la distribución de energía eléctrica en micro-redes energéticas C. Hernández-Hernández
- P-26. Consideraciones sobre la influencia de las aguas subterráneas en el comportamiento hidrológico del río Andarax F. Navarro-Martínez
- P-27. Aguas superficiales permanentes asociadas con aguas subterráneas en la cuenca del río Andarax (Almería, SE de España) F. Navarro-Martínez
- P-28. Acceleration of a colloidal microrheology model based on CUDA G. Ortega
- P-29. Las cianobacterias: una prometedora herramienta para recuperar suelos degradados de zonas áridas J.R. Román
- P-30. Simbiosis entre ecología y estadística: nuestra línea de investigación R.F. Roperro
- P-31. Uso de residuos para incrementar la capacidad de retención de agua de suelos agrícolas J. Salinas

- P-32. Problemas de vivienda para aves trogloditas en zonas áridas: poniendo puertas al campo para la recuperación de cavidades naturales J. Veiga

Matemáticas

- P-33. Duality for ideals of Lipschitz maps M.G. Cabrera-Padilla
- P-34. The distribution function of a probability measure on a space with a fractal structure J.F. Gálvez-Rodríguez
- P-35. Órdenes parciales e invariantes lineales A.C. Márquez-García
- P-36. A comparative evaluation of evolutionary multiobjective algorithms on low power platforms J.J. Moreno
- P-37. Probabilistic machine learning in massive data streams using *AMIDST* D. Ramos-López
- P-38. PGMs4SDA: a public repository for Probabilistic Graphical Models M.D. Sánchez-García

Química

- P-39. Prediction of structural composition of greenhouse crop residues by nuclear magnetic resonance (NMR) L.M. Aguilera-Sáez
- P-40. Monitoring pesticide residues in soils and groundwater K. Aït-Hammi
- P-41. Polymer blends resolved by Pulse Field Gradient Diffusion NMR using a Dirac Delta non-Generalized Genetic Algorithm (DDGA) F.M. Arrabal-Campos
- P-42. Determinación de cloruro de vinilo en aguas de consumo mediante SPME-GC-MS/MS (QqQ) J.R. Belmonte-Sánchez
- P-43. Carbohydrates-based water soluble silver and gold nanoparticles for antibacterial agents delivery G. Cutrone
- P-44. Synthesis of *p*-alcoxyaromatic acids and study of their mesogenic properties F.J. Díaz-Galiano
- P-45. Rapid determination of pharmaceuticals residues in surface water by on line solid-phase extraction coupled to UHPLC A. Ferrer-Aguirre
- P-46. Isolation of *sn*-2 PUFA-based monoacylglycerols from edible oils by argentated silica gel chromatography M.J. González-Fernández
- P-47. Determinación de epiclorhidrina en aguas por microextracción en fase sólida mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas en tándem P. Hinojo-Ibáñez

- P-48. Catalytic isomerization of 2-cyclohexen-1-ol into cyclohexanone mediated by [RuCp(PTA)₂(H₂O)]⁺ B. López
- P-49. Development and validation of an automated method for the identification of pesticides in urine samples by UHPLC-Orbitrap-MS/MS M. López-García
- P-50. Synthesis of new aromatic polydentate ligands for the preparation of iron (III) chelates J.L. López-Martínez
- P-51. Degradation studies of flonicamid and determination of its metabolites in orange samples by UHPLC-Orbitrap-MS R. López-Ruiz
- P-52. Improving the analysis of early eluting polar compounds in LC-MS A. Lorenzo
- P-53. Enantiomeric determination of atropine in *Solanaceae* seeds and racemization process study by high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry J. Marín-Sáez
- P-54. Identification of contaminants of emerging concern in plant material using target and suspect screening by LC-HRMS A.B. Martínez-Piernas
- P-55. Estudio de la estabilidad de la C-Ficocianina L. Moreno-García
- P-56. A new approach to the total synthesis of sesquioneolignans M.M. Murcia-Morales
- P-57. Synthesis, crystal structure and magnetic properties of two new tempo derived complexes Y. Navarro
- P-58. Unión de eosina a lisozima: una revisión crítica M. Plaza-Garrido
- P-59. New hydrosilylation iron catalysts. The perk of ligand design Á. Raya-Barón
- P-60. Análisis de contaminantes polares en productos nutraceúticos de soja mediante LC-QqQ-MS/MS A. Romera-Torres
- P-61. Polyacrylic acid polymer brushes as substrates for the incorporation of anthraquinone derivatives A.B. Ruiz-Muelle
- P-62. Formación de fibras amiloides en proteínas quimera del dominio c-Src SH3: Src-RT, un estudio preliminar M. Salinas-García
- P-63. Modelado de la estructura de la proteína rep de ToLCNDV y búsqueda de inhibidores de su actividad J.M. Suárez Sierra
- P-64. Use of the Sonogashira-Hagihara reaction for the synthesis of liquid crystals as thermal storage systems I. Torres

EFECTO DEL TIEMPO DE RESIDENCIA HIDRÁULICO EN LA DEGRADACIÓN DE MICROCONTAMINANTES EN EFLUENTES SECUNDARIOS DE EDAR MEDIANTE EL PROCESO FOTO-FENTON SOLAR OPERADO EN MODO CONTINUO EN REACTORES RACEWAY

S.Y. Arzate-Salgado, M.C. Campos-Mañas, P. Soriano-Molina y J.A. Sánchez-Pérez

*Departamento de Ingeniería Química. Facultad de Ciencias Experimentales,
Universidad de Almería, CP 04120 Almería (España)
sandra.arzate@ual.es*

En las últimas décadas se ha detectado la presencia de contaminación antropogénica en aguas naturales. Se han utilizado diversas tecnologías para su eliminación, de las cuales el proceso foto-Fenton ha demostrado ser efectivo y versátil para su utilización a gran escala. El proceso consiste en la descomposición catalítica de peróxido de hidrógeno (H_2O_2) en presencia de hierro (Fe) y radiación UV, para producir radicales que oxidan a las moléculas orgánicas. Dicha tecnología se ha aplicado con éxito en efluentes secundarios de Estaciones Depuradoras de Aguas Residuales (EDAR).

Debido a la baja concentración de los contaminantes ($ng\ L^{-1}$ - $\mu g\ L^{-1}$), las concentraciones de reactivos (H_2O_2 y Fe) son bajas, y los tiempos de tratamiento son cortos (decenas de minutos). También se ha observado que si se utilizan reactores tubulares con diámetro de 5 cm, hay un exceso de fotones, y ese excedente puede aprovecharse incrementando el paso óptico, dando lugar a la utilización de reactores tipo raceway, con los que es posible incrementar el paso óptico, y en consecuencia aumentar la capacidad de tratamiento por unidad de área¹. A la fecha, este proceso sólo se ha operado por cargas, sin embargo, para acoplarlo en una EDAR, es necesario operarlo en modo continuo^{2,3}.

Este trabajo se enfoca en la operación en modo continuo del proceso foto-Fenton solar en reactores tipo raceway para la eliminación de microcontaminantes en efluentes secundarios de EDAR. La primera etapa fue la degradación del plaguicida acetamiprid (ACTM) en un efluente secundario sintético a pH 2.8. Después, se utilizaron efluentes secundarios provenientes de la EDAR "El Bobar" de Almería. Se evaluó el efecto de dos profundidades de líquido, 5 y 15 cm, y tres tiempos de residencia hidráulicos: 80, 40 y 20 min. Las concentraciones de reactivos fueron $5.5\ mg\ L^{-1}$ de Fe^{2+} y $30\ mg\ L^{-1}$ de H_2O_2 , dando lugar a un volumen tratado de $450\ L\ m^{-2}\ día^{-1}$ para 5 cm de profundidad en el reactor si se opera por 6 horas en invierno, con un 84% de eliminación de microcontaminantes y 66% de consumo de H_2O_2 . La operación es estable y no es fuertemente dependiente de la radiación incidente.

Agradecimientos. Los recursos de esta investigación han sido obtenidos a través del proyecto CTQ2013-46398-R del Ministerio de Economía y Competitividad (Gobierno de España), y el Fondo Europeo de Desarrollo Regional. Sandra Arzate agradece al ministerio de Economía y Competitividad por el contrato FPI (BES-2014-069722).

¹ I. Carra, L. Santos-Juanes, F.G. Ación Fernández, S. Malato, J.A. Sánchez Pérez, New approach to solar photo-Fenton operation. Raceway ponds as tertiary treatment technology, *J. Hazard. Mater.* 279 (2014) 322–329.

² D. Kumar, L.K. Pandey, J.P. Gaur, Metal sorption by algal biomass: From batch to continuous system, *Algal Res.* 18 (2016) 95–109.

³ V. Matamoros, Y. Rodríguez, Batch vs continuous-feeding operational mode for the removal of pesticides from agricultural run-off by microalgae systems: A laboratory scale study, *J. Hazard. Mater.* 309 (2016) 126–132.

UN MODELO ACOPLADO DE DIGESTION Y CULTIVO CELULAR *IN VITRO* PARA LA EVALUACIÓN DEL POTENCIAL ANTITUMORAL DE EXTRACTOS ALIMENTARIOS: ENSAYO CON TOMATE Y GAZPACHO

M.J. Aznar-García, P. Campra, R.P. Ramos, P. Fernández

*Área de Tecnología de Alimentos, Departamento de Agronomía,
Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)
pcampra@ual.es*

Existen abundantes evidencias científicas que avalan el potencial quimiopreventivo de determinados alimentos frente a la proliferación de procesos cancerígenos. En particular el tomate y productos derivados son ricos en micronutrientes con una constatada actividad antitumoral. Sin embargo, la actividad aislada de estos compuestos ha mostrado una eficacia nula o discutible en estudios clínicos. El efecto antitumoral de los alimentos no depende en exclusiva de moléculas aisladas, sino de la interacción y sinergias entre múltiples especies moleculares en el seno de las matrices alimentarias complejas¹, incluyendo combinaciones dietéticas como es el caso gazpacho andaluz evaluado aquí. Mediante una actividad denominada *metronómica*², estos *cocktails* de micronutrientes ejercen su efecto mediante bajas dosis de muy diversas especies moleculares antitumorales, actuando por diversas vías y de un modo continuo.

Por ello es necesario evaluar la actividad de las matrices alimentarias consideradas como un todo, en lo que se ha denominado *whole food approach*. Para ello, hemos combinado dos estrategias analíticas *in vitro*, diseñando un modelo acoplado de evaluación de actividad antitumoral de alimentos que intente ser lo más representativo posible de los procesos que determinan en el organismo la interacción tumor-alimento. El modelo consta de dos fases: 1ª. Digestión *in vitro* del alimento, simulando las fases salivar, gástrica e intestinal. Para ello hemos optimizado y adaptado a nuestras muestras de tomate un protocolo estandarizado por consenso internacional, denominado INFOGEST³, emanado del proyecto COST de la EU; 2ª. Ensayos controlados de actividad antiproliferativa, citotóxica y apoptótica de los digestatos anteriores frente al crecimiento de líneas tumorales cultivadas *in vitro*. En este estudio, nuestro modelo ha sido una línea estandarizada de cáncer de colon HT-29 (ATCC).

Tras la aplicación del proceso acoplado descrito con muestras de tomate caracterizadas por parámetros de madurez, así como por su contenido en carotenoides, empleados como referencia para biomoléculas de actividad antitumoral conocida, los resultados muestran una elevada actividad antiproliferativa de los digestatos de tomate. Esta actividad se ve considerablemente incrementada en digestatos de gazpacho, debido probablemente a la mayor variedad y riqueza de biomoléculas activas, así como a la mayor biodisponibilidad de las mismas por la emulsificación de compuestos liposolubles con el aceite de oliva. Futuros desarrollos del modelo son la caracterización de mecanismos de apoptosis y la optimización de la biodisponibilidad de los *cocktails* fitoquímicos presentes en los digestatos.

¹ D. R. Jacobs, Jr, and L. C. Tapsell, Food, Not Nutrients, Is the Fundamental Unit in Nutrition *Nutrition Reviews*, **2007**, Vol. 65, No. 10

² O.G. Scharovsky, L.E. Mainetti, V.R. Rozados. Metronomic chemotherapy: changing the paradigm that more is better. *Curr Oncol.* **2009** Mar; 16(2): 7–15.

³ M. Minekus, M. Alminger, P. Alvito, S. Ballance, T. Bohn, C. Bourlieu, A. Brodkorb. A standardised static *in vitro* digestion method suitable for food — An international consensus. *Food & Function*, 5 (6), **2014**, pp. 1113–1124.

ASSESSMENT OF MASS TRANSFER COEFFICIENT IN OPEN RACEWAYS

**M. Barceló-Villalobos¹, J.L. Guzmán¹, F.G. Acién Fernández², I. Martín Cara²,
and J.A. Sánchez Molina¹**

¹*Department of Informatics, Universidad de Almería,*

²*Department of Chemical Engineering, Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)*

mbarcelovillalobos@gmail.com

Raceways photobioreactors have been developed since 50's to give solutions to the industrial production of microalgae. The main advantage of this type of reactors is the simplicity and low cost to building up. However, they have some problems related with low productivity and scarce control of culture conditions. To improve the productivity of these systems and to reduce the biomass unit production costs, it is necessary to guarantee an efficient and controlled production. To achieve that, it is mandatory to improve the photobioreactor design and the optimal operational conditions, especially the mass transfer capacity. The main goal of the project is to develop a methodology for the online measurement of mass transfer coefficients and to determine the relevance of improvement of mass transfer capacity into the performance of the system. Experiments were carried out in a raceway reactor of 100 m² surface equipped with sump for CO₂ absorption and O₂ desorption, modifying the liquid flow and gas flow rate supplied to the sump. The relevance of each one the sections constituting the raceway reactor was evaluated, the oxygen mass transfer capacity into the sump at different dilution rates and gas flow rates being measured. Regarding to operational conditions, the (i) liquid speed, (ii) dilution rate and (iii) biomass concentration showed to be some of the most relevant variables. This work shows an overview of how aeration can affect to the mass transfer coefficient and that are the optimal conditions according to the raceway design and microalgae specie. Anyway, more studies with different operational conditions all over the year is needed to have confident conclusions.

Acknowledgements. The practical assistance of the staff of the Estación Experimental Las Palmerillas from Fundación Cajamar is gratefully acknowledged. Financial support was provided by the Ministry of Economy and Competitiveness (DPI2014-55932-C2-1-R).

DOES MICROPOLLUTANT REMOVAL BY SOLAR PHOTO-FENTON REDUCE ECOTOXICITY IN MUNICIPAL WASTEWATER? A COMPREHENSIVE STUDY AT PILOT SCALE IN OPEN REACTORS

M.C. Campos-Mañas, G. Rivas, A. Agüera, J.A. Sánchez-Pérez

*CIESOL, Joint Centre of the University of Almería-CIEMAT, E04120 Almería (Spain)
mcm029@ual.es*

Municipal wastewater treatment plant (MWWTP) effluents discharge is one of the major pathways of synthetic substances such as pesticides and pharmaceutical products or natural compounds as hormones in the ng to µg/L range into the aquatic ecosystem¹. Despite their low concentration in water courses has been linked to adverse biological effects in aquatic organisms such as feminization in fish populations²². Therefore, the release of micropollutants into the environment should be minimized. In this work a strategy combining monitoring of micropollutants and application of a selected battery of bioassays has been applied to evaluate the effectiveness of solar photo-Fenton process for secondary effluent treatment at neutral pH in a raceway pond reactor (RPR) following two operating strategies: the sequential iron dosage and the use of the Fe(III)-EDDS complex at pilot plant scale. The battery of bioassays including in vivo (algal growth inhibition test) and in vitro, endocrine disruptors tests (androgenic/glucocorticoid activity and estrogenicity) and cytotoxicity tests, were applied to provide a comprehensive evaluation of toxicity before and after the treatments.

The two photo-Fenton process operated at neutral pH by sequential iron additions and Fe(III)-EDDS complex addition have been successfully performed. The chemical analysis shows the reduction of the concentration of the sum of the 54 micropollutants found in the secondary municipal effluent by more than 99%. The applied battery of bioassays with both in vivo and cell based in vitro bioassays revealed the presence of compounds with endocrine disrupting potency (i.e., androgenic/glucocorticoid activity and estrogenicity) as well as compounds toxic to algae and fish cells in the municipal secondary effluent.

Overall, the micropollutant removal is in concordance with the toxicity reduction shown by the applied bioanalytical tools. Additionally, the bioassays gave a complementary insight into the effectiveness of the treatments since some compounds, which were not targeted in the chemical analysis, might produce toxicity. Taken together, solar photo-Fenton at neutral pH is a feasible advanced oxidation process to remove micropollutants and related toxicity from municipal secondary effluents. These results reinforce the use of both strategies in RPRs to enhance the quality of municipal effluents from a chemical and toxicological point of view. For the sake of water reuse, relevant results have been obtained which demonstrate for first time the feasibility of solar photo-Fenton at neutral pH in open reactors for ecotoxicity and micropollutant removal in secondary municipal wastewater.

Acknowledgements. The authors gratefully acknowledge the financial support by the Ministry of Economy and Competitiveness of Spain (Ref. CTQ2013-46398-R) and the European Regional Development Fund (ERDF). M.C. Campos-Mañas is grateful for her pre-doctoral grant from University of Almería.

¹ B. Petrie, R. Barden, B. Kasprzyk-Hordern, *Water Research* 72 (2014) 3–27.

² M. Kuzmanović, A. Ginebreda, M. Petrović, D. Barceló, *Science of Total Environment*. 503-504 (2015) 289–99G

OPTIMIZACIÓN DE LOS PROTOCOLOS EXISTENTES DE ROTURA DE LA PARED CELULAR Y UNA EVALUACIÓN DE LA EFICIENCIA EN TÉRMINOS DE EXTRACCIÓN DE PROTEÍNA DE LA LEVADURA *R. MUCILAGINOSA* Y LA COMPARACION CON UNA LEVADURA COMERCIAL *S. CEREVISIAE*

M.J. Céspedes, M.I. Sáez, T.F. Martínez

Departamento de Biología y Geología, Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
majotete@hotmail.com

En los últimos años el empleo de los probióticos y prebióticos en el campo de la acuicultura ha adquirido una gran relevancia, sobre todo a raíz de las limitaciones regulatorias del uso de antibióticos como aditivos zootécnicos en producción animal. En este sentido, son numerosos los estudios que han demostrado que las levaduras pueden ser una alternativa valiosa frente al uso de estos antibióticos para la prevención de enfermedades. Dentro de las levaduras que constituyen la microbiota autóctona del intestino de peces carnívoros marinos se han propuesto como potenciales probióticos/prebióticos las especies *Debaryomyces hansenii* y *Rhodotorula mucilaginosa*, aunque en el caso de *R. mucilaginosa* no hay apenas estudios de dichos efectos en peces. Por otro lado, se ha demostrado con distintas cepas de levaduras que sus células inactivadas y fracciones solubles de las mismas pueden tener un efecto prebiótico de resultados comparables al de las células vivas intactas, debido a los propios componentes subcelulares y productos extracelulares de las mismas.

En este contexto, el objetivo principal de este trabajo ha sido la optimización de los protocolos existentes de rotura de la pared celular y una evaluación de la eficiencia en términos de extracción de proteína de dicha levadura, la cual se comparó con levadura comercial, *Saccharomyces cerevisiae*. Como resultado se ha propuesto un método de lisis de levaduras combinando un tratamiento químico con NaOH a baja concentración en caliente con una etapa de ruptura física mediante sonicación, el cual es capaz de incrementar la extracción de proteína soluble respecto a los existentes en la literatura. Además, este método de extracción a diferencia de otros protocolos que incluyen tratamientos químicos más agresivos (como el uso de tensioactivos aniónicos o catiónicos), también es capaz de conservar la actividad enzimática de aquellas fracciones proteicas de las levaduras con actividad proteasa alcalina y amilasa.

LED COMO FUENTE DE RADIACIÓN PARA ELIMINAR PLAGUICIDAS INDUSTRIALES MEDIANTE FOTO-FENTON

I. de la Obra, B. Esteban, J.L. Casas-López y J.A. Sánchez-Pérez

*Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Almería
CIESOL, Centro Mixto Universidad de Almería-CIEMAT. 04120 Almería, España
abgarcia@ual.es*

El uso de dispositivos UV-LED en foto-reactores ha aumentado significativamente en los últimos años debido a la elevada eficiencia que presentan con respecto a las lámparas UV convencionales, su reducida disipación de calor y su larga vida útil¹. En este estudio, los dispositivos UVA-LED se utilizan como fuente de radiación para llevar a cabo el proceso foto-Fenton para tratar un efluente industrial procedente de la fumigación post-cosecha de frutas y verduras. El plaguicida modelo seleccionado fue acetamiprid (ACTM) a una concentración de 10 mg L⁻¹ a partir de una formulación comercial que aporta una concentración total de materia orgánica de 15 mg L⁻¹ expresada como Carbono Orgánico Disuelto (COD). El objetivo principal fue el estudio de la influencia de la profundidad de líquido (10, 15 y 20 cm) con diferentes longitudes de onda (375, 380 y 390 nm) en la capacidad de tratamiento definida como la velocidad de mineralización (mg COD h⁻¹) por W consumido de energía eléctrica. Las concentraciones de hierro (10 mg L⁻¹) y peróxido de hidrógeno (50 mg L⁻¹) se mantuvieron constantes, así como la temperatura (25°C) y el pH (2.8). La degradación del contaminante se produjo durante los primeros minutos de tratamiento mientras que la mineralización fue un proceso más lento. Se consiguió el mayor grado de mineralización a 380 nm para las tres profundidades ensayadas, siendo ligeramente mayor para 20 cm, que se corresponde con la mejor capacidad de tratamiento del sistema (Figura 1).

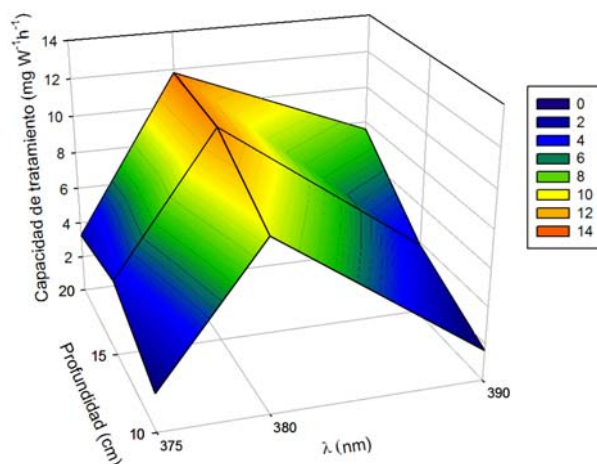


Figura 1. Variación de la capacidad de tratamiento con la profundidad y la longitud de onda.

Agradecimientos. Esta Investigación ha sido financiada por la Junta de Andalucía (P12-RNM-1437) y por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (ERDF). B. Esteban e I. de la Obra agradecen a la Junta de Andalucía sus contratos.

¹ I. de la Obra, B. Esteban, J.L. Casas y J.A. Sánchez-Pérez, *Chemical Engineering Journal*, 2016 (*In press*).

EVALUACIÓN DEL PODER FOTOCATALÍTICO DE ESCORIAS METALÚRGICAS PARA DEGRADAR MICROCONTAMINANTES

B. Esteban-García^{1,2}, R. García³, R.M. Ramírez³ y J.A. Sánchez-Pérez^{1,2}

¹CIESOL, Centro Mixto Universidad de Almería-CIEMAT, 04120 Almería, España

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

³Instituto de Ingeniería, Universidad Nacional de Méjico (UNAM), Méjico.

abgarcia@ual.es

Las escorias metalúrgicas son una combinación de óxidos metálicos y cenizas¹¹. En este trabajo se ha utilizado una escoria C_{OB} suministrada por la UNAM (Méjico) que contiene principalmente los óxidos de hierro, fayalita (Fe_2SiO_4) y magnesoferrita $Mg(Fe^{3+})_2O_4$. El uso de estos óxidos de hierro para fotocatalisis heterogénea ofrece numerosas ventajas frente a los sistemas de fotocatalisis homogénea tales como la facilidad de separación del catalizador y su bajo coste. El objetivo de este estudio fue evaluar la capacidad fotocatalítica de la escoria C_{OB} , mediante la degradación de 100 $\mu g/L$ del fungicida tiabendazol (TBZ) por foto-Fenton solar heterogéneo en distintas matrices acuosas (agua destilada (AD), efluente simulado urbano (ES) y efluente real (ER) procedente de la depuradora “El Bobar” de Almería). Se utilizaron dos densidades de C_{OB} por unidad de superficie, 0.5 mg/cm^2 y 20 mg/cm^2 , dispuestas en la base del reactor de PVC de 1 L de capacidad (correspondiente a una profundidad de líquido de 5 cm), y dos concentraciones de H_2O_2 (1.5 mM y 4.4 mM). El pH de operación fue 7 ± 0.2 y se mantuvo constante en todos los ensayos realizados. Los resultados (Figura 1) demuestran que la escoria C_{OB} tiene actividad fotocatalítica sobre el tiabendazol, produciendo su degradación en todas las matrices seleccionadas, mientras que si la muestra no es irradiada (Fenton heterogéneo), la concentración inicial del TBZ se mantiene constante durante el tratamiento. La degradación del contaminante fue más lenta a medida que la matriz era más compleja, pero en todos los casos se alcanzó la eliminación total del TBZ.

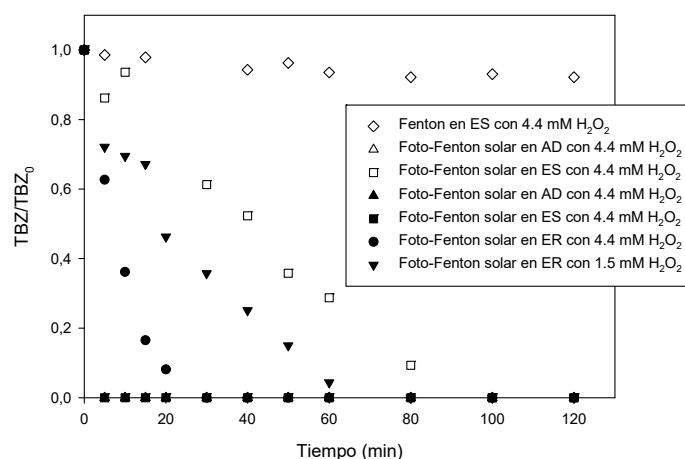


Figura 1. Degradación de TBZ en diferentes matrices acuosas mediante Fenton y foto-Fenton solar a pH neutro con dos densidades de C_{OB} por unidad de superficie, 0.5 (símbolos abiertos) y 20 mg/cm^2 (símbolos cerrados)

Agradecimientos. Esta Investigación ha sido financiada por la Junta de Andalucía (P12-RNM-1437), por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (ERDF) y por el Fondo de Colaboración Internacional del Instituto de Ingeniería de la UNAM (Méjico).

¹ B.M. Mercado-Borrayo, R. Schouwennars, J.L. Gonzalez-Chavez, R.M. Ramirez-Zamora, J. Enrion. Sci. Heal. A., 48, 24-35, 2013.

VARIACIÓN DE LOS DISTINTOS GRUPOS MICROBIANOS AMILOLÍTICOS A LO LARGO DEL PROCESO DE COMPOSTAJE DE RESIDUOS HORTOFRUTÍCOLAS

M.J. Estrella y J. Moreno

*Departamento de Biología y Geología, Facultad de Ciencias Experimentales,
Universidad de Almería, E04120Almería (España)
mjestrellagonzalez@gmail.com*

Los responsables de la transformación biológica de los materiales orgánicos durante el proceso de compostaje son los hongos, bacterias y actinobacterias. A lo largo dicho proceso ocurren cambios tanto cualitativos como cuantitativos en la microbiota activa. Algunas especies se multiplican rápidamente al inicio cambiando el medio y luego desaparecen para ser sucedidas por otras poblaciones microbianas. Dicha sucesión es debida a factores selectivos tales como el contenido de humedad, la disponibilidad de oxígeno, pH, temperatura y la relación C/N que determinan la prevalencia y sucesión de las distintas poblaciones microbianas. En estos cambios tienen un papel importante las enzimas, ya que son las encargadas directas de la degradación de los diferentes compuestos orgánicos. Prueba de ello radica en que la sucesión microbiana comentada anteriormente va a depender de la capacidad enzimática de los microorganismos.^{1,2} En este trabajo, se estudió la capacidad amilolítica de los aislados obtenidos del proceso de compostaje. Para ello, se llevó a cabo un análisis cualitativo a todas las cepas aisladas en un medio mínimo cuya única fuente de carbono fue el almidón. Transcurrido un periodo de tiempo estipulado, en función del grupo microbiano, las placas se revelaron con lugol al 1%. La amilolisis fue detectada por la aparición de un halo de aclaramiento, cuyo diámetro varió según la capacidad amilolítica del microorganismo.

En base a esto, se realizó una clasificación de los distintos grupos microbianos independientemente de si eran mesófilos o termófilos, en cada una de las etapas principales del compostaje. Como resultado, se pudo observar de forma general, que el porcentaje de bacterias en cada etapa fue prácticamente el mismo a lo largo de todo el proceso ya que pueden crecer en un amplio rango de temperaturas. Por el contrario, los hongos disminuyeron algo más de dos tercios su porcentaje en la etapa final respecto a la inicial. Esto es debido a que gran parte de ellos se destruyen a temperaturas elevadas aunque algunos quedan en estado de latencia reactivándose en el enfriamiento del proceso. El tercer grupo microbiano, actinobacterias, duplicó su porcentaje al final del proceso respecto a los existentes en la materia prima. Este incremento se debió, por un lado, a su capacidad para resistir condiciones adversas y, por otro lado, a que al disminuir la proporción del grupo fúngico disminuye la competencia por los sustratos.

¹Miller, F. C. 1991. Biodegradation of solid wastes by composting, pp. 1-25. En A.M. Martin (eds), Biological degradation of wastes. Elsevier Science Publishers, Essex IG118JU, England.

²Trautmann, T y, E. Olynciw.2000.Cornell Composting Science & Engineering.
<http://compost.css.cornell.edu/microorg.html>

EVALUACIÓN DE ESTRATEGIAS DE ENCAPSULACIÓN DEL PROBIÓTICO *Shewanella putrefaciens* SpPdp11 PARA SU APLICACIÓN EN EL CULTIVO DE PECES MARINOS

J. Ezzizaoui, M.I. Sáez, F.J. Alarcón

*Departamento de Biología y Geología, Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
jounaydae@gmail.com*

Hoy en día el rápido crecimiento de la acuicultura conlleva grandes pérdidas en los cultivos debido a las enfermedades infecciosas y a problemas de resistencia en cepas bacterianas. El uso de los probióticos en la acuicultura como alternativa a medicamentos antimicrobianos, está cada vez más extendido gracias a su sostenibilidad e innumerables beneficios. Por otra parte, resulta interesante incluir en los preparados probióticos, junto con los microorganismos, a otras sustancias que puedan mantener y/o potenciar su viabilidad hasta que alcancen su objetivo en el intestino del pez, siendo la utilización de prebióticos una alternativa de enorme interés. En este contexto, en el presente trabajo se pretende aportar nuevo conocimiento en el desarrollo y optimización de estrategias de encapsulación del probiótico *Shewanella putrefaciens* SpPdp11 para su aplicación en el cultivo de peces marinos. Para ello, se evaluó el potencial efecto de prebióticos comerciales e hidrolizados de algas y levadura sobre la viabilidad y estabilidad del probiótico SpPdp11 encapsulado en hidrogeles de alginato. Los resultados obtenidos mostraron que las sustancias prebióticas comerciales estudiadas no influyen negativamente en el crecimiento del probiótico, pudiendo ser utilizadas como potencial fuente de nutrientes por este microorganismo. En general, los hidrolizados de algas y de la levadura *Saccharomyces cerevisiae* se mostraron como potenciales prebióticos para esta bacteria, si bien su efecto parece especie específico y dosis dependiente, ya que algunos de ellos presentaron factores con capacidad para inhibir el crecimiento del probiótico, especialmente los hidrolizados de microalgas marinas. Además, el probiótico encapsulado en hidrogeles de alginato y co-encapsulado con los prebióticos comerciales se mantuvo viable tras tres meses de almacenamiento. También se incrementó la carga microbiana de las cápsulas cuando éstas se almacenaron a temperatura ambiente, mientras que la deshidratación de las cápsulas ocasionó un efecto diferente en función del prebiótico comercial incorporado.

Agradecimientos. Este trabajo se ha realizado en el marco del proyecto AGL2014-51839-C5-2-R financiado por el MINECO.

OPTIMIZATION OF HEAVY METALS REMOVAL WITH MICROALGAE

**C. Gómez-Serrano, M.M. Morales-Amaral, F.G. Acién-Fernández,
J.M. Fernández-Sevilla, E. Molina-Grima**

*Department of Chemical Engineering, University of Almería. 04120 Almería (Spain)
cinti4201@hotmail.es*

Heavy metals belong to hazardous pollutants group found in most of mine water. Chemical precipitation and filtration, chemical oxidation or reduction, electrochemical treatment, reverse osmosis, ion exchange, adsorption, and evaporation are the conventional technologies used for heavy metal removal¹. Microalgae can uptake heavy metals being competitive with other methods of metal removal². These contaminants can be removed by different mechanisms divided in two groups according to the requested time: (i) low rate processes as active uptake or chelating by extracellular metabolism on which the removal rate is determined by the biomass or extracellular compounds production rate, and (ii) high rate processes as physical or chemical adsorption, ion exchange, surface precipitation, etc. Short and long term experiments are carried out to optimize the process of heavy metals removal of mine water with microalgae.

In this research a new process for the treatment of mine waters using microalgae is proposed. For this, the mechanisms involved into the removal of heavy metals by microalgae are studied. The kinetic of heavy metals removal was determined performing experiments in a bioreactor of 800mL inoculated with *Scenedesmus almeriensis* operated in batch mode. Different amounts of heavy metals were supplied at different time; heavy metals used were Fe, Cu, Mn, Zn, Ni, Pb, Cd and Hg.

Results demonstrate that the system can be used for heavy metal removal. Fe, Cu and Pb achieved removal rates higher than 80%. Moreover, the elucidation of the kinetic of the process allows determining that a two-step process operated in continuous mode is the most promising technology to be applied in real scale mine waters treatment process. These results open the possibility to integrate the production of microalgae with mine waters management, in a similar way that integration with wastewater treatment, thus increasing the portfolio of capabilities of microalgae biotechnology.

Acknowledgements. Research Project MANAGER (Management of mine water discharges to mitigate environmental risks for post-mining period RFCR-CT-2013-00005). Estación Experimental Cajamar “Las Palmerillas”.

¹ Rearte T.A., Bozzano P.B., Andrade M.L., & Fabrizio de Iorio A. (2013). Biosorption of Cr(III) and Pb(II) by *Schoenoplectus californicus* and Insights into the Binding Mechanism. ISRN Chemical Engineering Volume 2013, Article ID 851602, 13 pages.

² Muñoz R. & Guieysse B. (2006). Algal-bacterial processes for the treatment of hazardous contaminants: A review. *Water Research* 40 2799 – 2815.

PRODUCCIÓN DE *TISOCHRYSIS LUTEA* (*ISOCHRYSIS GALBANA T-ISO*) EN FOTOBIOREACTORES TUBULARES CERRADOS

**A.M. González-Céspedes¹, D. Ippoliti², I. Martín-Cara³, J.M. Fernández-Sevilla³,
R. Pisstochi² and F.G. Ación-Fernández³**

¹Estación Experimental Cajamar “Las Palmerillas”. Paraje Las Palmerillas nº 25, Sta. María del Águila, 04710, El Ejido, Almería (España)

²Departamento de Ciencias Biológicas, Geología y Ambientales, Universidad de Bologna, 48123, Ravenna (Italia).

³Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Almería, Carretera Sacramento, s/n. 04120, Almería (España)
aliciagonzalez@fundacioncajamar.com

La industria de la acuicultura está creciendo rápidamente, uno de los factores limitantes es el desarrollo y la producción de alimento de alta calidad para satisfacer todas las necesidades alimenticias de las especies marinas que se producen en los criaderos. Además es necesario producir microalgas en fresco, sobre todo para las primeras etapas larvarias de la producción de peces. El valor de las microalgas en acuicultura se basa en el hecho de que son los productores primarios de ácidos grasos de cadena larga como omega-3 y ciertos aminoácidos esenciales. La producción actual de microalgas, destinada a acuicultura, es de baja productividad y calidad, con altos costes de producción. Los sistemas de producción tradicionales son bastante sencillos y sin ningún control del proceso de producción. Es necesario optimizar todo el proceso de producción, para mejorar la calidad y producción de la biomasa y reducir los costes.

En este estudio se analiza la producción de biomasa de *Tisochrysis lutea*, anteriormente llamada *Isochrysis aff. Galbana* (T-Iso)¹ producida en fotobiorreactores tubulares cerrados. Es conocido, que las microalgas pueden variar su composición bioquímica dependiendo de la fase de su ciclo de vida en que se encuentren debido a los grandes cambios fisiológicos a las que están sometidas².

Los experimentos se realizaron en varios fotobiorreactores tubulares de 2.6 m³ de volumen, localizados en la Estación Experimental Cajamar. El estudio consistió en modificar la tasa de dilución y evaluar la productividad y calidad de la biomasa, así como el rendimiento global del sistema. Los resultados confirman que *T. lutea* se puede producir en este tipo de sistema a escala comercial y en modo continuo. Las productividades obtenidas alcanzaron valores de hasta 20 g m⁻² día⁻¹ de biomasa y con una composición bioquímica del 45% en peso seco en proteínas y 25% en peso seco de lípidos. La utilización de este tipo de fotobiorreactor permite controlar los niveles de contaminación y de pH del cultivo. Debido a la variación de la radiación a lo largo del día se alcanzaron valores elevados de concentración de oxígeno disuelto en las horas de máxima radiación, la concentración excesiva de oxígeno disuelto reduce la productividad de biomasa hasta el 68%, así como temperaturas altas en el cultivo reduce un 63% la producción. Controlando de manera óptima estos parámetros se puede casi duplicar la productividad de biomasa de *T. lutea*. Estos resultados confirman el potencial de este tipo de fotobiorreactores para la producción comercial de microalgas de alto valor y viables en la industria biotecnológica.

¹ Bendif EM, Probert I, Schroeder DC, de Vargas C. On the description of *Tisochrysis lutea* gen. nov. sp. nov. and *Isochrysis nuda* sp. nov. in the Isochrysidales, and the transfer of *Dicrateria* to the Prymnesiales (Haptophyta). *J Appl Phycol* 25:1763–1776. 2013

² Brown, M. R., Jeffrey, S. W., Volkman, J. K., Dunstan, G. A. Nutritional properties of microalgae for mariculture. *Aquaculture*, 151: 315-331. 1997

AVANCES EN EXTRACCIÓN DE CAROTENOIDES EN MICROALGAS: DESARROLLO DE UN MÉTODO Y CUANTIFICACIÓN

**C.V. González-López, J. Camacho-Rodríguez, M.C. Cerón-García,
L. López-Rosales and E. Molina-Grima**

*Área de Ingeniería Química, Departamento de ingeniería, Escuela Superior de Ingeniería,
Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)
cynthiagonzalez@ual.es*

Las microalgas presentan un alto contenido de pigmentos naturales, por lo que resultan una fuente interesante de estos compuestos. Se ha demostrado que los carotenoides presentan propiedades de interés humano tales como actividad antioxidante, anticancerígenas inmunomodulación, etc. El mercado de los alimentos funcionales basados en microalgas está creciendo, por lo que el proceso de extracción de los carotenoides presentes en las mismas se debe optimizar para alcanzar una alta recuperación y evitar su degradación. Este trabajo presenta un estudio integral para la recuperación de carotenoides a partir de microalgas. Se utilizaron varias microalgas (*Eustigmatophyceae*, *Chlorophyceae*, *Prymnesiophyceae*, *Prasinophyceae* y *Dinophyceae*) para optimizar la extracción de carotenoides basada en una saponificación alcalina a varias temperaturas y concentraciones de KOH en una solución monofásica tricomponente (etanol: hexano: agua, 77: 17: 6). Los resultados mostraron que las condiciones óptimas de extracción dependían de la microalga y el pigmento. Así, *Nannochloropsis* sp. y *Chlorella* sp. requieren 60°C, mientras que para *Isochrysis galbana*, *Tetraselmis suecica*, y *Protoceratium reticulatum* la temperatura óptima es inferior a 40 °C. La concentración de potasa tiene gran impacto en algunas xantofilas. Así, la fucoxantina y la vaucheriaxantina éster se degradan por completo por encima del 10% y 20% de KOH, respectivamente, mientras que la vaucheriaxantina es un 75% menor cuando se emplea más de un 20% de KOH. También se ensayaron disolventes con diferente polaridad para la recuperación: metanol, acetona: agua (92,5: 7,5), acetona: agua (95: 5), acetona: agua (97,5: 2,5), etanol: agua (96: 4), etanol absoluto, acetona, solución tricomponente (etanol: hexano: agua, 77: 17: 6), hexano: etanol (50:50), hexano: etanol (70:30), éter dietílico y hexano. Los datos mostraron que la solución tricomponentes permite la obtención de un buen rendimiento de recuperación de carotenoides totales en cada microalga, logrando resultados un 60% superiores que otros disolventes más apolares o más polares. Sin embargo, para *Isochrysis* los mejores resultados se obtuvieron con acetona: agua (92,5: 7,5). Por lo tanto, podemos concluir que el establecimiento de un método general para todas las microalgas y para cada una de ellas, no es posible, ya que la extracción de los pigmentos tiene un comportamiento diferente dependiendo de la cepa y el tipo de pigmento.

Agradecimientos. Proyecto de Excelencia de la Junta de Andalucía (P09-AGR-5334), Ministerio de Economía y Competitividad (CTQ2014-55888-C3-02) y Fondos del Programa Europeo de Desarrollo Regional.

EL COMPOSTAJE COMO FUENTE DE AGENTES DE CONTROL BIOLÓGICO EFICACES FRENTE A DAMPING-OFF: ORDEN ACTINOMYCETALES

M.M. Jurado, F. Suárez-Estrella y J. Moreno

*Departamento de Biología y Geología, Facultad de Ciencias Experimentales
Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
mjr956@ual.es*

Damping-off o muerte súbita es el término utilizado para describir una enfermedad de plantas causada por un complejo grupo de hongos y oomicetos, que ocasiona pérdidas económicas importantes en semilleros¹. El compostaje se considera una fuente idónea para la búsqueda y aislamiento de microorganismos con potencial biopesticida, capaces de suprimir o controlar este tipo de enfermedades de plantas. Destacan las actinobacterias por su capacidad para producir metabolitos antimicrobianos y otro tipo de sustancias promotoras del crecimiento vegetal². El objetivo principal de este trabajo consistió en determinar los factores bióticos implicados en la prevención o supresión precoz de hongos productores de *damping-off* en semilleros. En las tablas 1 y 2 se recogen los microorganismos empleados y las pruebas realizadas.

Tabla 1. Mejores cepas biopesticidas (identidad actinobacterias) frente a hongos productores de *damping-off* (hongos fitopatógenos empleados en los ensayos).

Cepa	Identidad actinobacterias	Hongo fitopatógenos
254	<i>Brevibacterium epidermidis</i>	<i>Fusarium oxysporum f.sp. melonis</i> CECT 20474
282	<i>Microbacterium gubbeenense</i>	<i>Rhizoctonia solani</i> CECT 2824
283	<i>Microbacterium gubbeenense</i>	<i>Pythium ultimum</i> CECT 2365
382	<i>Microbacterium ginsengiterrae</i>	<i>Phytophthora capsici</i> CECT 20433
491	<i>Microbacterium esteraromaticum</i>	
2535	<i>Rhodococcus rhodochrous</i>	

Tabla 2. Protocolos aplicados para la detección de sustancias/actividades implicadas en control biológico y su posterior aplicación en semillas de melón.

Estudio	Protocolo
Sideróforos	Solución de Cromo-Azurol S
Ácido salicílico	CIH 2N + Cloruro Férrico 0,1%
Quitinasas	Agar con quitina coloidal al 0,5%
Cianuro	Solución de picrato alcalino
Fitotoxicidad	Germinación de semillas de berro
Antagonismo	Enfrentamiento dual <i>in vitro</i>
Bioinmersión	Ensayo <i>in vivo</i>

Los resultados obtenidos corroboran lo indicado en otros trabajos sobre el efecto supresivo de las actinobacterias frente a numerosos patógenos vegetales. Se observaron diferencias entre los resultados *in vivo* e *in vitro* que podrían deberse, entre otras causas, a la triple interacción que ocurre entre agente fitopatógeno, agente de control biológico y especie vegetal, así como a la dosis de inóculo utilizado durante el proceso de *bioinmersión de las semillas*³.

Agradecimientos. Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Economía y Competitividad a través del proyecto AGL2012-36434.

¹ S. Jacob, R. Sajjalaguddam, K. Kumar, R. Varshney, H. Sudini, *J Gen Plant Pathol.* **2016.** 82, 96-104.

² Y. Goudjal, M. Zamoum, A. Meklat, N. Sabaou, F. Mathieu, A. Zitouni, *Ann Microbiol.* **2016.** 66, 91-100.

³ P.M. Johansson, L. Johansson, B. Gerhardson., *Plant Pathol.* **2003.** 52, 219-227.

OPTIMISATION OF MICROALGAE HARVESTING AT LARGE SCALE

A. Martínez-García, I. Martín, C. Gómez-Serrano, F.G. Acién and J.M. Fernández-Sevilla

*Chemical Engineering Area, Department of Engineering, Higher Engineering School, Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)
mga159@ual.es*

The use of microalgae to remove the overload of nutrients contained in agro-industrial wastewaters is being studied over the last decades. This technology allows the consumption of pollutant nutrients, as N and P, at the same time that microalgae are produced. This microalgal biomass could be transformed lately into high-end value products i.e. biofertilizers, oils and proteins, among others. The harvesting of microalgae biomass is a challenge on this type of processes. Centrifugation is a well established technology consuming too much energy whereas filtration is not well developed for microalgae biomass. Alternatively the utilization of flocculation-sedimentation processes has been proposed. Nevertheless, according to the biomass and water properties the adequate flocculants and dosage must be determined. In this research different flocculants has been evaluated, the optimal flocculants and dosage being determined. Experiments were performed according to standard methods to determine settling properties in wastewater industry, the recovery of biomass and concentration factor being finally measured. For the flocculant finally selected additional experiments were performed modifying the biomass concentration from 0.4 to 5 g/L. Results confirm that flocculants from wastewater treatment industry are suitable to recover microalgae biomass, allowing achieving biomass recovery efficiencies higher than 96% and concentration factors larger than 15 with flocculant dosage lower than 30 mg/L (Figure 1). The required dosage of flocculant per biomass unit is constant, of 5 mg/g, at biomass concentrations higher than 3 g/L, but below this value the required dosage of flocculant exponentially increase (Figure 2). This is a relevant phenomenon enforcing to large scale reactors to be designed to maximize the biomass concentration in order to reduce the final cost of harvesting process.

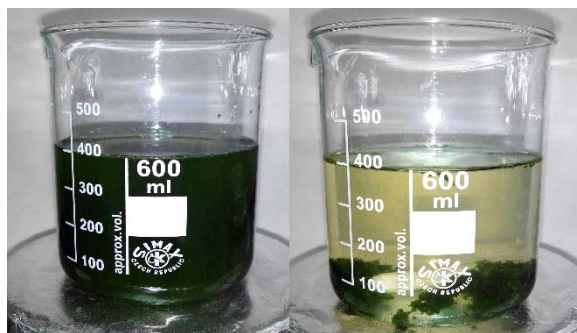


Figure 1: Recovery of biomass using flocculant as microalgae harvesting method.

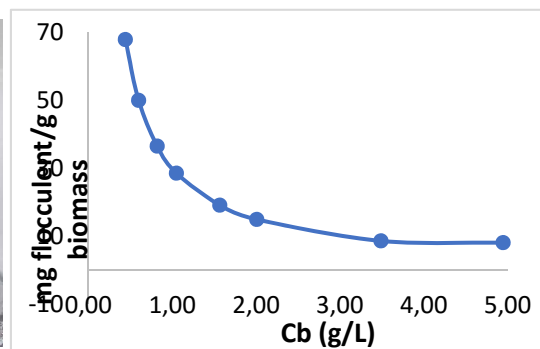


Figure 2: Curve relating the dosage of flocculant with the biomass concentration of the medium.

Acknowledgements. This research was supported by INIA (Instituto Nacional de Investigación y Tecnología Agraria y Alimentaria) through grants from FEDER (European Fund For Regional Development), project PURALGA RTA2013-0056-C03. The experiments were carried out at the research centre Estación Experimental Cajamar “Las Palmerillas”.

PURIFICACIÓN DE BIOGÁS A BIOMETANO MEDIANTE MICROALGAS

A. Morillas, C. Gómez, I. Martín, J.M. Fernández, F.G. Acién

*Departamento de Ingeniería Química, Facultad de ciencias Experimentales,
Universidad de Almería. E04120 Almería (España)
morillas.aino@gmail.es*

El biogás es el gas combustible que se produce en la digestión anaerobia de residuos orgánicos y cuyo aprovechamiento es limitado debido a su bajo poder calorífico y problemas de corrosión. El contaminante mayoritario del biogás es CO₂, el cual es requerido para la producción de microalgas, por lo que se ha propuesto un proceso de upgrading de biogás a biometano mediante cultivos de microalgas.

En el presente trabajo se presenta la puesta a punto de una tecnología basada en fotobiorreactores de microalgas. Se ensayaron distintos medios de cultivo: aguas residuales, purines diluidos al 10% y agua residual de cervecera, seleccionándose el agua residual de cervecera como la más adecuada por presentar la mayor tasa de consumo de oxígeno. Dicho estudio fue necesario debido a los límites de explosividad que existen entre el biometano y el oxígeno. Como etapa necesaria del proceso, con los datos obtenidos en interno de tasa de respiración, se ha diseñado un sistema externo para disminuir la concentración de oxígeno disuelto del medio para evitar los problemas de explosividad, el cual se acoplará a una columna de absorción de CO₂ para purificar la corriente de biogás a biometano. Aunque no se ha podido acoplar el sistema completo en externo, con los resultados obtenidos se puede concluir que es posible desarrollar un sistema de purificación de biogás a biometano que sea 100% biológico, sencillo y aplicable a pequeñas instalaciones.

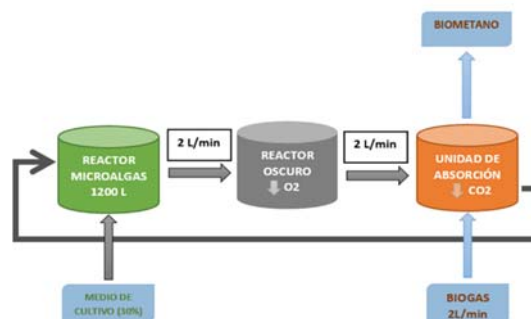


Figura 1. Esquema del sistema propuesto para para tratar 1000 L/día de biogás y producir biometano mediante un sistema 100% biológico.

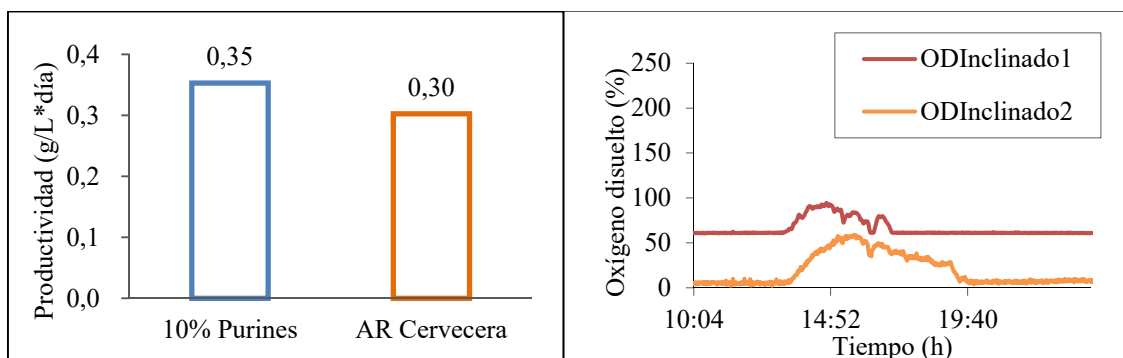


Figura 2. A la derecha, resultado de la productividad obtenida en los diferentes medios de cultivo. A la izquierda, representación de la concentración de oxígeno disuelto (%) a la entrada (ODInclinado1) y a la salida (ODInclinado2) del tanque oscuro del sistema de cultivo externo a lo largo del día con un caudal de líquido de 4 L/min.

INFLUENCE OF POLAR LIPID CONTENT ON BIODIESEL PRODUCTION THROUGH TRANSESTERIFICATION CATALYZED BY *RHIZOPUS ORYZAE* LIPASE

E. Navarro-López and A. Robles-Medina

*Department of Engineering, Area of Chemical Engineering
Faculty of Experimental Sciences,
University of Almería, E04120 Almería (Spain)
nle877@ual.es*

Fatty acid methyl esters (FAMEs, biodiesel) were produced from *Nannochloropsis gaditana* wet biomass (12% saponifiable lipids, SLs) by extraction of SLs and lipase catalyzed transesterification. In order to determine the influence of the polar lipid content on the conversion to biodiesel and the stability of the lipase through several cycles of reaction, fractions containing different polar lipid content were obtained by using seven extraction solvent systems, taking under consideration not only the lipid extraction yield but also the percentage of polar and non-polar lipids in the extracted saponifiable lipid (SL) extract. We observed that the polar lipid content in the extracted lipids depended on the polarity of the first solvent used in the extraction system. So, lipid fractions with polar lipid contents between 75.1% and 15.3% were obtained.

These lipid extracts were used to produce biodiesel by methanolysis catalyzed by the intracellular *Rhizopus oryzae* lipase, which was cultured in our laboratory, and allows reducing considerable the processing costs. The influence of the polar lipid content in the biodiesel conversion was studied. The highest conversions to biodiesel (82%) were achieved using the three SL fractions with lower polar lipid contents, which show that the FAME conversions were higher when lipid extracts with low polar lipid content were used as feedstock.

Also we studied the influence of the polar lipid content in the lipase stability throughout several cycles of transesterification reactions catalyzed by the same lipase batch. We observed that both reaction velocity (lipase activity) and final conversion decrease with the number of lipase uses. After three uses of the same lipase batch, these conversion losses were 74%, 58%, 15% and 16% for polar lipid contents of 75%, 49%, 37% and 15%, respectively; i.e., the higher the polar lipid content, the greater the conversion losses.

Acknowledgements. This research was supported by grants from the Ministerio de Ciencia e Innovación (Spain), Project CTQ2010-16931. This project was co-funded by the FEDER (European Fund For Regional Development).

FUNCTIONAL CHARACTERIZATION OF THE TOMATO *POLLEN DEFICIENT1 (POD1)* MUTANT REVEALS A KEY ROLE OF THE *MEDIATOR COMPLEX SUBUNIT 18 (MED18)* IN REGULATING POLLEN DEVELOPMENT

F. Pérez-Martín¹, F. Yuste-Lisbona¹, B. Pineda², B. García-Sogo², J.F. Campos³, E. Giménez¹, T. Antón², I. del Olmo⁴, M.A. Piñeiro⁴, J.A. Jarillo⁴, M.C. Bolarin³, V. Moreno², T. Angosto¹, J. Capel¹ and R. Lozano¹

¹*Centro de Investigación en Biotecnología Agroalimentaria (BITAL). Universidad de Almería. 04120 Almería, Spain;* ²*Instituto de Biología Molecular y Celular de Plantas (UPV-CSIC), Universidad Politécnica de Valencia. 46022 Valencia, Spain;* ³*Centro de Edafología y Biología Aplicada del Segura-CSIC. 30100 Murcia, Spain;* ⁴*Centro de Biotecnología y Genómica de Plantas, Instituto Nacional de Investigaciones Agrarias - Universidad Politécnica de Madrid. 28223 Madrid, Spain*
fpmartin@ual.es

Pollen development and maturation depend on a coordinated spatio-temporal regulation of gene expression, which takes place at early stages of reproductive development. A suitable pollen formation is required not only for biological diversity maintenance but also for fruits and seed production in agronomically important crop species. Furthermore, in fleshy fruit plants like tomato (*Solanum lycopersicum* L.), defects in pollen ontogeny produce parthenocarpic (seedless) fruits, which are considered to be of great importance since they have a high commercial value. In this study, we described the tomato enhancer trap T-DNA mutant *pollen deficient1 (pod1)* that displayed abnormalities in pollen development, which leads to production of parthenocarpic fruits. Detailed histological study of anther development displayed that microspores were degenerated at the tetrad stage but tapetum development was not affected. Cloning of flanking sequences at T-DNA integration site showed that a single T-DNA copy was located in an intergenic region of chromosome 6 between *ZINC FINGER HIT-type (ZF-HIT)* and *MEDIATOR COMPLEX SUBUNIT 18 (MED18)* genes. Expression analysis and characterization of silencing lines revealed that the *pod1* mutant phenotype relies on the tomato *MED18* gene (*POD1/SIMED18*). Interestingly, *POD1/SIMED18* is required for the proper pollen formation and fruit development, as indicated by pollen marker gene analysis. As far as we know, most genes isolated so far regulating pollen development encode transcription factors or control different stages of meiotic cycle, whereas *MED18* encodes a member of the Mediator¹ multi-protein complex involved in the regulation of RNA polymerase II transcription). Additionally, we demonstrated that *MED18* homologs share functional homology in Arabidopsis and tomato species as *POD1/SIMED18* is able to rescue the flowering time and floral organ identity abnormalities of the Arabidopsis *med18* mutant². Nevertheless, our results indicated that *SIMED18* has evolved to acquire a novel function in tomato, which is the genetic control of pollen ontogeny.

Acknowledgements. This work was supported by grants of Junta de Andalucía (P12-AGR-1482) and Ministerio de Economía y Competitividad (AGL2015-64991-C3-1-R).

¹ S. Bjorklund and C.M. Gustafsson. The yeast mediator complex and its regulation. *Trends Biochem Sci* **2005**, 30: 240-244.

² Z. Zheng, et al. Mediator Subunit18 controls flowering time and floral organ identity in Arabidopsis. *PLoS ONE* **2013**, 8: e53924.

OPTIMIZACIÓN DEL CULTIVO DE CEPAS DE CIANOBACTERIAS PARA SU APLICACIÓN EN RESTAURACIÓN DE SUELOS DEGRADADOS

B. Roncero-Ramos¹, C. Gómez², S. Chamizo^{3,1}, M.A. Muñoz-Martín⁴, F.G. Acién².

¹ *Departamento de Agronomía, Universidad de Almería, Almería*

² *Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Almería.*

³ *Departamento de Física Aplicada, Universidad de Granada, Granada.*

⁴ *Departamento de Biología, Universidad Autónoma de Madrid, Madrid. Biology Department.
brr275@inlumine.ual.es*

Las cianobacterias exhiben un amplio repertorio de capacidades metabólicas y mecanismos de adaptación que las capacitan para habitar en el más amplio rango de hábitats ecológicos, encontrándose en casi todos los biomas y continentes y especialmente en ambientes extremos como los suelos más áridos, desnudos y sometidos a elevadas temperaturas. En las zonas áridas de todo el mundo suelen aparecer en los espacios entre las plantas constituyendo una biocostra que cubre la superficie del suelo, en la que a menudo aparecen en consorcio con algas, líquenes, musgos, bacterias, hongos y partículas del suelo. Su habilidad para sobrevivir en ambientes de bajo estrés hídrico y actuar como ingenieras de los ecosistemas terrestres facilitando el establecimiento de otros organismos las ha convertido en un componente de gran interés para el desarrollo de una estrategia de restauración que permita reconstruir la función ecosistémica del suelo en zonas áridas y semiáridas, tanto frías como cálidas. Su potencial para ser cultivadas “ex situ” permite obtener la cantidad de biomasa necesaria y de calidad, con la que inocular suelos degradados, promoviendo la estabilización de la superficie de los mismos, disminuyendo la erosión hídrica y eólica, aportando C y N al suelo, y facilitando la sucesión de organismos más tardíos, como musgos o plantas.

El objetivo de este estudio es optimizar el cultivo de dos cepas de cianobacterias pertenecientes al género *Nostoc* y *Scytonema*, para su posterior cultivo a gran escala e inoculación en suelos para su restauración. Ambas son especies nativas, procedentes de suelos degradados por procesos naturales o antrópicos de la provincia de Almería. Los ensayos se llevaron a cabo en columnas de burbujeo utilizando cuatro medios de cultivo diferentes con tres réplicas cada uno. Se trabajó con ciclo de luz diaria solar y agitación se llevó a cabo mediante aireación, con suplemento de CO₂ en el caso del ensayo con *Scytonema* para el control del pH. Para el ensayo con *Nostoc* se tomaron medidas diarias de absorbancia, fluorescencia de la clorofila y peso seco. En el caso de *Scytonema* y debido al crecimiento agregado de esta cianobacteria se midió diariamente la turbidez del cultivo y la fluorescencia de la clorofila.

Los datos obtenidos han permitido calcular la velocidad específica de crecimiento y productividad de biomasa de ambas cepas en función del medio de cultivo utilizado, lo que permite determinar el medio de cultivo óptimo para la producción a gran escala. Estos resultados confirman además la viabilidad de la producción de estos microorganismos para su posterior inoculación en terrenos con objeto de favorecer su recuperación.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por el proyecto RESUCI (CGL2014-59946-R) y CGL2013-44870-R del Plan Nacional de Investigación, Desarrollo e innovación; y por el programa de becas predoctorales en Medio Ambiente de la Fundación Tatiana Pérez de Guzmán el Bueno. Agradecimiento a la Fundación Cajamar por su ayuda durante la realización de los ensayos.

SELECTION OF MICROALGAL STRAINS FOR CO₂ CAPTURE FROM HOUSEHOLD WASTE INCINERATION FUMES

C. Sepúlveda, C. Gómez and F. Acién

*Department of Chemistry, Faculty of Experimental Sciences,
Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)
Claudia.sepulveda@uantof.cl*

The feasibility of the production of microalgae in large-scale for applications of CO₂ fixation has been already demonstrated for some species¹. The objective of this research is to evaluate different microalgae strains with potential to be used in large scale process for the capture of CO₂ from flue gases, under the same culture conditions, analogous to that prevailing at outdoor conditions in Paris (France). For this different microalgae have been preselected, only robust strains suitable to be produced at large scale in non-optimally controlled conditions being finally selected: *Scenedesmus almeriensis*, *Neochloris oleoabundanas*, *Spirulina platensis*, *Nostoc commune* var, in addition to bloom from Seine river. Experiments were performed in bubble column photobioreactors of 300 mL, aerated at 0.2 v/v/min, with pH control at 8.0 by on demand injection of pure CO₂ and temperature control at 25°C. Experiments were performed under artificial solar cycle with mean daily irradiance of 800 µE/m²s. Different culture medium were essayed: Arnon culture medium as control, in addition to Seine River water enriched with nutrients (Arnon), artificial Seine River water with nutrients (Arnon), and artificial Seine River water with fertilizers instead pure chemicals, but at the same concentration that Arnon. For all the experiments the biomass concentration and fluorescence of chlorophylls were measured daily.

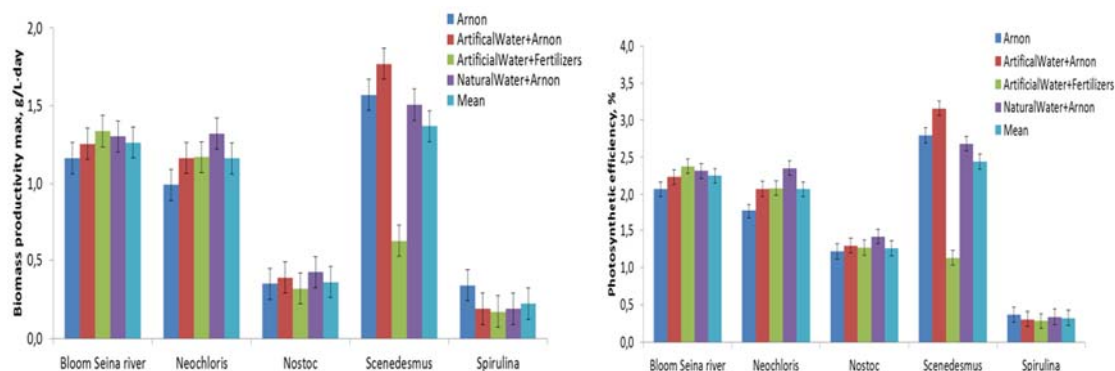


Figure 1: Variation of biomass productivity (g/L·day) and photosynthetic efficiency (%) of selected strains as a function of culture medium used.

Results of biomass productivity and photosynthetic efficiency confirm that the used methodology was adequate, allowing to identify *Scenedesmus almeriensis* strain and Bloom from Seine river consortium as the most promising strains to be studied in detail in the next steps.

Acknowledgements. This work was financed by SETEC Company (France) by project “Bioplastics production from carbon captured in household waste incineration fumes” and it was performed in collaboration with Foundation CAJAMAR.

¹ de Morais MG, Costa JA V. Isolation and selection of microalgae from coal fired thermoelectric power plant for biofixation of carbon dioxide. *Energy Convers Manag* 48:2169–2173. **2006**.

² Morales-Amaral M del MMM, Gómez-Serrano C, Acién FGG, Fernández-Sevilla JMJM, Molina-Grima E. Outdoor production of *Scenedesmus* sp. in thin-layer and raceway reactors using centrate from anaerobic digestion as the sole nutrient source. *Algal Res* 12:99–108. **2015**

EFECTO DE LA TEMPERATURA Y LA ABSORCIÓN DE FOTONES EN LA CINÉTICA DE DEGRADACIÓN DE MICROCONTAMINANTES MEDIANTE FOTO-FENTON SOLAR EN REACTORES TIPO “RACEWAY”

P. Soriano-Molina, G. Rivas, J.M. Fernández-Sevilla, J.A. Sánchez-Pérez

*Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Almería
CIESOL, Centro Mixto Universidad de Almería-CIEMAT
04120 Almería, España
paula.soriano@ual.es*

La fotocatalisis solar es considerada un tratamiento respetuoso con el medioambiente para la eliminación de microcontaminantes presentes en efluentes secundarios de EDAR. El proceso foto-Fenton es eficiente en la degradación de contaminantes orgánicos persistentes, y se ha propuesto recientemente el uso de reactores de bajo coste con paso óptico variable, tales como los reactores tipo raceway (RPR). El presente trabajo de investigación está enfocado en el desarrollo de un modelo cinético simplificado capaz de predecir la velocidad de eliminación de microcontaminantes en función de variables ambientales (irradiancia y temperatura), geométricas (paso óptico) y de operación (concentración de reactivos). Los parámetros se obtuvieron ajustando el modelo a 36 condiciones experimentales en reactores cilíndricos de 1.25 L a escala de laboratorio y posteriormente se validó en un reactor RPR a escala de planta piloto de 360 L. En el rango estudiado, 10-40 °C, el incremento de temperatura favorece el aumento de la velocidad de la reacción de foto-Fenton, debido a i) la aceleración de la oxidación del hierro ferroso en presencia de peróxido de hidrógeno (Fenton térmico); y ii) el aumento del coeficiente de absorción de la luz del hierro férrico dando lugar a una mejora en la velocidad volumétrica de absorción de fotones (VRPA). El modelo tiene en cuenta ambos efectos y ajusta adecuadamente los datos experimentales. Considerando el 90% de eliminación del plaguicida acetamiprid (ACTM) a una concentración inicial de 100 µg/L, se alcanzó una capacidad de tratamiento de 135 mg/m² h con bajas concentraciones de reactivos, 10 mg/L Fe²⁺ y 50 mg/L H₂O₂. La aplicación de esta estrategia de modelado permite la optimización del proceso, así como el diseño y la operación de los reactores tipo raceway para la eliminación de microcontaminantes mediante foto-Fenton solar.

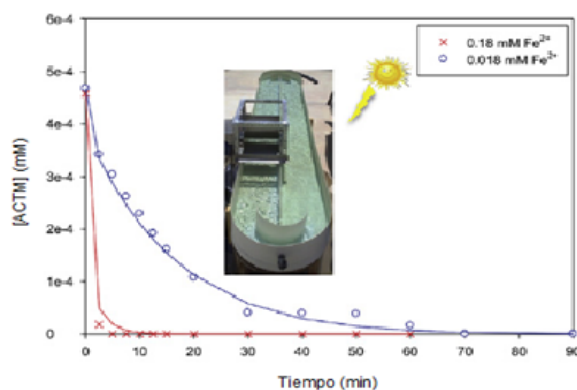


Figura 1. Perfiles de degradación de ACTM en reactor tipo “raceway” de 5 cm de profundidad de líquido, operado con 0.018 y 0.18 mM de Fe²⁺. Las líneas representan las estimaciones del modelo.

Agradecimientos. Esta Investigación ha sido financiada por el Ministerio de Economía y Competitividad (CTQ2013-46398-R), por la Junta de Andalucía (P10- RNM-05951) y por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional. Paula Soriano-Molina agradece al Ministerio de Educación, Cultura y Deporte por su beca predoctoral FPU (AP2014/01030).

A METHODOLOGICAL STUDY OF ADHESION DYNAMICS IN A BATCH CULTURE OF THE MARINE MICROALGA *NANNOCHLOROPSIS GADITANA*

O. Zeriouh, J.V. Reinoso-Moreno, L. López- Rosales, B. Sierra-Martín, M.C. Cerón-García, A. Sánchez-Mirón, A. Fernández-Barbero, F.García-Camacho, E. Molina-Grima

*Department of Engineering, Area of Chemical Engineering,
Faculty of Experimental Sciences, Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain).
oz148@ual.es*

This work addresses a complete set of procedures to study and to better understand the emerging problem of the biofouling formation in PBRs. Methodologies are described in detail for: (i) PBR and microalgae mat surface preparation, (ii) contact angles (CA) and zeta potential (ZP) measurements for both microalgal cells and PBR surfaces, and (iii) microscopic methods for studying the evolution of adhesion intensity. The impact that these methodologies may have on the photosynthetic apparatus of the cells, the biomass concentration and cell viability are also quantified. A lab-scale flat-plate PBR was used to perform a long-term batch culture of the marine microalgae *Nannochloropsis gaditana*, in which a devised rack of 25 PBR glass surfaces were submerged. To study the cell-to cell and cell-to-PBR surface interactions, the existing surface thermodynamics and colloidal theories (XDLVO) were used. The major outcomes were: (1) For *N. gaditana* the exposure time was threshold to the electric field produced by the ZP meter; (2) a linear equation is provided for predicting the PBR surface potential as a function of the culture medium's ionic strength; (3) the biofouling growth curve on the PBR surface varied in line with the growth kinetic followed by the freely suspended culture cells; (4) the devised PBR slide rack system offers a versatile experimental platform for generating biofouling results, making it suitable for the in situ efficiency evaluation of antibiofouling coatings; (5) there was a significant variation in the surface free energy of the PBR surfaces and algal mats with respect to that present at the beginning of the culture, and, consequently, the application of thermodynamic theories failed to predict cell adhesion over long-term cultivation. However, the XDLVO model satisfactorily explained the dynamics of the adhesion studied. The reported results might be useful for research in the microalgal production and PBR engineering area.

Acknowledgements. This research was funded by the Spanish Ministry of Economy and Competitiveness (Projects CTQ2013-46552-R and CTQ2014-55888-C3-02), and the European Regional Development Fund Program.

CARACTERIZACIÓN MOLECULAR Y MORFOLÓGICA DE LA *CHAENORHINUM EXILE* (COSS. & KRALIK) LANGE (*ANTIRRHINEA*, PLANTAGINACEAE). DESCRIPCIÓN DE DOS NUEVAS SUBESPECIES

A. Bujaldón-Berruezo¹, E. Salmerón-Sánchez¹, J. Güemes², F.J. Pérez-García¹, F. Martínez-Hernández¹, A.J. Mendoza-Fernández¹, J.A. Garrido-Becerra¹, M.E. Merlo-Calvente¹, J.F. Mota-Poveda¹

¹Departamento de Biología y Geología (Botánica). Universidad de Almería. E04120. Almería (España); ²Jardí Botànic, Universitat de València. E46008. València (España)
esanchez@ual.es

En el marco de un estudio filogenético sobre el género *Chaenorhinum* con el fin de determinar la existencia de linajes genéticos vinculados a sustratos edáficos especiales nos encontramos con el interesante caso de *Ch. exile*, que además de ser un gipsófito estricto, se encuentra distribuido de forma disyunta en el Mediterráneo Occidental (península Ibérica, Magreb y Sicilia). Esto hace que sea una especie de especial interés a la hora de realizar estudios filogeográficos. Además, nunca hasta ahora se han contemplado estudios genéticos orientados a la delimitación de la especie, a pesar de que ha sido objeto de numerosas revisiones taxonómicas¹.

En este contexto, el objetivo de este trabajo ha sido estudiar la especie *Ch. exile*, a partir de individuos procedentes de sustratos yesosos de Sicilia y de España, tanto desde un punto de vista genético como morfológico, debido al gran interés que supone conocer los efectos que puedan producir las diferencias existentes entre los sustratos de las dos localidades mencionadas sobre la taxonomía de una (en apariencia) misma planta.

Para la realización de dicho estudio taxonómico, a los análisis genéticos realizados previamente² mediante marcadores moleculares nucleares (secuencias ribosómicas ITS1 e ITS2) y citoplasmáticos (región cloroplástica *ndhF*), se añadió la caracterización morfológica de las distintas localidades muestreadas. El análisis contempló tanto el uso de caracteres macroscópicos (tamaño de la planta, porcentaje de ramificación, etc...) como microscópicos mediante el análisis de imágenes obtenidas por Microscopía Electrónica de Barrido (MEB). La caracterización se centró en el estudio carpológico, concretamente, en el estudio comparativo de las semillas, dado que este supone uno que a estas estructuras están asociados los caracteres distintivos más discriminantes dentro del género *Chaenorhinum*¹.

Tanto los resultados morfológicos como los genéticos mostraron una clara diferenciación entre las poblaciones sicilianas y españolas de *Ch. exile*. Desde el punto de vista morfológico, difirieron tanto en el porte de la planta como en la caracteres de la semilla, siendo significativamente más grande esta en las plantas españolas, además de presentar una forma ligeramente diferente y un color más claro. Esta diferenciación morfológica, junto con el soporte filogenético que indica que las muestras están considerablemente separadas, apoyaría la segregación de *Ch. exile* en dos subespecies.

Agradecimientos: a Antonio López Fernández por su colaboración en la recogida de material vegetal, a Esmeralda Urea Ramos por su gran ayuda en la realización de las imágenes de MEB.

¹ C. Benedí, *Collect. Bot.* **1991**, 20, 35-77

² E. Salmerón Sánchez, A. Bujaldón Berruezo, J. Güemes, F. J. Pérez García, F. Martínez Hernández, A. J. Mendoza Fernández, J. A. Garrido Becerra, M. E. Merlo Calvente, J. F. Mota Poveda, en "*VII Congreso de Biología de la Conservación de Plantas*". Y. García Mendizabal, I. Aizpuru Oiarbide, J. Garmendia Altuna (Eds.), Arazandi, **2015**, 67.

MECANISMOS COMPENSATORIOS DE ALIMENTACIÓN O CÓMO ADAPTARSE AL CAMBIO CLIMÁTICO

E. Fenoy¹, L. González-Picón¹, J. Rubio¹, F.J. Moyano¹ y J.J. Casas^{1,2}

¹ *Departamento de Biología y Geología, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Almería, E04120 Almería;*

² *Centro Andaluz para la Evaluación y Seguimiento del Cambio Global (CAESCG), Universidad de Almería, E04120 Almería
encarnafenoy@ual.es*

Comprender cómo las especies y los ecosistemas responden al cambio climático es actualmente uno de los mayores retos de la ecología. Muchas zonas mediterráneas se caracterizan por tener un clima semiárido, y los escenarios más probables para estas regiones coinciden en un agravamiento de la aridez. Las entradas de hojarasca de la vegetación de ribera son una fuente de energía y nutrientes principal para las redes tróficas de los ríos de cabecera, y su aprovechamiento por macroinvertebrados detritívoros constituye un nexo clave en el flujo de energía a través de estas redes. Algunos estudios indican que un incremento de la aridez podría alterar la composición química de las hojas: incremento de elementos estructurales (fibras) y disminución del contenido en nutrientes (N y P). Según esto, los macroinvertebrados detritívoros de ríos en zonas áridas deberían disponer de mecanismos compensatorios de alimentación (incrementar ingesta, alimentación selectiva, aumentar el tiempo de tránsito intestinal, equipos enzimáticos muy eficientes, ...) para medrar frente a dietas de baja calidad nutricional.

En este estudio se evaluaron las estrategias de alimentación de macroinvertebrados detritívoros, fragmentadores de hojarasca, alimentándolos con dos especies de distinta calidad nutricional: *Alnus glutinosa*, especie típica de ríos méxicos con hojarasca rica en N; y *Populus alba*, especie relativamente abundante en zonas más áridas, con hojarasca más pobre en N y rica en fibra. Cada especie de hojarasca, a su vez, fue seleccionada de dos regiones distintas para disponer dos calidades intra-específicas. Los detritívoros seleccionados fueron dos especies de insectos: (*Tipula* sp. y *Allogamus mortoni*) frecuentes y abundantes en ríos de zonas méxicas con abundancia de *Alnus* (Sierra Nevada y Alcornocales), y una especie de caracol (*Melanopsis praemorsa*) abundante en ríos de zonas semiáridas con presencia de *Populus* y otras especies con hojarasca de baja calidad dietética (semiárido almeriense), pero también frecuente en alguna región húmeda (Grazalema). Para los tres taxones, no se observaron diferencias significativas en los patrones de alimentación entre regiones de origen. Las tasas de ingesta fueron menores para las dietas de peor calidad nutricional en el caso de las especies de los ríos méxicos (*Tipula* sp. y *A. mortoni*), lo que determinó tasas de crecimiento menores en relación a las dietas de mayor calidad. Sin embargo, *M. praemorsa* mostró tasas de ingesta y de crecimiento similares en todas las dietas, probablemente como consecuencia de un modo de alimentación selectivo que le permite aprovechar las partes más nutritivas de las hojas de peor calidad, evitando ingerir los nervios foliares, incluso los de menor diámetro, y de un equipo enzimático eficiente.

Agradecimientos. Este estudio ha sido financiado por el proyecto RIBARID (CGL2012-39635) [MINECO-FEDER] y por el Ministerio de Educación, Cultura y Deporte a través del contrato predoctoral FPU del que es beneficiaria E. Fenoy.

FUNCTIONAL DIVERSITY OF AQUATIC HYPHOMYCETES IN LEAF LITTER OF CONTRASTING QUALITY ACROSS AN ARIDITY GRADIENT

E. Fenoy¹, J.J. Casas^{1,2} and F.J. Moyano¹

¹ *Department of Biology and Geology, Faculty of Experimental Sciences, University of Almería, E04120 Almería;*

² *Andalusian Center for the Assessment and Monitoring of Global Change (CAESCG), University of Almería, E04120 Almería
encarnafenoy@ual.es*

Many Mediterranean areas are characterized by semiarid conditions, and most climate change scenarios forecasted for this region coincide in a further aggravation of aridity, which might determine changes in leaf quality. Leaf litter inputs are a major source of energy and nutrients for stream food webs and the degradation of these inputs by aquatic hyphomycetes is the first step in energy flow. We hypothesized that fungal decomposers would perform better (e.g. higher diversity of carbon substrate utilization profiles: CSUP) on litter species of their native range compared with non-native litter species (Home Field Advantage hypothesis; HFA), but their functioning could be modulated by abiotic stream characteristics.

To test this hypothesis we conducted a reciprocal litter transplant experiment among four regions (the semiarid lowland of Almería, the sub-humid Sierra Nevada, the humid Sierra de Cazorla, and the perhumid Alcornocales) contrasting in temperature (4-17 °C) and electric conductivity (60-3000 $\mu\text{S cm}^{-1}$) by using one native leaf-litter species per region (*Arundo donax*, *Alnus glutinosa*, *Fraxinus angustifolia* and *Rhododendron ponticum*, respectively). Community functional diversity and similarities (CSUP) across regions and species were evaluated using FF microplates (Biolog).

The functional diversity and similarities in CSUP were mainly driven by the factor 'region'. Functional richness was significantly higher in the two regions with highest temperature, but Shannon diversity was higher in the two thermally extreme regions. Significantly different CSUP were detected between the two coldest regions. The ability to use the substrates quinic acid, fumaric acid, L-serine or L-asparagine, mainly contributed to differentiate functionality among regions. The site of origin of leaf litter scarcely affected fungal functional diversity. However, higher functional richness was detected for the native/dominant leaf litter, compared to other species, in the warmest semiarid region (*giant cane*) and in the coldest Sierra Nevada (*alder*). In addition, the amplest range of variation in functional richness for giant cane was detected between these two regions. These results suggest a leading role of temperature, interacting with substrate quality/origin, on fungal activity.

Acknowledgements. This study was funded by the RIBARID Project (CGL2012-39635) (MINECO-FEDER). Encarna Fenoy was supported by a FPU grant from the Spanish Ministry of Education and Science.

UNA SOLUCIÓN ÓPTIMA AL PROBLEMA DE LA DISTRIBUCIÓN DE ENERGÍA ELÉCTRICA EN MICRO-REDES ENERGÉTICAS

C. Hernández-Hernández, F. Rodríguez, J.C. Moreno

Departamento de Informática, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario ceiA3, Centro de Investigación en Energía Solar CIESOL, Universidad de Almería, 04120, España, chdezh@ual.es

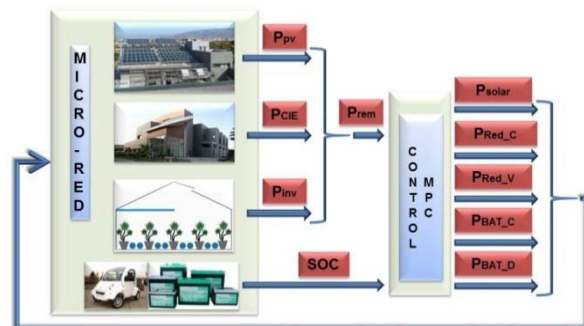
Las micro-redes energéticas son sistemas que permiten la integración de fuentes de energía renovables como fuentes de energía solar y eólica, también permiten la integración de sistemas distribuidos tales como producción combinada de calor y energía y almacenamiento de energía. Además, el uso de las fuentes locales de energía para servir cargas locales ayuda a reducir las pérdidas de energía en la transmisión y distribución, aumentando aún más la eficiencia del sistema de suministro eléctrico. Uno de los principales problemas que se están abordando a nivel mundial en el ámbito de las micro-redes energéticas se enfoca principalmente en la distribución de la energía entre los diferentes elementos que componen la micro-red, este problema se aborda con la finalidad de optimizar el uso de fuentes de energía renovables y disminuir costos.

En este trabajo se estudia una micro-red (Figura 1) y se aborda el problema que ha sido mencionado anteriormente, se presenta un esquema de control (Figura 2) donde el controlador es el que se encarga de distribuir la energía y tomar decisiones de manera óptima. El problema se puede resumir en las siguientes preguntas: ¿cuánta energía puedo utilizar de las fuentes de energía renovable?, ¿cuándo y cuánta energía puedo comprar o vender de la red eléctrica principal?, ¿cuándo y cuánta energía pueda cargar o descargar de los sistemas de almacenamiento?

Figura 1. Micro-red



Figura 2. Esquema de control



El control que se utiliza es un Control Predictivo basado en Modelo¹ (MPC por sus siglas en inglés), éste tiene la capacidad de realizar una distribución óptima de energía, ya que utiliza una función de coste y ésta se optimiza en cada instante de tiempo t , además, el proceso de optimización es realizado teniendo en cuenta las limitaciones del sistema, tales como: potencia máxima o mínima que se puede comprar de la red eléctrica, potencia máxima o mínima que se puede cargar o descargar de la batería, entre otras.

Agradecimientos. Este trabajo ha sido financiado con el Proyecto R+D+i del Plan Nacional DPI2014- 56364-C2-1-R del Ministerio de Economía y Competitividad y Fondos FEDER.

¹ Eduardo F. Camacho and Carlos Bordons. Model predictive control. Springer Science & Business Media, 2013.

CONSIDERACIONES SOBRE LA INFLUENCIA DE LAS AGUAS SUBTERRÁNEAS EN EL COMPORTAMIENTO HIDROLÓGICO DEL RÍO ANDARAX

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

*G.I Recursos Hídricos y Geología Ambiental. Dpto. de Biología y Geología. Universidad de Almería. Campus Universitario. 04120 Almería.
fjm206@ual.es*

Las interacciones entre las aguas superficiales y las aguas subterráneas en las regiones semiáridas son complejas y variadas, y favorecen a la diversidad de las aguas superficiales. Los ríos en áreas semiáridas poseen una elevada variabilidad hidrológica, relacionada con la climatología y el grado de dependencia de las aguas subterráneas. Los procesos que se desarrollan son diversos, complejos, están interrelacionados y dependen de los flujos químicos, de agua, de nutrientes y de la interacción aguas subterráneas-superficiales. Esta influencia actúa sobre la cantidad (presencia de tramos permanentes y no permanentes) y sobre la calidad, aumentando o disminuyendo la salinidad las aguas superficiales.

El río Andarax es continuo en su cabecera, temporal en su tramo medio y efímero en el tramo bajo. Estudiamos la variabilidad espacio-temporal a partir de una serie de aforos diferenciales y medidas de la conductividad eléctrica de las aguas superficiales. Distinguimos una zona de cabecera, con caudal permanente y la conductividad eléctrica más baja (223 $\mu\text{S}/\text{cm}$), reflejo del efecto de la escorrentía superficial sobre materiales metapelíticos. Aguas abajo se identifica una zona de caudal permanente, conductividad eléctrica homogénea y con valores superiores (550-600 $\mu\text{S}/\text{cm}$), que refleja la influencia del acuífero carbonatado de Sierra de Gádor sobre el flujo de agua superficial. La tercera zona corresponde a un tramo de río temporal, donde el caudal alcanza los caudales más elevados y presenta mayor variabilidad. Aquí la conductividad eléctrica sufre un incremento continuado hasta alcanzar valores máximos de 1100 $\mu\text{S}/\text{cm}$. La última zona presenta un caudal permanente y el agua más salina (1000-1800 $\mu\text{S}/\text{cm}$), lo que se asocia con la influencia subterránea del acuífero detrítico.

El caudal de agua superficial muestra una marcada variabilidad espacio-temporal y su interpretación es compleja, no obstante el papel del agua subterránea es esencial para entender la presencia permanente de agua superficial en algunos tramos del río Andarax, especialmente en el estiaje, distinguiéndose las zonas donde la influencia es notable. Finalmente es necesario hacer hincapié en la importancia de conocer los procesos vinculados a las interacciones de las aguas superficiales-subterráneas en áreas semiáridas para la gestión adecuada del agua, ya que el mantenimiento de un buen estado ecológico depende notablemente de la influencia subterránea.

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 Agraolimentario (ceiA3).

AGUAS SUPERFICIALES PERMANENTES ASOCIADAS CON AGUAS SUBTERRÁNEAS EN LA CUENCA DEL RÍO ANDARAX (ALMERÍA, SE DE ESPAÑA)

F. Navarro-Martínez, F. Sánchez-Martos, J. Gisbert-Gallego, L. Molina-Sánchez, J.P. Rigol-Sánchez

*G.I. Recursos Hídricos y Geología Ambiental. Dpto. de Biología y Geología. Universidad de Almería. Campus Universitario. 04120 Almería.
fjm206@ual.es*

En la cuenca del río Andarax se identifican cuatro zonas con presencia permanente de agua que se encuentran rodeadas de cauces que poseen un comportamiento discontinuo. Se sitúan en el tramo alto y medio del Río Andarax (1 y 2), tramo medio del río Nacimiento (3) y tramo bajo de la rambla de Tabernas (4). A partir de una serie de datos hidroquímicos se muestra la diversidad de las aguas y se discuten los factores que condicionan su salinidad.

El agua en la zona 1 tiene la composición más homogénea y la salinidad más baja de todo el área (550-650 $\mu\text{S}/\text{cm}$) en relación con la influencia del acuífero carbonato de Sierra de Gádor (CSG) sobre el flujo de agua superficial. La elevada variabilidad de los datos hidroquímicos se asocia con la posible influencia del acuífero detrítico presente en la depresión de Laujar – Fondón (DLF). La zona 2 tiene el agua más salina (1000-1800 $\mu\text{S}/\text{cm}$) de todo el río Andarax, tiene marcada variabilidad espacio-temporal, debido a la influencia de avenidas superficiales junto con la alimentación de las aguas subterráneas del acuífero detrítico (DSF), que se hace más patente en el periodo comprendido entre Mayo y Octubre. La salinidad de la zona 3 (tramo medio del río Nacimiento), es ligeramente más elevada que en la zona 2. Está vinculada a la descarga difusa del acuífero detrítico del río Nacimiento (DNA) lo que supone una homogeneización de las aguas superficiales. La zona 4 (Rambla de Tabernas) corresponde con varias zonas, discontinuas en el espacio, con una gran continuidad temporal y salinidad variable (7730-13000 $\mu\text{S}/\text{cm}$). Su disposición se asocia con la presencia de una serie de descargas difusas de aguas subterráneas cuya salinidad es ligeramente inferior (6800-9100 $\mu\text{S}/\text{cm}$).

Las características hidroquímicas de las cuatro zonas con agua permanente, situadas en un entorno de corrientes no permanentes, muestran que la interacción agua subterránea-superficial es un factor significativo para entender la diversidad química que las aguas superficiales en zonas con corrientes discontinuas. Además debe considerarse el factor climatológico, con altas tasas de evaporación, lo que puede favorecer el incremento estacional de la salinidad. El conocimiento de todos los procesos ligados a la interacción agua subterránea-superficial en áreas semiáridas es fundamental, puesto que la presencia de diferentes tipos de agua actúa como agente para favorecer la biodiversidad.

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).

ACCELERATION OF A COLLOIDAL MICRORHEOLOGY MODEL BASED ON CUDA

G. Ortega, F. Orts, A. Puertas and E.M. Garzón

*Informatics Dpt, University of Almería (ceiA3),
Group of Complex Fluids Physics, Department of Applied Physics, E04120 Almería (Spain)
gloriaortega@ual.es*

Microrheology is as an accurate technique to obtain rheological properties in soft matter from the microscopic motion of colloidal tracers used as probes, either freely diffusing in the host medium (passive), or subjected to external forces (active). A weakness of the models based on microrheology is their high computational cost. This way, High Performance Computing is of paramount relevance to develop the microrheology models¹. Here, a microrheology model based on simulations of a tracer in a bath of Brownian quasi-hard spheres is implemented on a parallel platform using a GPU and also is evaluated. Evaluation results with different sizes of the problem show that GPU programming is very appropriate to accelerate this kind of models.

In our simulations of microrheology, the system with the (large) tracer particle is equilibrated, and at time $t = 0$ the tracer starts to be pulled with a constant force through the system. The main output of the simulation is the trajectory of the tracer, that yields the effective friction coefficient from its average velocity, using the relation $F_{ext} = \gamma_{eff}(v)$, valid for the stationary regime. The tracer is allowed to travel through the simulation box more than once (obeying the periodic boundary conditions), as we could not identify any different behavior between the first and consecutive passages. Because the tracer is much larger than the bath particles, finite size effects are possible. The periodic boundary conditions in fact simulate the dynamics of a cubic array of tracer particles immersed in a Brownian bath. Theoretical analysis within the (continuous model) Navier-Stokes equation predicts a linear dependence of the inverse friction coefficient with the inverse system size, L , for vanishing forces²: $\frac{1}{\gamma_{eff}} - \frac{1}{\gamma_{\infty}} \propto \frac{1}{L}$, where γ_{∞} is the effective friction coefficient for an infinitely large system, which is the quantity we are seeking. The procedure to obtain γ_{∞} from simulations is thus to run simulations with different system sizes and extrapolate $\frac{1}{\gamma_{eff}}$ for $\frac{1}{L} \rightarrow 0$. This extrapolation is tricky as small errors in the determination of γ_{eff} for finite L imply large errors in 1 given the long distance between the data and the $\frac{1}{L} = 0$ axis. It is therefore desirable to run simulations with L as large as possible, in a reasonable time, to reduce this error.

We have implemented the model using ANSI C and CUDA interfaces. Our attention has been focused on the acceleration of the routines which evaluate every tracer trajectory. We have carried out several numerical experiments, with different number of particles in the simulations, and obtained acceleration factors have ranged up to 19x with respect to the sequential approach.

Acknowledgements. This work has been partially supported by the Spanish Ministry of Science throughout projects TIN15-66680 and FIS2015-69022-P, by J. Andalucía (P12-TIC-301 and P11-TIC7176), and by the European Regional Development Fund (ERDF).

¹ G. Ortega, A. Puertas and E.M. Garzón. *Accelerating the problem of microrheology in colloidal systems on a GPU*. The Journal of Supercomputing. doi: 10.1007/s11227-016-1867-8. 2016

² H. Hasimoto. *On the periodic fundamental solutions of the Stokes equations and their application to viscous flow past a cubic array of spheres*. Journal of Fluid Mechanics, 5:317-328. 1959

LAS CIANOBACTERIAS: UNA PROMETEDORA HERRAMIENTA PARA RECUPERAR SUELOS DEGRADADOS DE ZONAS ÁRIDAS

J.R. Román¹, B. Roncero-Ramos¹, S. Chamizo^{2,1}, E. Rodríguez-Caballero^{3,1}, M. Ángeles Muñoz-Martín⁴, Pilar Mateo⁴, Yolanda Cantón¹

¹ Departamento de Agronomía, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Almería, E04120 Almería (España)

² Departamento de Física Aplicada, Universidad de Granada, 18010 Granada (España)

³ Multiphase Chemistry Department. Max Planck Institute for Chemistry. Mainz (Alemania)

⁴ Departamento de Biología de la Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid (España)
jrf979@ual.es

La restauración de suelos degradados en ecosistemas áridos y semiáridos se ha centrado en lograr el establecimiento de una cubierta vegetal que incremente la capacidad de retención del suelo. No obstante, las altas temperaturas y la ausencia de agua que son características en estas zonas dan lugar a bajas tasas de supervivencia. Bajo estas condiciones, es necesaria una etapa previa enfocada a mejorar la fertilidad y la estabilidad del suelo que garantice el éxito de una restauración con plantas. Las cianobacterias son habitantes comunes en suelos áridos, donde viven en asociación con otros organismos que en conjunto forman la biocostra del suelo. Las cianobacterias son capaces de mejorar la disponibilidad de agua, la fertilidad, y la estabilidad del suelo, y además son capaces de tolerar temperaturas extremas y niveles de radiación UV muy elevados. Todas estas propiedades convierten a las cianobacterias en organismos pioneros capaces de colonizar ambientes adversos, y que ofrecen un gran potencial para la restauración de zonas degradadas. El objetivo de este estudio fue evaluar el efecto de la inoculación con cianobacterias sobre diferentes propiedades de suelos degradados procedentes de dos áreas semiáridas del sureste de España: un sistema de badlands en el Desierto de Tabernas y una cantera de calizas en Gádor, ambas en la provincia de Almería. Se aislaron cianobacterias nativas de los suelos a inocular que representan tres géneros de cianobacterias fijadoras de nitrógeno (*Nostoc*, *Scytonema* y *Tolypothrix*), y se hicieron crecer en un medio de cultivo en condiciones de laboratorio. Cada inóculo perteneciente a cada género fue inoculado (2g/L), individualmente y mezcladas, sobre 80 g de cada tipo de suelo en placas de Petri. Se evaluó el desarrollo de la biocostra durante 3 meses bajo condiciones de laboratorio durante el cual se aplicaron dos tratamientos de irrigación. Después de 3 meses, se midió el flujo neto de CO₂ de los suelos y la respuesta espectral de la superficie, y se tomaron muestras de la superficie para determinar el Carbono Orgánico Total (COT).

Los suelos inoculados mostraron valores positivos de flujo neto de CO₂, indicando una fijación neta de CO₂. Esta mayor fijación de CO₂ en los suelos inoculados también se vio reflejada en los mayores contenidos de COT encontrados en aquellos suelos que fueron inoculados respecto al control. Entre tratamientos, la inoculación con la mezcla de las tres especies mostró los mayores contenidos de COT y absorbancia a 680nm (indicativo de un mayor contenido de clorofila a) en los dos tipos de suelo. Los suelos inoculados también mostraron un menor albedo en la región del visible debido al oscurecimiento de la superficie con el desarrollo de la costra de cianobacterias. El riego no tuvo un efecto significativo en las anteriores variables, por lo que la cantidad de agua no constituyó un factor limitante en el desarrollo de la biocostra. En conclusión, el uso de un consorcio de diferentes especies de cianobacterias para inocular suelos degradados parece ser una estrategia más prometedora para restaurar suelos que el uso de especies individuales. Nuestros resultados ponen de relieve los beneficios de la inoculación con cianobacterias en el desarrollo de una biocostra artificial que contribuye al secuestro de CO₂ e incrementa la fertilidad del suelo.

Agradecimientos. Este trabajo estuvo financiado por los proyectos RESUCI (CGL2014-59946-R) y CGL2013-44870-R, ambos del Plan Nacional para la Investigación, Desarrollo e Innovación, por una beca predoctoral FPU del Ministerio de Educación, Cultura y Deporte y por la fundación Tatiana Pérez de Guzmán el Bueno, bajo su programa de becas predoctorales.

SIMBIOSIS ENTRE ECOLOGÍA Y ESTADÍSTICA: NUESTRA LÍNEA DE INVESTIGACIÓN

R.F. Ropero¹, A.D. Maldonado², P.A. Aguilera¹, R. Rumí² and A. Salmerón²

*¹Departamento de Biología y Geología, ²Departamento de Matemáticas,
Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain);
rosa.ropero@ual.es*

Las Redes Bayesianas (RBs) son modelos gráficos probabilísticos ampliamente utilizados en áreas como Ciencias de la Salud o Ingeniería. Su naturaleza probabilística, la posibilidad de incluir datos de diversas fuentes y naturaleza (discreta, continua) simultáneamente, así como su estructura visual e intuitiva son las principales ventajas que hacen de estos modelos una herramienta adecuada tanto para la toma de decisiones como para la construcción de modelos predictivos.

La aplicación de las RBs en el campo de la Ecología y Medio ambiente es incipiente y prometedora, contando ya con más de 200 artículos en las últimas décadas. Si bien la mayor parte de estos trabajos emplean datos de tipo discretizado, debido a la implementación de la mayoría de software comerciales, nuestra investigación se centra en la modelización de los datos originales (continuos, o continuos y discretos simultáneamente) para la construcción de modelos predictivos. Así mismo, se está investigando su aplicación en series de datos temporales.

En este trabajo se muestra parte del trabajo conjunto de miembros del Dpto. de Biología y Geología y del Dpto. de Matemáticas de la Universidad de Almería en la aplicación de las RBs en la modelización ecológica y ambiental a través de una serie de contribuciones ya publicadas o en desarrollo. Estos ejemplos se dividen en 4 áreas:

1. Contaminación: Se han realizado estudios sobre a) el riesgo asociado a exceder determinados niveles de contaminación en aguas superficiales, y b) la clasificación de puntos de muestreo en pozos en función de las características físico-químicas de las aguas subterráneas.
2. Socioecología: En el campo de estudio de la socioecología, es importante identificar aquellos sectores del territorio que comparten una serie de características socioeconómicas y naturales. Estos estudios requieren de herramientas capaces de manejar un gran número de variables y observaciones, aportando resultados fáciles de interpretar. Se presenta un ejemplo llevado a cabo en todo el territorio andaluz.
3. Gestión de especies: Debido a la naturaleza probabilística de las RBs, no es solo posible determinar la distribución potencial de una especie, sino, dar un valor de probabilidad de dicha distribución. Además del ejemplo real de mapas de distribución potencial de dos especies andaluzas, se presenta un trabajo sobre la cuantificación de la riqueza de especies.
4. Gestión del agua: Este trabajo se está llevando a cabo en la actualidad, con la finalidad de determinar la aplicación de las RBs dentro de la gestión de los embalses andaluces, utilizando series de datos temporales.

Agradecimientos. Este trabajo está subvencionado por el Ministerio de Educación, Cultura y Deporte, mediante las becas FPU: AP2012-2117 (R.F. Ropero) y FPU2013/00547 (A.D. Maldonado).

USO DE RESIDUOS PARA INCREMENTAR LA CAPACIDAD DE RETENCIÓN DE AGUA DE SUELOS AGRÍCOLAS

J. Salinas, M. Simón, I. García, M. Salvador, F. del Moral

*Área de Edafología y Química Agrícola. Departamento de Agronomía.
Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario ceiA3
E04120 Almería (España)
jerosalinasr@gmail.com*

En Almería el consumo medio de agua para riego en invernadero es 5000-6000 m³ ha⁻¹ y⁻¹, siendo el 79,7% procedente de aguas subterráneas¹. A su vez, los invernaderos generan, al año, en torno a 65x10⁴ t de residuos vegetales² (RV) y la industria del mármol 13x10⁶ t (LM). La precipitación media anual en la provincia está entre 200 y 300 mm, siendo una de las regiones más secas de Europa. El LM tienen una elevada capacidad de retención de agua (CRA) y ha demostrado ser muy eficiente en la restauración de canteras³, mientras que el biochar procedente de los RV de invernadero puede contribuir también a incrementar la CRA. Un elevado consumo y una baja precipitación conducen a que la extracción de agua de los acuíferos de la provincia de Almería supere la recarga, provocando un agotamiento y degradación de la calidad del agua⁴, y obligan a implementar acciones para un uso más eficiente del agua de riego. El objetivo de este estudio ha sido evaluar el efecto de dos residuos en la capacidad de retención de agua en dos suelos de invernadero.

Se prepararon 3 tratamientos en macetas usando dos suelos comunes en los invernaderos, en los que se sembró lechuga y se controló periódicamente el contenido de agua. El primer tratamiento estaba compuesto por 600 g de suelo (Sx), el segundo por 200 g de lodo de mármol en el fondo y 400 g de suelo en superficie (SxM), y el tercero por 150 g de lodo de mármol en el fondo, 50 g de biochar en una capa intermedia y 400 g de suelo en superficie (SxBM). Los resultados muestran que el uso de residuos incrementa la CRA, al tiempo que el contenido volumétrico (θ_p) se mantiene relativamente alto durante más tiempo, permitiendo una reducción de la frecuencia de riego y un uso del agua más eficiente. La efectividad de los residuos incrementa en los suelos de textura más gruesa y menor tasa de evaporación.

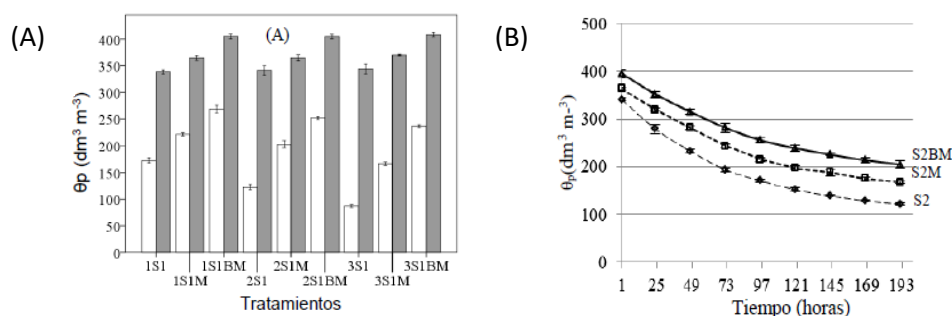


Fig. 1. (A). Media y desv. estándar del θ_p en S1 antes (blanco) y después (gris) de cada riego. (B). Media y desv. estándar del θ_p entre riegos en S2 en función del tiempo transcurrido desde el riego.

Agradecimientos. Nuestra gratitud al Ministerio de Economía y Competitividad de España y Fondos FEDER (CGL-2013-49009-C3-3-R)

¹ Céspedes, A. J., García, M. C., Pérez, J. J., Cuadrado, I. A., 2009. Caracterización de la explotación hortícola protegida almeriense. FIAPA. Fundación Cajamar. Almería. España.

² Tolón, A., Lastra, X., 2010. Agricultura intensiva del poniente almeriense. Diagnóstico e instrumentos de gestión ambiental. Electronic Journal Environmental 8, 18-40.

³ Simón, M., Del Moral, F., de Haro, S., Gómez, F., 2014. Restoration of dump deposits from quarries in a Mediterranean climate using marble industry waste. Ecological Engineering 71, 94-100.

⁴ Sánchez-Martos, F., Pulido-Bosch, A., Calaforra, J.M., 1999. Hydrogeochemical processes in an arid region of Europe (Almería, SE Spain). Applied Geochemistry 14, 735-745.

PROBLEMAS DE VIVIENDA PARA AVES TROGLODITAS EN ZONAS ÁRIDAS: PONIENDO PUERTAS AL CAMPO PARA LA RECUPERACIÓN DE CAVIDADES NATURALES

J. Veiga¹, R. Václav², M.A. Calero¹, T. Martínez¹ and F. Valera¹

¹*Department of Functional and Evolutionary Ecology, Estación Experimental de Zonas Áridas (CSIC) E04120 Almería (Spain); jveiga@eeza.csic.es*

²*Institute of Zoology, Slovak Academy of Sciences. SK84506 Bratislava (Slovakia); radovan.vaclav@savba.sk*

La elección del sitio donde nidificar es un importante determinante de la eficiencia biológica y de la dinámica poblacional de las aves, con importantes repercusiones demográficas. En ocasiones la elección de un lugar para criar está condicionada por la escasez de opciones adecuadas. Éste es particularmente el caso de las aves trogloditas (nidificantes en oquedades), para las que se han documentado declives poblacionales asociados a la limitación de lugares aptos para la reproducción. Tales declives pueden ser particularmente preocupantes si se trata de especies vulnerables o con problemas de conservación.

En tales situaciones se recurre a menudo a la instalación de cavidades artificiales (cajas nido) o a la modificación de construcciones humanas. Sin embargo, en estos casos las aves cambian su hábitat natural por otros con condiciones diferentes (ej. microclima) de las que se experimentan en condiciones naturales, lo que puede ser contraproducente.

Este trabajo propone una novedosa técnica de gestión para aves trogloditas secundarias (incapaces de excavar) que, además, se encuentran catalogadas con diversos grados de amenaza, como la Carraca europea (*Coracias garrulus*) o el Mochuelo común (*Athene noctua*). En zonas poco arboladas, como el sureste ibérico, estas especies crían en oquedades naturales excavadas por otras aves o por erosión en taludes arenosos. Tales cavidades son escasas y suelen ser ocupadas por especies como la Grajilla (*Corvus monedula*), muy abundante por verse favorecida por la actividad humana.

La técnica se basa en estudios de los criterios de selección de hábitat de las especies que pretendemos favorecer y que sugieren que éstas requieren oquedades con entradas pequeñas. Por tanto, instalamos en oquedades naturales poco aptas puertas artificiales con entradas pequeñas con el fin de hacerlas más atractivas y, además, impedir la nidificación de especies de más envergadura no deseadas.

La instalación y seguimiento de tales dispositivos en el Desierto de Tabernas durante cinco años muestra que esta técnica aumenta el atractivo de oquedades naturales no usadas. Estas oquedades manipuladas son ocupadas por carracas y mochuelos incrementando su presencia en la zona. Nuestra técnica no resulta en una trampa ecológica ya que el éxito reproductor logrado por carracas nidificantes en oquedades manipuladas es similar al observado en otros tipos de nidos no manipulados. Por todo ello, aconsejamos esta técnica para la gestión de aves trogloditas secundarias en zonas con limitación de lugares de nidificación.

DUALITY FOR IDEALS OF LIPSCHITZ MAPS

M.G. Cabrera-Padilla

*Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias Experimentales
Universidad de Almería, 04120 Almería (Spain)
m_gador@hotmail.com*

The vast amount of results and applications of ideals of linear operators between Banach spaces gave rise to the development of nonlinear versions of them. In this work, we centre our attention to the particular case of Banach ideals of Lipschitz operators from a pointed metric space X into a Banach space E . So it would be interesting to know their dual spaces. With this aim and inspired by the ideas in the book *Tensor norms and operator ideals* by A. Defant and K. Floret and by J. A. Chávez-Domínguez's paper *Duality for Lipschitz p -summing operators*, given a Lipschitz cross-norm α on the Lipschitz tensor product $X\#E$, we introduce the space $\text{Lip}_\alpha(X, E^*)$ of all α -Lipschitz operators from X into the dual space of E . In particular, taking α as the Lipschitz projective norm or the Lipschitz p -nuclear norm, we obtain the spaces of Lipschitz operators and Lipschitz p' -summing operators from X into E^* , respectively. We prove that $\text{Lip}_\alpha(X, E^*)$ is isometrically isomorphic to the dual of the Lipschitz tensor product $X\#_\alpha E$. We give some necessary and sufficient conditions for which $\text{Lip}_\alpha(X, E^*)$ to be either a Banach ideal or a Banach space of Lipschitz maps.

Acknowledgements: Others co-authors of this work are J. A. Chávez-Domínguez of University of Oklahoma (U.S.A), A. Jiménez-Vargas of University of Almería (Spain) and M. Villegas-Vallecillos of the University of Cádiz (Spain).

THE DISTRIBUTION FUNCTION OF A PROBABILITY MEASURE ON A SPACE WITH A FRACTAL STRUCTURE

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

*Department of Mathematics, Faculty of Experimental Sciences,
Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)
josegal1375@gmail.com*

This work collects and advances some results on a research line on the construction of a probability measure on a space X with the help of a fractal structure, which is in current development (see references ³, ⁴ and ⁵).

The first goal is to define a probability measure on a space from a pre-measure ω defined on a fractal structure. One of the keys is the use of the completion of the fractal structure, \tilde{X} . In this completion we define an order and describe a theory of the distribution function in this context.

The cumulative distribution function (in short, cdf) of a probability measure μ is a function $F: \tilde{X} \rightarrow [0,1]$ defined by $F(x) = \mu(\leq x)$, where $\leq x = \{y \in \tilde{X}: y \leq x\}$.

Its properties are collected in next proposition:

Properties of a cdf:

1. F is non-decreasing.
2. F is right-continuous with respect to the topology τ_{d^*} (the topology related to the supremum metric defined from the non- archimedean quasi (pseudo) metric induced by a fractal structure).
3. $\lim_{x \rightarrow \infty} F(x) = 1$ (this means that for each $\varepsilon > 0$ and $x \in X$ there exists $y \in X$ with $x \leq y$ and such that $1 - F(y) < \varepsilon$).

In fact, any function satisfying the previous conditions is the distribution function of a probability measure, μ , on \tilde{X} defined with the help of a fractal structure according to the construction made in ⁴. What is more, the value of $F(x)$ for each $x \in \tilde{X}$ can be calculated from the pre-measure ω directly.

Moreover, we should underline that μ and its corresponding cdf are biunivocally determined, as it happens in the classical case.

Acknowledgements. I would like to express my sincere gratitude to my mentor Dr. Miguel Á. Sánchez Granero for the continuous support of this study and related research, for his patience, motivation, and immense knowledge.

¹ F.G. Arenas and M.A. Sánchez-Granero, A Characterization of Non-archimedeanly Quasimetrizable Spaces, Rend. Istit. Mat. Univ. Trieste, Suppl. Vol. XXX (1999) 21-30.

² Gerald A. Edgar, Measure, Topology and Fractal Geometry, Springer New York, 1990.

³ J.F. Gálvez-Rodríguez, M.A. Sánchez-Granero, The completion of a fractal structure, Quaestiones Mathematicae, to appear.

⁴ J.F. Gálvez-Rodríguez, M.A. Sánchez-Granero, Generating a probability measure from a fractal structure, preprint.

⁵ J.F. Gálvez-Rodríguez, M.A. Sánchez-Granero, The distribution function of a probability measure on a space with a fractal structure, preprint.

⁶ M.A. Sánchez-Granero, Fractal structures, in: Asymmetric Topology and its Applications, in: Quaderni di Matematica, vol. 26, Aracne, 2012, 211-245.

ÓRDENES PARCIALES E INVARIANTES LINEALES

M. Burgos, A.C. Márquez-García, A. Morales-Campoy, P. Patricio

*Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias Experimentales,
Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)
acmarquez@ual.es*

Revisamos algunas de las definiciones modernas de órdenes parciales en estructuras abstractas surgidas como extensión del orden clásico de idempotentes, así como las descripciones de las aplicaciones lineales que preservan dichos órdenes en distintos ambientes. Los resultados mostrados pueden consultarse en ^{1,2,3}.

¹ M. Burgos, A.C. Márquez-García, A. Morales-Campoy and P. Patricio, *On mappings preserving the sharp and star partial orders*, *Linear Algebra and its Applications*, 483 **2009**, 268-292.

² M. Burgos, A.C. Márquez-García and A. Morales-Campoy, *Minus partial order and linear preservers*, *Linear and Multilinear Algebra* 64 (9) **2016**, 1814-1832.

³ M. Burgos, A.C. Márquez-García and A. Morales-Campoy, *Maps preserving the diamond partial order*, *Applied Mathematics and Computation*, 296 **2017**, 137-147.

A COMPARATIVE EVALUATION OF EVOLUTIONARY MULTI-OBJECTIVE ALGORITHMS ON LOW POWER PLATFORMS

J.J. Moreno, G. Ortega, E. Filatovas, J.A. Martínez and E.M. Garzón

*Informatics Dpt, University of Almería (ceiA3), E04120 Almería (Spain)
juanjonrg@gmail.com*

Nowadays, real-time monitoring and control systems based on Multi-Objective Optimization (MOO) are actively developed and applied in a wide variety of fields, i.e. in the implementation of real-time traffic signal control adaptive systems or in the optimization of a real-time water supply system¹. In this context, the energy efficiency of computational systems is of paramount relevance. NVIDIA Jetson cards are low-power computers designed for development of embedded applications². They incorporate Tegra processors which feature a CUDA-capable GPU. In this work, the NSGA-II algorithm, a well-known representative of EMO algorithms is considered in order to study, in terms of runtime and energy efficiency, three NSGA-II implementations (CPU, Gupta and our proposal, EFNDS) on Jetson platforms.

Tegra processors allow us to control the clock frequencies of the GPU, CPU and memory controller. Therefore, NSGA-II based on EFNDS and Gupta-NDS have been evaluated with different frequency configurations (see Fig.1).

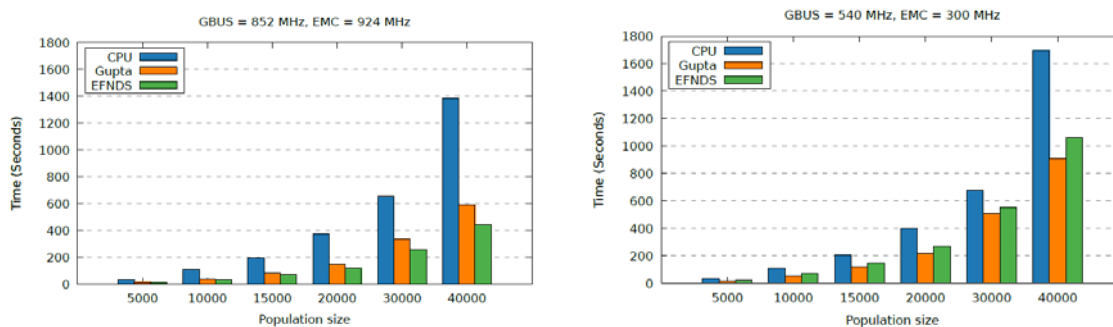


Fig. 1. Runtimes of the three versions of NSGA-II studied for DTLZ2 with $M = 5$, $N = 10000$ and varying frequencies of the GPU core clock (GBUS) and the External Memory Controller clock (EMC).

Experimental results have shown that EFNDS is dramatically influenced by the memory controller clock, while the performance of the Gupta version does not differ much. However, when we change the frequency of the GPU core clock, we can observe that EFNDS keeps its performance, while Gupta is strongly penalized. Moreover, results have shown that EFNDS achieves better performance than Gupta when several fronts are computed for a high number of objectives. This is consistent with our theoretical considerations, as Gupta's implementation does not store any dominance information in memory, while EFNDS heavily uses memory to reduce the number of redundant comparisons needed to evaluate the dominance between the individuals. Notice that the CPU performance is also affected by the EMC frequency. It proves that the memory bus is shared by CPU and GPU devices.

Acknowledgements. This work has been partially supported by the Spanish Ministry of Science throughout projects TIN15-66680, by J. Andalucía (P12-TIC-301 and P11-TIC7176), and by the European Regional Development Fund (ERDF).

¹ F.K. Odan, L.F. Ribeiro and Z. Kapelan, *Real-time multiobjective optimization of operation of water supply systems*. J Water Res Pl-Asce. 141(9), 2015.

² J. Moreno, G. Ortega, E. Filatovas, J.A. Martínez and E.M. Garzón. *Using low-power platforms for evolutionary multi-objective optimization algorithms*. The Journal of Supercomputing. doi: 10.1007/s11227-016-1862-0, 2016.

PROBABILISTIC MACHINE LEARNING IN MASSIVE DATA STREAMS USING *AMIDST*

A. Masegosa, A.M. Martínez, D. Ramos-López, R. Cabañas de Paz, H. Langseth, T.D. Nielsen, A. Salmerón y A.L. Madsen

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

The *AMIDST* toolbox is a Java library for probabilistic machine learning and data analysis, especially aimed at handling massive data streams. This toolbox makes use of probabilistic graphical models, and in particular of Bayesian networks. It has been designed to exploit the computing resources available, and therefore its scalable algorithms run in parallel in multi-core or distributed environments. *AMIDST* includes Bayesian learning algorithms based on a message-passing scheme, which supports discrete and continuous random variables from a wide range of probability distributions (the exponential family), and efficient approximate inference algorithms.

The *AMIDST* toolbox has been tested in real-world use-cases by the two industrial partners in the project, Banco de Crédito Cooperativo (BCC) – Cajamar and Daimler. In the first case, the goal was to do risk prediction in credit operations. As data is collected continuously and reported on a monthly basis, this gives rise to a streaming data classification problem. In the latter scenario, *AMIDST* has been used to prototype models for early recognition of traffic maneuver intentions. Data is continuously collected by car on-board sensors, giving rise to a large and quickly evolving data stream. These two rather different problems can be modeled and solved using *AMIDST*, proving its flexibility.

For more information on the *AMIDST* toolbox visit <http://www.amidsttoolbox.com> or <http://amidst.github.io/toolbox/>. *AMIDST* is open-source under the Apache Software License version 2.0.

Acknowledgements. This project has received funding from the European Union's Seventh Framework Programme for research, technological development and demonstration under grant agreement no 619209

PGMs4SDA: A PUBLIC REPOSITORY FOR PROBABILISTIC GRAPHICAL MODELS

M.D. Sánchez-García, J. del Sagrado, A. Salmerón and R. Rumí

*Department of Mathematics, Faculty of Experimental Sciences,
Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)
msg414@ual.es*

Probabilistic graphical models (PGMs)^{1, 2} provide a well-founded and principled approach for handling complex domains endowed with uncertainty. The Probabilistic Graphical Models for Scalable Data Analytics (PGMs4SDA) project has as main purpose to generate new methodological developments in the field of PGMs and to make them available to the research community as software implementations sufficiently sound and innovative as to place them as reference tools. Methods and algorithms in this project are being developed by research groups belonging to the universities of Almería, Castilla-La Mancha and Granada, using different systems and software development environments. This scenario made us decide to develop a web repository as a way of disseminating the results of the project and, at same time, encouraging cooperation between researchers interested in the field of PGMs or in their different uses.

The PGMs4SDA repository has two major goals: the first one is to store the key algorithms that have been designed in the project and the other one is to allow to download and use these algorithms. As an open community repository it also has additional characteristics, such as a contributors registration and login system and a peer-reviewed process for assessing a minimum quality of the contributions. Taking into account the aforementioned goals and characteristics, we decided to develop the repository as a dynamic web site based on Apache, PHP and MySQL. Any interested user can access the PGMs4SDA repository through the URL <http://www2.ual.es/PGMs4SDA/Repository/repository.php>.

Users can interact in two ways (see Fig. 1): by browsing through contents or by submitting contributions. The public part in which PGMs4SDA project's contributions and software implementations are displayed grouped according to the tasks associated to PGMs (i.e. learning, inference, classification and use cases).

Figure 1. PGMs4SDA repository: navigation and contribution views.

The figure displays two side-by-side screenshots of the PGMs4SDA repository website. The left screenshot shows the 'Key Algorithms' page, featuring a table of algorithms grouped by task. The right screenshot shows the 'Contribution Form' with various input fields for submitting a new algorithm.

Task	Sub-Task	Model	Algorithm
Learning	Structural		
Learning	Structural		
Learning	Structural		
Learning	Structural		
Learning	Structural		
Learning	Structural		
Learning	Structural		
Learning	Structural		
Learning	Structural		
Learning	Structural		
Learning	Structural		
Learning	Structural		
Learning	Structural		

The Contribution Form includes fields for: Algorithm name, Task, Subtask, PGM (Model), Description, Reference text, Reference url, Software instructions, Software license, Software implementation language, and Software Package. A 'Submit' button is at the bottom.

Acknowledgements. This research has been funded by Spanish Ministry of Economy and Competitiveness under project TIN2013-46638-C3-1-P.

¹ N. Friedman, D. Koller, *Probabilistic Graphical Models. Principles and Techniques*, MIT Press, 2009.

² A. Nicholson, K. Korb, *Bayesian Artificial Intelligence*, Chapman Hall/CRC, 2010.

PREDICTION OF STRUCTURAL COMPOSITION OF GREENHOUSE CROP RESIDUES BY NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE (NMR)

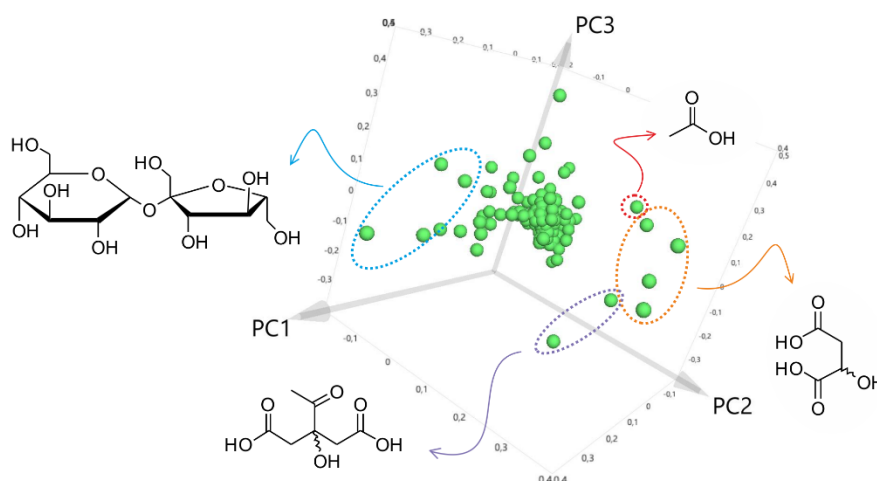
L.M. Aguilera-Sáez,¹ M. F. Terol-Plá,¹ A. J. Callejón-Ferre,² I. Fernández¹

¹ *Department of Chemistry and Physics, Research Centre for Agricultural and Food Biotechnology (BITAL), University of Almería.*

² *Department of Engineering, University of Almería.*
luisma8883@hotmail.com

There is an increase need to employ renewable energies, which is boosting the interest of farmers to take advantage of plant remains, that are counted in millions of tonnes per year in Almería. In any approach based on the use of these greenhouse crop residues or biomass, it is key its structural composition in terms of lignin, cellulose, hemicellulose and extractives. The analysis of this composition is usually carried out by time-consuming and very tedious standardized analytical methods. Thus, prediction models for structural composition based on, for instance, near infrared (NIR) or Raman spectroscopies have been reported.¹

We describe herein a multivariate prediction model for structural composition of biomass based on NMR spectroscopy. The crop species considered were corgette (*Cucurbita pepo* L.), pepper (*Cucumis sativus* L.), aubergine (*Solanum melongena* L.), tomato (*Solanum lycopersicum* L.), bean (*Phaseolus vulgaris* L.), pepper (*Capsicum annum* L.), water melon (*Citrillus vulgaris* Schrad.) and melon (*Cucumis melo* L.). These eight species represent nearly 100% of all the crops grown in Almería's greenhouses. In order to reduce and select the significant variables of our model, chemometric analysis starting with a principal component analysis (PCA) were applied to all the NMR spectral replicates (in overall 80). The adjusted R² values obtained for lignin and cellulose were superior than 0.93, whereas for hemicellulose and extractives were above 0.78 and 0.85, respectively. All this values significantly improved those found for NIR or Raman, which locates NMR as a valuable tool not only to predict composition, but also to identify specific metabolites and eventually localized potential markers which could serve as monitoring composition indicators (see Figure below).



Acknowledgements. We thank Junta de Andalucía (excellence project P12-FQM-2668) for financial support.

¹ Lupoi, J. S.; Singh, S.; Simmons, B. A.; Henry, R. J. *Bioenerg. Res.* **2014**, *7*, 1-23.

MONITORING PESTICIDE RESIDUES IN SOILS AND GROUNDWATER

**K. Aït-Hammi^{1,2,3}, M.D. Ureña-Amate², M.M. Sociás-Viciana²,
M.M. Urbano-Juan²**

¹Department of Chemistry, Laboratory of Materials Chemistry, University of Oran 1, BP 1524 El-M'Naouer, Oran, Algeria. ² Department of Chemistry and Physics, Agroalimentary Campus of International Excellence, ceiA3, University of Almeria, 04120, Almeria, Spain. ³ Technical and Scientific Research Centre in Physico-Chemical Analyses, BP 384, Siège ex-Pasna Industrial Zone, Bou-Ismaïl CP 42004, Tipaza, Algeria. aithamikhina@yahoo.fr

Flusilazole is a widely used fungicide around the world but it could lead to soil and water contamination, reason why knowledge of the physicochemical characteristics of soils, and the study of the behavior of these compounds in it, are necessary to predict their potential environmental impact¹. Flusilazole retention on agricultural soils of Algeria was studied in laboratory batch experiments. Factors conditioning the fate of Flusilazole were also investigated: soil nature, Flusilazole formulation, exchange acidity, cation exchange capacity and soil pH. Taking into account that pesticide adsorption/desorption in soils is one of the main factors which control the transformations of these compounds and the effectiveness of their application, the present study addresses the effect of the use of a commercial peat as organic amendment in the adsorption/desorption process of flusilazole in two Algerian soils from the region of Oran.

The K_f values obtained from the fit of experimental data to the Freundlich model (Table I) showed that for all the soils studied, Flusilazole molecules had a higher affinity for the surface of the soils as the percentage of peat used in the amendment increased. The important role of the organic matter (OM) was also confirmed by the good correlation existing between the K_{OC} values and the percentage of OM of the soils². The different behaviour of soil sample 2 could be justified if we take into account its lower clay content. In the original soil, the organic matter could form clay-humic complexes which could facilitate the interaction with the Flusilazole molecules. The addition of exogenous OM disturbs this adsorption mechanism, then decreasing the retention capacity of the sample 2. This fact is confirmed by the lower values of K_{OC} obtained for the amended soils. The study of the adsorption-desorption process in the original and amended soils indicated a high hysteresis degree in all cases, the $K_{f\text{desorption}}$ parameter being much higher than $K_{f\text{adsorption}}$, thus confirming the irreversibility of the flusilazole adsorption process and therefore, its low pollution potential.

The study of the adsorption-desorption process of flusilazole in the Algerian soils indicated that the organic amendment improves, in general, the adsorption capacity of these soils, decreasing the possibility of leaching and reducing the risks of groundwater contamination.

Table I. Physico-chemical characterization of the soils and K_f , K_{OC} and H parameters

Soil	Sample 1			Sample 2		
	0%	6%	18%	0%	6%	18%
% OM	3.03	4.54	6.38	3.81	5.52	5.41
% Clay	28.9	23.2	18.9	5.16	2.16	2.16
$K_{f\text{ads}}$	0.05	0.06	0.09	0.13	0.15	0.15
$K_{f\text{des}}$	0.15	0.21	0.38	0.33	0.5	0.58
$K_{OC} \cdot 10^2$	13.9	15.2	23.1	66.2	43.7	51.6
H	0.2	0.21	0.21	0.43	0.24	0.25

Acknowledgments: The authors of this work thanks the AECID funding awarded through the Integrated Action A1/035959/11.

¹ Arthur David , Cristina Botías, Alaa Abdul-Sada, Elizabeth Nicholls, Ellen L. Rotheray, Elizabeth M. Hill, Dave Goulson. *Environment international* 88, (2016) p.169-178 .

² M.C. Fernández, L. Cox, M.C. Hermosín, J. Cornejo, *Pest Manag. Sci.*, 62 (12), (2006) p. 1207.

POLYMER BLENDS RESOLVED BY PULSE FIELD GRADIENT DIFFUSION NMR USING A DIRAC DELTA NON-GENERALIZED GENETIC ALGORITHM (DDGA)

F.M. Arrabal-Campos,¹ J.D. Álvarez,² A. García-Sancho³ and I. Fernández¹

1 Department of Chemistry and Physics, Research Centre for Agricultural and Food Biotechnology (BITAL), University of Almería.

2 Department of Informatics – CIESOL, ceiA3, University of Almería.

*3 Chemical Laboratory, AIMPLAS (Plastic Technology Center), Paterna (Spain).
fmarrabal@ual.es*

Mixture analysis is a complex task especially when the polymers have the same nature (comprise identical NMR spectra), and there are only differences in their molecular weight. Herein, we describe a DDGA which has been applied to PGSE diffusion NMR for the first time. The results showed that our approach reconstructs satisfactorily diffusion coefficients in a blend of polymers. A comparison with established methods such as ITAMeD, CONTIN and TRAI_n has been performed, and showed that only DDGA did not fail in the estimation of accurate D-values and, thus, in the prediction of average-weight molecular weights.¹

Similarly, DDGA has proven its strength and rapidness in small molecules discrete components, showing comparable performance to ITAMeD. The new algorithm outlined in this work is expected to be extremely useful for many applications in the polymer field, and specifically in blends. Current work is focus on the programming of the algorithm towards faster performances.

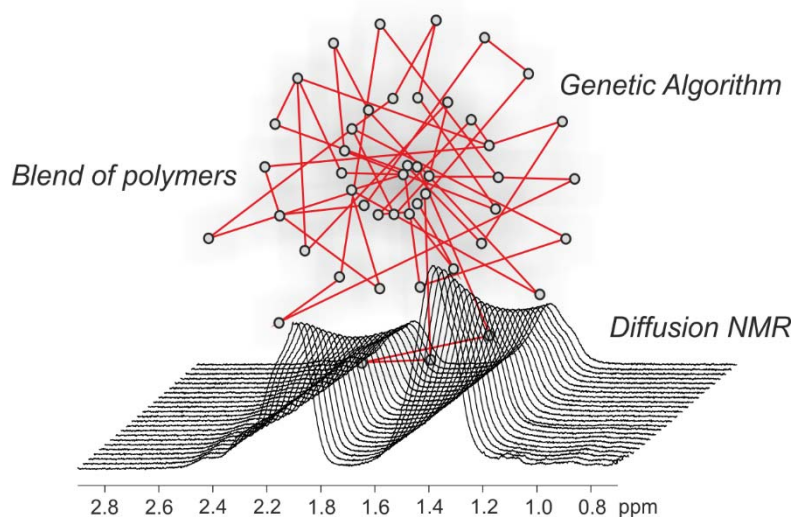


Figure 1. ¹H NMR signal attenuation for a mixture of polystyrene samples with Mn of 5950, 60000 and 1020000 g mol⁻¹.

Acknowledgements. We thank Junta de Andalucía (Spain) under the project number P12-FQM-2668 and Bruker Biospin for financial support.

¹ Arrabal-Campos, F. M.; Álvarez, J. D.; García-Sancho, A.; Fernández, I. *Polym. Chem.* **2016**, submitted.

DETERMINACIÓN DE CLORURO DE VINILO EN AGUAS DE CONSUMO MEDIANTE SPME-GC-MS/MS (QqQ)

**J.R. Belmonte-Sánchez¹, F.J. Arrebola-Liébanas¹, M.M. Bayo²,
P. Hinojo-Ibáñez¹, A. Garrido-Frenich¹**

¹*Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Almería, Carretera Sacramento s/n, E-04071 Almería, España;*

²*Laboratorio Analítico Bioclínico LAB, Parque Científico-Tecnológico de Almería (PITA), E-04131, Almería
e-mail: joseraulbs@gmail.com*

El marco legislativo a nivel nacional e internacional para el control de la calidad de las aguas ha supuesto el establecimiento de una serie de normas, tanto en aguas superficiales como de riego, en relación a diferentes parámetros fisicoquímicos y biológicos. En España, la calidad de las aguas ha estado regulada a través de diferentes Reales Decretos (RDs), principalmente los RDs 849/1986¹, 140/2003² y 1620/2007³. En dichas normas, se incluye el control de contaminantes tanto inorgánicos como orgánicos, entre los que se encuentra el cloruro de vinilo. La obligación de controlar niveles muy bajos de concentración del mismo en aguas supone la necesidad de disponer de métodos analíticos seguros y suficientemente sensibles que permitan su monitorización adecuada con el fin de cumplir con la legislación vigente. Debido a la alta volatilidad y baja masa molecular del cloruro de vinilo, las técnicas cromatográficas acopladas a técnicas de espectrometría de masas son idóneas para su determinación fiable y segura.

La técnica usada para el análisis de presencia de cloruro de vinilo en muestras de aguas ha sido la separación mediante cromatografía de gases (GC) combinada con la detección mediante espectrometría de masas con analizador de triple cuadrupolo (QqQ), precedida de microextracción en fase sólida (SPME) por inmersión directa, que ha supuesto el desarrollo de un método completamente automatizado, sencillo, con un tiempo de análisis muy reducido, sin manipulación previa de la muestra y con resultados certeros, aplicable tanto a aguas de consumo como de riego. El método fue validado evaluando distintos parámetros como recuperación, precisión, linealidad, límites de detección y cuantificación.

Con el objetivo de evaluar la presencia de cloruro de vinilo en aguas de distintos lugares de la provincia de Almería, el método fue aplicado al análisis de 5 muestras de aguas de consumo y 5 muestras de aguas de riego de diferentes localizaciones, no detectándose la presencia de cloruro de vinilo en ninguna de las muestras analizadas por encima de los límites establecidos, y asegurando de este modo la calidad de nuestras aguas como libres del mismo.

Agradecimientos: Los autores agradecen a la Junta de Andalucía (Consejería de Economía, Innovación y Ciencia) y al Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) (Referencia P12-FQM-1838) el apoyo financiero.

¹ España. Real Decreto 849/1986, de 11 de abril. BOE, de 30 de abril de 1986, núm. 103, pp 15500-15537.

² España. Real Decreto 140/2003, de 7 de febrero. BOE, 21 de febrero de 2003, núm. 45.

³ España. Real Decreto 1620/2007, de 7 de diciembre. BOE, de 8 de diciembre de 2007, núm. 294, pp 50639-50661.

CARBOHYDRATES-BASED WATER SOLUBLE SILVER AND GOLD NANOPARTICLES FOR ANTIBACTERIAL AGENTS DELIVERY

G. Cutrone, J.M. Casas-Solvas and A. Vargas-Berenguel

*Group of Carbohydrates and Proteins, Department of Chemistry and Physics
University of Almeria, E04120 Almeria (Spain)
cutrone@ual.es*

The world-wide spread of antibiotic-resistant microorganisms can be viewed as an ecological consequence of the systematic use of antimicrobial agents.¹ Resistant bacteria prevail in healthcare environments where antibiotic selective pressure is intensive. Carbohydrate-based gold and silver nanoparticles (AuNPs and AgNPs) are particularly appealing to deliver drugs that are urgently required to deliver the well-documented, barely water-soluble existing drugs. The modification of the NPs surface with CDs and carbohydrates amphiphilic linkers allows drug loading. CDs can form inclusion complexes with the antibiotic, which could also be entrapped in hydrophobic pockets within the monolayer (Figure 1).² In addition, mannose mono- and oligosaccharides attached on the surface can act as targeting vectors towards the lectin Cell Specific ICAM-3 Grabbing Non-integrin (DC-SIGN) which is expressed by both macrophages and dendritic cells. *Mycobacteria tuberculosis* infects such cells via binding of the mycobacterial surface-exposed mannan with DC-SIGN.³

In this communication, we describe the preparation of gold (AuNPs) and silver (AgNPs) nanoparticles mono- and dually functionalized with multiple copies of mannose, β -CD, or both simultaneously. In addition we present the preliminary studies on the affinity of these systems toward the lectin Concanavalin A (Con A), which recognizes and strongly binds α -mannose residues in a cross-linked fashion. We demonstrate by UV-Vis the formation of cross-linked aggregates (Figure 1). The ability of these systems to load antituberculosis drugs (Rifampicin, Isoniazid, Ethionamide, Pyrazinamide) is also under study.

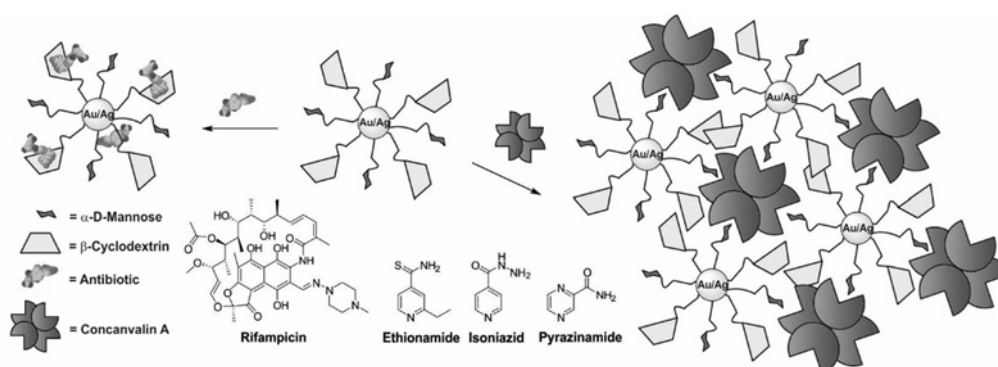


Figure 1. Interaction ConA-Hybrid AuNPs and expected loading of different antituberculosis drugs

Acknowledgements. We acknowledge the Spanish Ministry of Economy and Competitiveness—ERD Fund (Grant CTQ2013-48380-R) and the EU through a Marie Curie ITN program (CYCLON HIT 608407) for financial support.

¹ CyclonHit project webpage (<http://itn-cyclonhit.eu/>).

² A. Aykaç, M.C. Martos-Maldonado, J. M. Casas-Solvas, I. Quesada-Soriano, F. Garcia-Maroto, L. Garcia-Fuentes and A. Vargas-Berenguel, *Langmuir* **2014**, *30*, 234-242.

³ E. J. Soilleux, *Clin. Sci.* **2003**, *104*, 437-446.

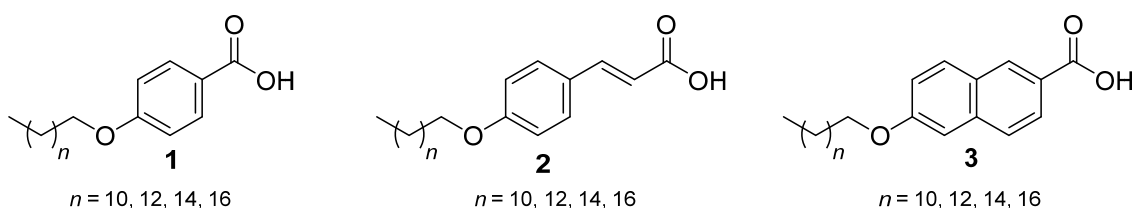
SYNTHESIS OF *p*-ALCOXYAROMATIC ACIDS AND STUDY OF THEIR MESOGENIC PROPERTIES

F. J. Díaz-Galiano, M. Álvarez-Corral, M. Muñoz-Dorado, I. Rodríguez-García

Departamento de Química y Física, ceiA3, Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
franjdg@gmail.com

Nowadays, the development of thermal storage systems adapted to processes involving steam, is increasing due to the lack of any cost-effective solution. The use of liquid crystals in this field has been proposed to overcome the deficiencies of current materials. Liquid crystals are partially ordered systems without long-range structure. Their symmetry and structure is neither that of a solid nor a liquid, and it is better explained as a mixture of both: liquid crystals flow, as liquids; but show some order, like solids. Materials that show liquid crystal phases are deemed *mesogens*. The advantages of liquid crystals in thermal storage systems include their capabilities to flow and maintain a constant temperature as the phase change takes place. Thus, convection would be the heat transfer mechanism and they would generate energy at a constant rate.^{1,2} In the present work, we have synthesized twelve mesogenic *p*-alcoxyaromatic acids derivatives of *p*-hydroxybenzoic acid (**1**), (*E*)-*p*-hydroxycinnamic acid (**2**), and 6-hydroxy-2-naphthoic acid (**3**). These compounds had been described in literature as mesogenic, but their thermodynamic properties remained unknown. Now, their liquid crystal phases have been characterized using *differential scanning calorimetry*, and their phase change temperatures and enthalpies have been established.

It has been observed that all twelve compounds are feasible candidates as thermal storage materials (high *clearing point*, high *clearing point enthalpy*, and a *mesophase temperature range* of at least 20 °C). The most promising structures among these are *p*-hexadecyloxybenzoic acid (**1** n=14) and 6-octadecyloxy-2-naphthoic acid (**3** n=16).



Acknowledgements. We thank the "Ministerio de Economía y Competitividad" (Project CTQ2015-70724-R) for financial support.

¹ Bayón, R.; Rojas, E. "Liquid crystals: a new approach for latent heat storage." *Int. J. Energy Res.* **2013**, *37*, 1737-1742.

² Demus, D.; Goodby, J.; Gray, G. W.; Spiess, H.-W.; Vill, V., *Handbook of Liquid Crystals Vol 1.*; Wiley-VCH: Germany; 1998.

RAPID DETERMINATION OF PHARMACEUTICALS RESIDUES IN SURFACE WATER BY ON LINE SOLID-PHASE EXTRACTION COUPLED TO UHPLC

A. Ferrer-Aguirre, R. Romero-González, A. Garrido-Frenich

*Group “Analytical Chemistry of Contaminants”, Department of Chemistry and Physics (Analytical Chemistry Area), Research Centre for Agricultural and Food Biotechnology (BITAL), University of Almería, Agrifood Campus of International Excellence, ceiA3, Carretera de Sacramento s/n, E-04120 Almería, Spain
afa684@inlumine.ual.es,*

The presence of pharmaceutical residues, in the environment has been considered a concern. Previous studies showed that several pharmaceuticals and their metabolites are found in wastewater systems. Up to 95% of the administered dose of human or veterinary drug can be excreted and discharged into the environment. However, most of the pharmaceuticals are not completely removed during wastewater treatment due to their high stability, and in consequence, these have also been detected in surface water, or in drinking water at traces levels. Regarding European legislation, there no regulations that define maximum allowable concentrations of these pharmaceuticals. However, the Commission Implementing Decision (EU) 2015/495 in accordance with Directive 2008/105/EC, establishes a method detection limit for diclofenac in water at 10 mg/L¹. Although there are some studies that determine different organic compounds in water, only a few of them analyze pharmaceuticals with enough sensitivity and precision to minimize the limit of detection (LOD) for these compounds. Therefore more specific methods are needed. In this work a method was developed to determine Carbamazepine, Diclofenac, Dimetilxantina, Lincomycin, Naproxen, Paracetamol and Ibuprofen in surface waters from Almeria. For the extraction, an on-line solid-phase extraction (SPE) was proposed. This kind of extraction represents many advantages such as, less sample volume and the cartridge could be reusable. For the determination and quantification of these drugs ultra high performance liquid chromatography coupled to tandem mass spectrometry (UHPLC–MS/MS) was used.

The aim of this study has been the evaluation of an analytical procedure for the determination of some contaminants of emerging concern commonly detected in environmental waters in Spain^{2,3} as diclofenac, paracetamol, ibuprofen and naproxen (analgesic and anti-inflammatory products), lincomycin (antibiotic), carbamazepine (antidepressant) and 1,7-dimethylxanthine (caffeine metabolite). The use of on-line SPE-LC-MS has been proposed for a reliable, fast, simple and green analysis of seven different analgesics and anti-inflammatory.

The developed method was validated and performance characteristics were established, studying linearity, recovery, intra-day precision, inter-day precision, and lower limits (LOD and LOQ). Despite the effectiveness of the sample treatment, matrix effect was studied. For that several concentrations from 10 to 500 ng L⁻¹, except for ibuprofen (from 50 to 1000 ngL⁻¹), performing calibration curves in solvent (methanol) and the blank environmental sample. The proposed method is reliable and sensitive and therefore it is suitable to be used for routine analysis of multiple organic trace contaminants as pharmaceuticals in environmental water, bearing in mind that it reduces analysis time, sample treatment and the amount of solvent used.

¹ Commission implementing Decision 2015/495 of 20 March 2015 establishing a watch list of substances for Union-wide monitoring in the field of water policy pursuant to Directive 2008/105/EC of the European Parliament and of the Council. Official Journal of the European Union, L 78/40 (24.3.2015).

² R. López-Serna, S. Pérez, A. Ginebreda, M. Petrovic, D. Barceló, Fully automated determination of 74 pharmaceuticals in environmental and waste waters by online phase extraction-liquid chromatography-electrospray-tandem mass spectrometry, *Talanta* 83 (2010) 410-424.

³ S. Ortiz de García, G. Pinto Pinto, P. García Encina, R. Irusta Mata. Consumption and occurrence of pharmaceutical and personal care products in the aquatic environment in Spain. *Sci. Total Environ.* 444 (2013) 451-465.

ISOLATION OF *SN*-2 PUFA-BASED MONOACYLGLYCEROLS FROM EDIBLE OILS BY ARGENTATED SILICA GEL CHROMATOGRAPHY

M.J. González-Fernández¹, R.P. Ramos-Bueno¹, J.L. Guil-Guerrero¹, M.A. Rincón-Cervera², R. Valenzuela³

¹*Food Technology Division, University of Almería, Almería (Spain)*

²*Institute of Nutrition and Food Technology, University of Chile, Santiago (Chile)*

³*Department of Nutrition, University of Chile, Santiago (Chile)*

mjgon2@hotmail.com

The fatty acid (FA) distribution on the glycerol backbone of triacylglycerols (TAG) influences their absorption, distribution, and tissue uptake. Polyunsaturated FAs (PUFAs) are better absorbed when they are esterified at the *sn*-2 position. The type of FA at the remaining locations also influences their intestinal absorption as 2-monoacylglycerols (2-MAGs)^{1,2}. Because of their characteristics, MAGs exhibit excellent emulsifying properties, being widely used in food, cosmetic, pharmaceutical and chemical industries^{3,4}. Also, different studies have demonstrated that MAGs play several physiological functions; therefore, MAG-based functional foods can help to prevent the onset of certain diseases such as colon cancer⁵.

In this study, six commercial oils; namely olive, linseed, sunflower, evening primrose, DHASCO[®] and ARASCO[®] have been fractionated by open liquid column chromatography. First, *sn*-2 MAGs were produced by using enzymatic hydrolysis reaction with porcine pancreatic lipase⁶. After that, an open column chromatography with silica gel as stationary phase was employed for separating the *sn*-2 MAGs from the hydrolysis products mixture⁷. Finally, an open column containing silica gel partially impregnated with silver nitrate as stationary phase was used to purify the different MAGs based on PUFA located at the *sn*-2 position⁸. Among MAGs, those based on linoleic (LA, 18:2n6) and arachidonic (AA, 20:4n6) acids have been isolated at high purities and yields, while the remaining MAGs showed PUFA purities above 90%. In order to assess the suitability of the purification method, the influence of acyl-migration processes were analyzed by nuclear magnetic resonance spectroscopy (1H-NMR). Several studies indicate that migration of the acyl group of MAGs tends to balance 2-MAG:1-MAG until the 1:9 ratio⁹. The whole process gave a variable rate of acyl-migration depending on the PUFA located in the glycerol backbone, giving LA and α -linoleic acid (ALA) the highest stability to the 2-MAG structure.

¹ M. Ramírez, L. Amate, A. Gil. *Early Hum Dev* **2001**; 65, 95-101.

² MA. Rincón-Cervera, I. Rodríguez-García, JL. Guil-Guerrero. *J Am Oil Chem Soc* **2009**; 86, 605-609.

³ MM. Camino Feltes, D. Oliveira, J. Mara, J. Luiz. *Food Bioprocess Tech* **2013**; 6, 17-35.

⁴ X. Wang, L. Liang, Z. Yu, L. Rui, Q. Jin, X. Wang. *Eur J Lipid Sci Technol* **2014**; 116, 627-634.

⁵ RP. Ramos Bueno, MJ. González Fernández, JL. Guil Guerrero. *NutrCancer*, **2016**; 68, 518-529.

⁶ A. López-López, AI. Castellote-Bargallo, MC. López-Sabater. *J Chromatogr B* **2001**; 760, 97-105.

⁷ MA. Rincón Cervera, E. Venegas Venegas, R. Ramos Bueno, I. Rodríguez García, JL. Guil-Guerrero. *J Biosci Bioeng* **2013**; 115, 518-522.

⁸ JL. Guil Guerrero, P. Campra-Madrid, EH. Belarbi. *Process Biochem* **2000**; 36, 341-354.

⁹ DL. Compton, KE. Vermillion, JA. Laszlo. *J Am Oil Chem Soc* **2007**; 84, 343-348.

DETERMINACIÓN DE EPICLORHIDRINA EN AGUAS POR MICROEXTRACCIÓN EN FASE SOLIDA MEDIANTE CROMATOGRAFIA DE GASES ACOPLADA A ESPECTROMETRIA DE MASAS EN TÁNDEM

P. Hinojo-Ibáñez¹, F.J. Arrebola¹, F.J. Egea-González¹, J.R. Belmonte-Sánchez¹, E. Gómez², A. Garrido-Frenich¹

¹*Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Almería, Carretera Sacramento s/n, E-04071 Almería, España;*

²*Laboratorio Analítico Bioclínico LAB, Parque Científico-Tecnológico de Almería (PITA), E-04131, Almería
phi703@gmail.es*

Epiclorhidrina (ECH), 1-cloro-2,3-epoxipropano, es un compuesto utilizado en diversos campos como la producción de resinas epoxi o elastómeros en las industrias farmacéuticas entre otros. ECH es empleada en la producción de tuberías de agua potable, así como en la síntesis de polielectrolitos catiónicos, que se utilizan en la clarificación de las aguas superficiales y residuales. ECH ha sido clasificado por la Agencia Internacional para la Investigación sobre el cáncer (IACR) y la EPA como un agente mutagénico potencial. ECH es tóxica por inhalación, por vía dérmica, por absorción oral y puede ser peligroso para el sistema nervioso central¹. La Directiva Europea 98/83/CE sobre la calidad de las aguas destinadas al consumo humano, incluyó ECH entre los parámetros químicos a tener en cuenta por la estrecha relación que mantiene ésta con la salud con un valor paramétrico de 0,1 µg/L.^{2,3}

El objetivo de este trabajo ha sido la optimización y validación de un método para la determinación de ECH en análisis de aguas destinadas al consumo humano mediante el uso de la técnica analítica de microextracción en fase sólida (SPME) con espacio cabeza (HS) y cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS/MS) usando un analizador de triple cuadrupolo (QqQ). SPME ha sido una alternativa viable a las técnicas convencionales de extracción siendo una técnica que forma parte de la química analítica verde presentando ventajas como la simplicidad en el tratamiento de muestra, ausencia en el uso de disolventes y la automatización completa del proceso por su conexión con el sistema de análisis. Ello permite obtener una sensibilidad acorde a los parámetros recientemente establecidos por la UE.^{2,3}

Agradecimientos. Los autores agradecen a la Junta de Andalucía (Consejería de Economía, Innovación y Ciencia) y al Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) (Project Ref. P12-FQM-1838) el apoyo financiero.

¹ J. Gaca, G. Wejnerowska, *Talanta* **2016**, 70, 1044-1050.

² L. Lucentini, E. Ferretti, E. Veschetti, V. Sibio, G. Citti, M. Ottaviani. *Microchemical Journal* **2005**, 80, 89-98.

³ Directiva Europea 98/83/CE

CATALYTIC ISOMERIZATION OF 2-CYCLOHEXEN-1-OL INTO CYCLOHEXANONE MEDIATED BY $[\text{RuCp}(\text{PTA})_2(\text{H}_2\text{O})]^+$

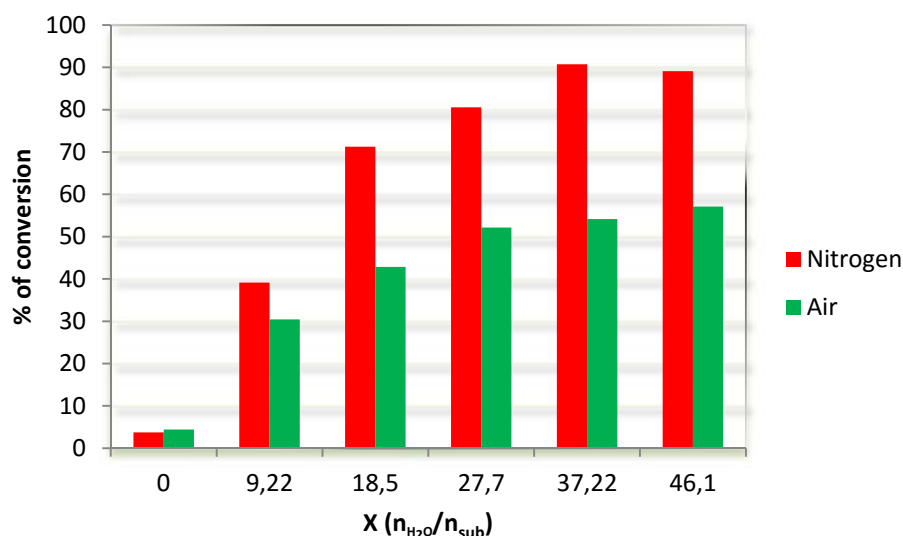
B. López, A. Romerosa and F. Scalambra

*Department of Inorganic Chemistry-CIESOL, Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)
sha_belen_93@hotmail.com*

The possibility to obtain fine chemicals through eco-friendly processes makes the catalysis in green media a very attractive topic for the scientific community.¹ Following the early evidences provided by McGrath and Grubbs, in recent years much effort has been devoted to develop an efficient general process to isomerize allylic alcohols in water.² Same years ago, we synthesized the water soluble ruthenium complex $[\text{RuClCp}(\text{PTA})_2]$ which has been found to be an excellent and versatile catalyst for many catalytic synthetic processes such as the isomerization of the allylic alcohols from 1-penten- to 1-octen-3-ol in water.³

In this communication we present the isomerization in water of 2-cyclohexen-1-ol into cyclohexanone catalyzed by the water-soluble complex $[\text{RuCp}(\text{PTA})_2(\text{H}_2\text{O})]^+$ as a triflate salt. The isomerization conversion was found to be dependent on water rate in the reaction (Figure 1), but reaction in water was not significantly influenced by the media pH.

Figure 1. Conversion (%) of 2-cyclohexen-1-ol into cyclohexanone versus molar rate of water/substrate under air (green) and N_2 (red). Reaction time 2h .



¹ K. Sanderson, P. Anastas, *Nature* **2011**, *469*, 18-20

² (a) McGrath, D. V.; Grubbs, R. H. *Organometallics* **1994**, *13*, 224. (b) Z. Wu, S. T. Nguyen, R. H. Grubbs, J. W. Ziller, *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, *117*, 5503–5511. (c) P. Schwab, M. B. France, J. W. Ziller, R. H. Grubbs, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1995**, *34*, 2039–2041. (d) P. Schwab, R. H. Grubbs, J. W. Ziller. *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, *118*, 100–110. (e) T.-L. Choi, R. H. Grubbs. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 1743–1746.

³ Serrano-Ruiz, M.; Lorenzo-Luis, P.; Romerosa, A.; Mena-Cruz, A. *Dalton Trans.* **2013**, *42*, 7622.

DEVELOPMENT AND VALIDATION OF AN AUTOMATED METHOD FOR THE IDENTIFICATION OF PESTICIDES IN URINE SAMPLES BY UHPLC-ORBITRAP-MS/MS

M. López-García, R. Romero-González and A. Garrido-Frenich

*Research Group “Analytical Chemistry of Contaminants”, Department of Chemistry and Physics, Research Centre for Agricultural and Food Biotechnology (BITAL), University of Almeria, Agrifood Campus of International Excellence, ceiA3, E-04120 Almería
mlg169@inlumine.ual.es*

Neonicotinoids are the first new class of insecticides introduced in the last 50 years. These compounds are a class of neuro-active insecticides that possess nicotinic acetylcholine receptor (nAChR) agonist activity¹. Neonicotinoid pesticides have been shown to pose a significant environmental risk as neurotoxicants, like nicotine. They are used worldwide as agricultural crop protection (i.e. vegetables, rice, and fruit trees, because they are effective to control a wide range of pests), environmental pest management and domestic insect control². There are several reports studied human exposure to neonicotinoid pesticides, analysing blood or urine samples, although qualitative or quantitative analysis of neonicotinoid in human patient's specimens has rarely been performed².

Liquid chromatography (LC) coupled with low resolution mass spectrometry is commonly used for the determination of these compounds. Although this analyzer presents a high sensitivity and selectivity, it requires an extensive method set-up and presents limitations with the number of compounds with different physico-chemical properties that can be analyzed in one run. The use of high resolution Exactive-Orbitrap mass analyzer offers multiple advantages, allowing selective detection of residues at low concentration levels in complex samples, such as urine. Due to its high sensitivity and its ability to analyze an unlimited number of compounds by means of accurate mass measurements combined with high resolving power, this technique has increasingly become more common³. This high resolution mass spectrometry analyzer operates in the full scan mode and provides accurate mass measurements (<5 ppm). In order to increase sample throughput, allowing the reduction of the overall analysis time, the use of semiautomated techniques for sample preparation, such as turbulent flow chromatography (TFC) or solid phase extraction (SPE) can be considered. These two on-line systems consist on a column with large and porous stationary particles combined with a high flow rate of mobile phase that provide online samples extraction and cleanup⁴.

In this work, a semiautomated method coupled to a liquid chromatograph with an Exactive-Orbitrap analyzer was developed and validated for the determination of neonicotinoids such as acetamiprid, imidacloprid, clothianidin, dinotefuran, nitenpyram, thiacloprid and thiamethoxam in urine samples. Two different fast on-line systems were evaluated for the extraction of the samples: turbulent flow (TurboFlow) and SPE, comparing several parameters as sensitivity, sample throughput and repeatability.

¹ P. Jovanov, V. Guzsány, M. Franko, S. Lazić, M. Sakač, I. Milovanović, N. Nedeljković, *Food Res. In.* **2014**, 55, 11-19.

² K. Taira, K. Fujioka, Y. Aoyama, *Plos one.* **2013**, 8, 11.

³ M. Roca, N. Leon, A. Pastor, V. Yusà, *J. Chromatogr. A.* **2014**, 1374, 66-76.

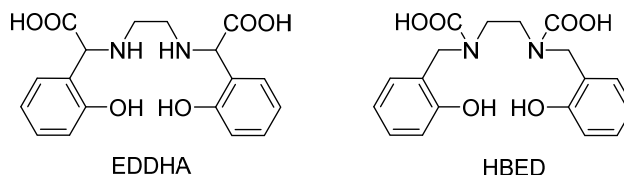
⁴ M. M. Aguilera-Luiz, R. Romero-González, P. Plaza-Bolaños, J. L. Martínez Vidal, A. Garrido Frenich, *J. Agric. Food Chem.* **2013**, 61, 829-839.

SYNTHESIS OF NEW AROMATIC POLYDENTATE LIGANDS FOR THE PREPARATION OF IRON (III) CHELATES

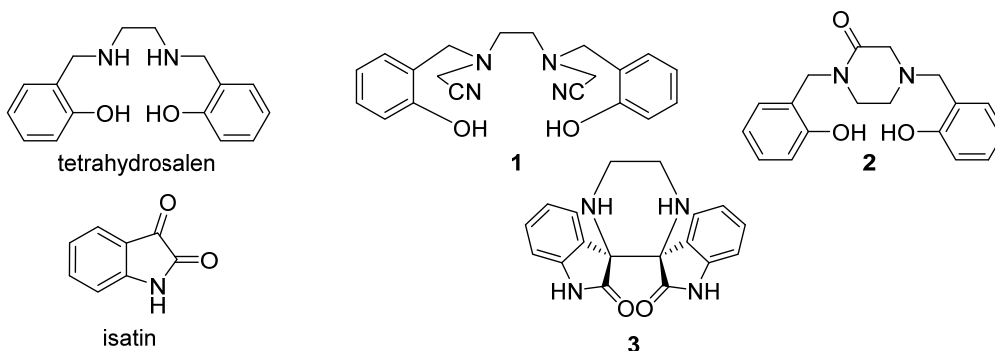
J.L. López-Martínez, M. Álvarez-Corral, M. Muñoz-Dorado, I. Rodríguez-García

*Department of Chemistry and Physics, ceiA3, University of Almería, E04120 Almería (Spain)
pepaloma91@hotmail.com*

Aromatic polydentate ligands as polyaminocarboxylic acids and isatin Schiff base derivatives are of great interest, as they show a high ability to form complexes with di- and trivalent metal ions. As soil additives, these products find a relevant application in chelating iron (III). In this way, Fe(III) based complexes of ethylenediamine-*N,N'*-bis(2-hydroxyphenyl) acetic acid (EDDHA) and their derivatives, are very effective in the treatment of iron chlorosis in plants.¹ Other polyaminocarboxylic acids are being used in chelation therapy, like *N,N'*-bis(2-hydroxybenzyl)ethylenediamine-*N,N'*-diacetic acid (HBED) acid, which has been studied for the treatment of Cooley anemia.² On the other hand, transition metal complexes of tetradentate Schiff bases can be used as catalysts in many reactions and possess a wide range of biological applications, such as antibacterial, antitumor, antiviral, anti-inflammatory, etc.³



Here we describe the synthesis and characterization of two new aromatic polydentate ligands (**1** and **2**) derived from tetrahydrosalen, as well as initial studies on their Fe(III) coordination ability. We have also developed a new method for the preparation of nitrogen ligands by condensation of isatin with ethylenediamine. In this way, we have prepared the aminospiranic polycycle **3**, whose comprehensive structural characterization was achieved by two dimensional NMR spectroscopy and single crystal X-ray diffraction.



Acknowledgements. We thank the "Ministerio de Economía y Competitividad" (Project CTQ2015-70724-R) for financial support.

¹ Gómez-Gallego, M.; Pellico, D.; Ramírez-López, P.; Mancheño, M. J.; Romano, S.; de la Torre, M. C.; Sierra, M. A. *Chem. Eur. J.* **2005**, *11*, 5997-6005.

² Martell, A. E.; Motekaitis, R. J.; Clarke, E. T. *Canadian Journal of Chemistry* **1986**, *64*, 449-456.

³ Sharma, V. K.; Srivastava, A.; Srivastava, S. J. *Serb. Chem. Soc.* **2006**, *71*, 917-928.

DEGRADATION STUDIES OF FLONICAMID AND DETERMINATION OF ITS METABOLITES IN ORANGE SAMPLES BY UHPLC-ORBITRAP-MS

R. López-Ruiz, R. Romero-González, J.L. Martínez Vidal, J. Marín-Sáez, A. Garrido Frenich

University of Almería, Department of Chemistry and Physics, Research Centre for Agricultural and Food Biotechnology (BITAL), University of Almería, Agrifood Campus of International Excellence, ceiA3, Carretera de Sacramento s/n, E-04120 Almería (Spain); rlr468@inlumine.ual.es

In the intensive farming of fruit and vegetable, a variety of pesticides are applied to prevent or eliminate harmful pests from plants. These pesticides can remain in edible parts as residues entering into the food chain. In most of the cases, pesticides can be transformed into metabolites, which are intermediate products of metabolism formed either in plants or animals. According to the Regulation (EC) No 1107/2009¹ degradation products formed in the environment should also be considered for evaluation and authorization of the parent compound, bearing in mind that metabolites can be more toxic than the parent compound itself. They are generated by metabolic and simple reactions, which in many cases are common among several families of pesticides. Therefore, pesticides and/or metabolite residues should be monitored to improve food safety. Thus, the maximum residue level (MRL) of many pesticides in fruits and vegetables is the total sum of the parent compound and its metabolites. This is the case of flonicamid (N-(cyanomethyl)-4-(trifluoromethyl)nicotinic acid), whose MRL is the total sum of flonicamid and its metabolites 4-(trifluoromethyl)nicotinol glycine (TFNG) and 4-trifluoromethylnicotinic acid (TFNA). Flonicamid is a systemic insecticide that kills aphid pest (aphids) and Aleyrodidae (whiteflies). Flonicamid's degradation into its metabolites usually occurs at standard conditions,² and the main metabolites in fruits and vegetables are TFNG, TFNA and 4-trifluoromethylnicotinamide (TFNA-AM). Flonicamid has been monitored because there are scarce studies related to its behaviour in plants and how this compound is degraded into its metabolites. This study has been carried out by Orbitrap because of the excellent resolution power that this mass analyzer can provide to detect individual molecular species as well as it is a powerful tool for the identification of non-target compounds.

In this study, the metabolic profiling, intended as the analysis of a group of metabolites either related to a specific metabolic pathway or a class of compounds, of flonicamid in orange has been investigated after foliar application in orange's tree. This work has been carried out by analyzing oranges for a period of 50 days after foliar application using a simple and efficient extraction procedure and reliable quantification applying ultra high performance liquid chromatography coupled to high resolution mass spectrometry (UHPLC-Orbitrap-MS). The results show that flonicamid degrades very quickly over time into its metabolites. The metabolite detected at higher concentrations is TFNG, meanwhile TFNA y TFNA-AM are detected at low concentrations.

¹ REGULATION (EC) No 1107/2009 OF THE EUROPEAN PARLIAMENT AND OF THE COUNCIL of 21 October 2009 concerning the placing of plant protection products on the market and repealing Council Directives 79/117/EEC and 91/414/EEC. Official Journal of the European Union L 309/1

² EFSA, Conclusion on the peer review of the pesticide risk assessment of the active substance flonicamid, *EFSA Journal*, 2010, 8, 1445.

IMPROVING THE ANALYSIS OF EARLY ELUTING POLAR COMPOUNDS IN LC-MS

A. Lorenzo, M.C. Campos and A. Agüera

*CIESOL, Research Center on Solar Energy, University of Almería-CIEMAT,
Carretera de Sacramento S/N, E-04120, Almería (Spain)
alf052@ual.es*

Pharmaceuticals are an important and vast group of contaminants whose presence in environmental compartments has been demonstrated. Multiple multiresidue analytical methods have been reported¹. However, these compounds present a wide range of polarities and some difficulties arise in the analysis of more hydrophilic compounds. Under reversed-phase chromatography, which is frequently used in liquid chromatography (LC) separations, hydrophilic compounds are poorly retained, eluting frequently unresolved at the front part of the chromatograms.

The aim of the present work was the development of a LC method for the separation of hydrophilic compounds, the five analytes (cotinine, diatrizoic acid, nicotine, nicotinic acid and trigonelline) shown in Table 1 was investigated. These compounds can be considered as representative of diverse types of hydrophilic compounds presenting polar/ionizable functional groups. They cover a log Kow range from -4.68 (trigonelline) to 1.37 (diatrizoic acid). Different variables affecting analytes retention were evaluated. The studied parameters were: composition, gradient and flow rate of the mobile phase and characteristics of the analytical column (length, diameter, particle size and composition). Five different columns were tested including a Zorbax Eclipse XDB C18 column (4.6 x 50 mm, 1.8 µm), a Kinetex C18 (4.6 x 150 mm, 2.6 µm), a Kinetex C8 (4.6 x 150 mm, 2.6 µm), a Poroshell InfinityLab 120 EC-C18 (2.1 x 100 mm, 2.7 µm) and an HyperCarb (4.6 mm × 100 mm, 5 µm) as a representative for porous graphitic carbon materials.

Four decision criteria were assessed to evaluate: (i) retention time; (ii) peak shape; (iii) peaks resolution and (iv) peak intensity (S/N). Analyses were performed using an Agilent 1200 HPLC system coupled to a hybrid triple quadrupole/Linear Ion Trap mass spectrometer system (5500 QTRAP®, Sciex). Analyte standards in pure solvent and in wastewater samples were analysed to evaluate the effect of the matrix in the chromatographic response under the selected conditions.

Table 1. Chemical properties of the selected compounds

<i>Compound</i>	<i>Molecular formula</i>	<i>Log Kow</i>	<i>pKa</i>	<i>Water solubility</i>
Cotinine	C ₁₀ H ₁₂ N ₂ O	0.07	8.80	1.0 x 10 ⁶ mg/L
Diatrizoic acid	C ₁₁ H ₉ I ₃ N ₂ O ₄	1.37	1.13/7.95	5.0 x 10 ⁵ mg/L
Nicotine	C ₁₀ H ₁₄ N ₂	1.17	3.1	1.0 x 10 ⁶ mg/L
Nicotinic acid	C ₆ H ₅ NO ₂	0.36	4.75	1.8 x 10 ⁴ mg/L
Trigonelline	C ₇ H ₇ NO ₂	-4.68	2.78	1.0 x 10 ⁶ mg/L

Acknowledgements. This research was supported by the Ministerio de Economía y Competitividad (Spanish Government) CTQ2013-46398-R; and the European Regional Development Fund (ERDF).

¹ M. Gros, M. Petrovic and D. Barceló, *Talanta* **2006**, 70, 678-690.

ENANTIOMERIC DETERMINATION OF ATROPINE IN SOLANACEAE SEEDS AND RACEMIZATION PROCESS STUDY BY HIGH PERFORMANCE LIQUID CHROMATOGRAPHY-TANDEM MASS SPECTROMETRY

J. Marín-Sáez, R. Romero-González, R. López-Ruiz, A. Garrido-Frenich

*University of Almería, Department of Chemistry and Physics, Research Centre for Agricultural and Food Biotechnology (BITAL), Agrifood Campus of International Excellence ceiA3, Carretera de Sacramento s/n, E-04120 Almería, Spain.
jms485@inlumine.ual.es*

Nowadays, plants of the *Solanaceae* family, gender *Daturae*, which grow like weeds in cultivated fields and because of its toxicity and its impact on food and feed safety and animal food for humans, is gaining interest. The main toxic components of this plant are scopolamine (burundanga) and atropine, which is a racemic mixture of (+) and (-)-hyoscyamine. Only (-)-hyoscyamine, the enantiomer found naturally, is pharmacologically active, being a potent anticholinergic^{1,2} and the racemization could occur in the extraction process of (-)-hyoscyamine, if temperatures and pH conditions are applied. However studies focused on this issue are scarce.³ Moreover, knowing the conditions under the racemization may occur is really interesting since they are also applicable in cooking processes (cooking or baking) of food containing small amounts of seed plants belonging to the *Solanaceae* family.

The purpose of this work is developing a method for the enantio-quantification of atropine and studying the influence of pH and temperature in the process. For that, several studies have been performed at different pHs (3, 5, 7 and 9) and temperatures (30, 50 and 80 °C). Furthermore, the racemization time was also evaluated at pH 5 and 9 at 80 °C, observing that racemization is faster at higher pHs. To study these factors, an analytical method based on liquid chromatography coupled to high performance liquid chromatography coupled to tandem mass spectrometry (HPLC-MS/MS) was used. In order to perform a suitable separation, a chiral column, Chiralpak-AY3, was utilized. The separation has been performed in isocratic mode using ethanol containing diethanolamine (0.1%) as mobile phase. Hyoscyamine extraction from *Stramonium* and *Brugmansia* seeds was performed by a modified QuEChERS method.

The authors gratefully acknowledge Ministry of Economy and Competitiveness (MINECO) and European Regional Development Fund (ERDF) for financial support (Project Ref. CTQ2015-69899-R).

¹ R. Kumar, J. Martens, R. Bhushan, *J. Liq. Chromatogr. Relat. Technol.* **38** (2015) 111-116.

² EFSA. *The EFSA Journal*, **11** (2013) 3386-3499.

³ G. Blaschke, E. Lamparter, J. Schluter, *Chirality*, **5** (1993) 78-83.

IDENTIFICATION OF CONTAMINANTS OF EMERGING CONCERN IN PLANT MATERIAL USING TARGET AND SUSPECT SCREENING BY LC-HRMS

A.B. Martínez-Piernas, A.J. Galera-Carrillo, P. Fernández-Ibáñez, S. Malato, A. Agüera

*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Experimental Sciences,
Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)
amp329@ual.es*

Reuse of wastewater is today an accepted strategy that can contribute significantly to an efficient and sustainable water use. However, the inefficient removal of organic micro-contaminants in sewage treatment plants can represent a limitation, especially if regenerated water is used for irrigation in agriculture. Other agricultural practices, like soil application of manure and sewage sludge, can also contribute to exposure of crops to these emerging environmental substances. In fact, there is still a lack of knowledge about the long-term effect of their accumulation in soils, transport processes and bioavailability to plants, and about the changes that can occur after uptake. New analytical strategies are required for evaluating presence and fate of contaminants of emerging concern (CECs) in plant matrices.

This work presents a qualitative screening workflow based on data-independent acquisition on LC-QTOF-MS for the detection and identification of CECs in vegetable matrices. A generic extraction procedure based in QUECHERS method is applied to plant material (leaves and fruits). The workflow combines target and suspect analysis searching a list of potential candidates possibly present in the samples based on the Norman Suspect list exchange, a commercial library search and the Norman MassBank database. Application on real samples of tomato and tomato leaves; cultivated in greenhouses irrigated with regenerated water showed the potential of the suspect screening approach.

Acknowledgements. The authors wish to thank the EU for the support by Cost Action “ES1403: New and emerging challenges and opportunities in wastewater reuse (NEREUS)”.

ESTUDIO DE LA ESTABILIDAD DE LA C-FICOCIANINA

**L. Moreno-García, M. Salinas-García, A. Cámara-Artigas, M.J. Ibáñez,
T. Mazzuca-Sobczuk, M. Andújar-Sánchez y E. Ortiz-Salmerón**

*Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales, ceiA3, BITAL,
Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
lmg593@inlumine.ual.es*

Actualmente el uso de colorantes sintéticos está ampliamente difundido en la industria alimentaria. Sin embargo, debido a su alto efecto tóxico, alergénico e incluso carcinógeno están siendo reemplazados por colorantes de origen natural¹. Una de las fuentes más importantes de estos colorantes naturales son las algas, con un gran interés debido a su aplicación como fuente natural de pigmentos, lípidos, ácidos grasos, proteínas, polisacáridos y compuestos fenólicos. De ellas se pueden obtener pigmentos naturales, como los que se encuentran en las ficobiliproteínas².

La C-Ficocianina es un tipo de ficobiliproteína que se encuentra como una mezcla compleja de monómeros, trímeros, hexámeros y otros oligómeros. Su masa molecular varía de 44 a 260 kDa. Debido a su cromóforo, denominado ficocianobilina (PCB) presenta un máximo de absorción aproximadamente a 618 nm, responsable de su color azul. La masa molecular, la posición y la intensidad del máximo de absorción de la ficocianina depende del estado de agregación influenciado por parámetros tales como el pH, temperatura, concentración de la proteína y origen del alga de la que proceden².

Se ha realizado la caracterización Químico Física de la C-Ficocianina, mediante técnicas cromatográficas y electroforéticas con el fin de determinar su masa molecular y el estado de agregación de la misma en condiciones nativas. Además, se ha estudiado la estabilidad en función del pH, temperatura, tiempo de incubación y presencia/ausencia tanto de luz como de azida mediante medidas espectroscópicas UV-visible y fluorescencia. Los resultados obtenidos tras la realización de todos los experimentos muestran que la C-Ficocianina se encuentra como un trímero en estado nativo y que los parámetros que más influyen en su estabilidad son el tiempo de incubación, la temperatura y el pH. La presencia/ausencia de luz y/o azida no afecta a la estabilidad de la misma en las condiciones estudiadas en este trabajo. El pH óptimo de esta proteína se ha determinado que es 7 y a temperaturas bajas (-20 °C y 4 °C) la proteína se mantiene estable, al menos, durante dos meses, sin pérdida significativa de sus propiedades espectroscópicas, manteniendo su color azul inicial.

Agradecimientos. Este trabajo se ha realizado dentro del grupo de investigación BIO-328 de la Universidad de Almería.

¹Ruiz-Ruiz, F., Benavides, J., & Rito-Palomares, M. (2013). Scaling-up of a B-phycoerythrin production and purification bioprocess involving aqueous two-phase systems: Practical experiences. *Process Biochemistry*, 48(4), 738–745.

²González-Ramírez, E., Andújar-Sánchez, M., Ortiz-Salmerón, E., Bacarizo, J., Cuadri, C., Mazzuca-Sobczuk, T., Martínez-Rodríguez, S. (2014). Thermal and pH Stability of the B-Phycoerythrin from the Red Algae *Porphyridium cruentum*. *Food Biophysics*, 9(2), 184–192.

A NEW APPROACH TO THE TOTAL SYNTHESIS OF SESQUINEOLIGNANS

**M.M. Murcia-Morales, I. Rodríguez-García, M. Álvarez-Corral,
M. Muñoz-Dorado**

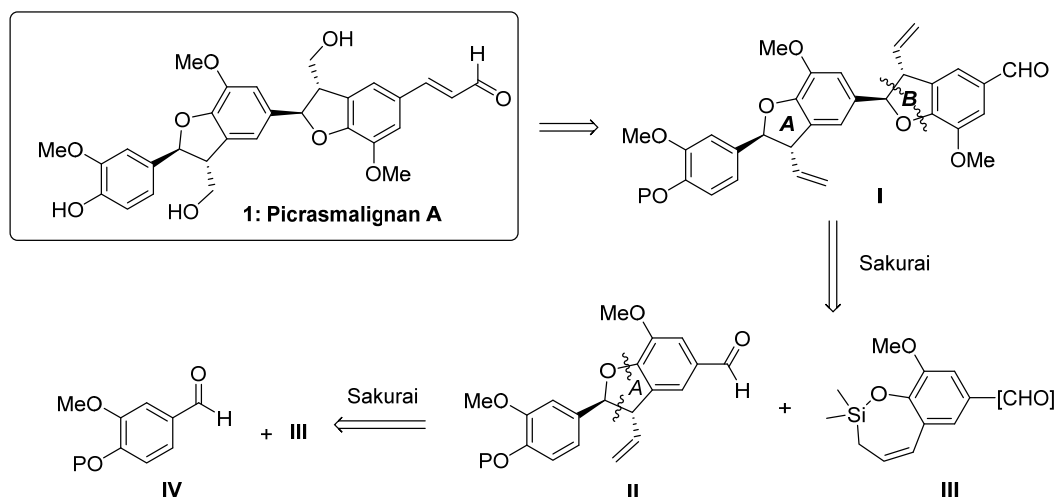
*Departamento de Química y Física, ceiA3, Faculty of Experimental Sciences
Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)
irodrigu@ual.es*

Lignans are a broad group of secondary metabolites with a common basic structure of two or more subunits of phenylpropane (C₆-C₃). They are widely distributed in plants and perform a broad range of physiological functions. In addition, many of them also exhibit significant pharmacological activity as antioxidants or cytotoxic agents, anti-inflammatories, and in the treatment of infections produced by viruses (including HIV), fungus or protozoa. Among the different types of lignans, those having a dihydrobenzofuran skeleton usually exhibit a remarkable biological activity.

To date, over one hundred sesquilignans (those containing three C₆-C₃ subunits) have been isolated from extracts of different varieties of plants. Among them, about twenty possess a dihydrobenzofuran core.¹ Although there are still no comprehensive studies on possible biological applications, current tests demonstrate their potential use as lead compounds in the design of new bioactive species.

An outstanding example of dihydrobenzofuran sesquilignan is picrasmalignan A, which was isolated for the first time in 2011 from the stems of *Picrasma quassioides* Bennet.² This compound, which shows strong antiinflammatory activity, includes three C₆H₃ subunits linked by C-C bonds (Figure 1). Here we describe a route for the total and stereoselective synthesis of this species using only vanillin as starting material. The synthetic strategy is based on a silver catalyzed modification of a Sakurai type reaction which leads to 2,3-dihydrobenzo[*b*]furans by the coupling aldehydes with 2,3-dihydrobenzo[*f*]oxasilepins.³

Figure 1. Retrosynthetic analysis of picrasmalignan A. [CHO] = protected aldehyde



Acknowledgements. We thank the "Ministerio de Economía y Competitividad" (Project CTQ2015-70724-R) for financial support.

¹ A. Ichihara, K. Oda, Y. Numata, S. Sakamura, *Tetrahedron Lett.* **1976**, *17*, 3961-3964.

² W.-H. Jiao, H. Gao, F. Zhao, F. He, G. X. Zhou, X.-S. Yao, Bennet, *Chem. Biodiversity* **2011**, *8*, 1163-1169.

³ L. Jiménez-González, S. García-Muñoz, M. Álvarez-Corral, M. Muñoz-Dorado, I. Rodríguez-García, *Chem. Eur. J.* **2006**, *12*, 8762-8769.

SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURE AND MAGNETIC PROPERTIES OF TWO NEW TEMPO DERIVED COMPLEXES

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

*Department of Physics and Chemistry, Faculty of Experimental Sciences,
University of Almería, 04120 Almería (Spain)
yolanda_n_@hotmail.com*

In recent years, remarkable attention has been paid to the development of methodologies for designing molecular structures with rational control of the spin carriers.¹ The assembly of pre-formed paramagnetic building blocks with $[M(\beta\text{-diketonate})_2]$ complexes is one of the most successful strategies to build complex magnetic systems. The organic radical TEMPO (2,2,6,6-tetramethyl-1-oxyl) is widely used as building block for this purpose. Herein, we describe the synthesis, X-ray structure and magnetic behaviour of two new coordination compounds combining two simple spin carriers: 4-amino-TEMPO and Cu^{II} and Co^{II} hexafluoroacetylacetonates. Complexes **1** and **2** show similar crystal structures, in which the metal is coordinated to the four hfac⁻ oxygen atoms and two TEMPO units through the amino group with an octahedral geometry (Figure 1). The two N-O[•] moieties remain as free radicals. This coordination mode is in contrast with the structures reported for analogue complexes of nickel (II)² (metal bonded to only one 4-amino-TEMPO unit) and copper (II)³ (both the amino and nitroxide moieties of 4-amino-TEMPO are coordinated to a copper cation).

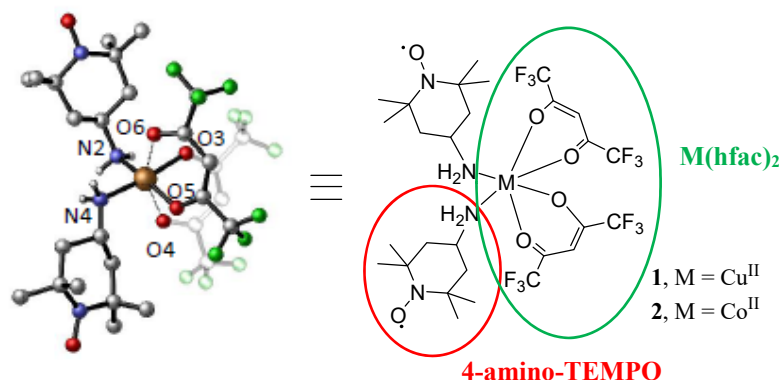


Figure 1. X-ray structure of copper complex **1** and drawing of the general structure of the Cu^{II} and Co^{II} complexes.

For complex **1**, the thermal dependence of the $\chi_M T$ product shows ferromagnetic and antiferromagnetic interactions which can be attributed to $\text{Cu}(\text{II})$ -radical and intramolecular radical-radical interactions, respectively. Electron Paramagnetic Resonance (EPR) studies were carried out for this compound. The results are consistent with the expected spectrum for a $\text{Cu}(\text{II})$ atom with axial symmetry ($g_z = 2.09$ and $g_{xy} = 2.03$) superimposed to the spectrum of a TEMPO radical ($g_R = 2.00$). The magnetic properties of the cobalt (II) complex **2** are currently under investigation.

Acknowledgements. We thank MINECO for financial support (CTQ2014-5715P project). YNG thanks MECED for a FPU predoctoral fellowship.

¹ Sessoli, R.; Powell, A. K. *Coord. Chem. Rev.* **2009**, *253*, 2328 (b) Train, C.; Grusellec, M.; Verdagner, M. *Chem. Soc. Rev.*, **2011**, *40*, 3297.

² Cervantes-Lee, F.; Porter, L. C. *Acta Crystallogr.* **1991**, *47*, 2312.

³ Kinoshita, H.; Akutsu, H.; Yamada, J.; Nakatsuji, S. *Mendeleev Commun.* **2006**, *16*, 305.

UNIÓN DE EOSINA A LISOZIMA: UNA REVISIÓN CRÍTICA

M. Plaza-Garrido, M. Salinas-García, B. Solimán-Tamayo y A. Cámara-Artigas

*Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales, CEIA3, CIAMBITAL, Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
marina.plaza.garrido@gmail.com*

La eosina es un colorante xanténico artificial de naturaleza química ácida que se une a las proteínas y por ello es usado frecuentemente para su tinción. El mecanismo a través del cual interacciona con las proteínas es debido generalmente a las interacciones electrostáticas con residuos cargados positivamente, pero en algunos casos se ha descrito su unión en un bolsillo de específico de la proteína. Este es el caso de la lisozima. En este trabajo se ha revisado el proceso de unión de la eosina Y a la lisozima tanto a pH ácido como básico para caracterizar un sitio de unión descrito en varios trabajos de forma cualitativa. Para ello se ha medido primero la constante de unión mediante la fluorescencia a dos pHs y a diferentes fuerzas iónicas. La unión del colorante a la lisozima produce la amortiguación de la fluorescencia intrínseca de la proteína, debida fundamentalmente a dos restos triptófano, W108 y W62, de los 6 restos triptófano con los que cuenta la proteína. Esto ha llevado a varios autores a identificar el sitio de unión de la eosina en un bolsillo localizado ente los aminoácidos W28, W108, W111, Y20, Y23 y M105¹. Sin embargo, una inspección detenida de la estructura de la lisozima revela que tal sitio de unión es imposible al no disponer del volumen necesario para albergar un ligando de ese tamaño. Por ello se ha llevado a cabo la cristalización de la lisozima en presencia de eosina tanto a pH ácido como básico para determinar su estructura mediante difracción de rayos X. Desafortunadamente las condiciones de alta fuerza iónica a las cuales se obtienen los cristales de lisozima interfieren con la co-cristalización del ligando. No obstante, los cristales obtenidos en presencia de eosina muestran una intensa coloración, tal y como se muestra en la figura 1, lo que indica la presencia del colorante en el cristal de proteína. Esto se debe a la propiedad general del colorante indicada anteriormente, de forma que interacciona con los residuos cargados positivamente en la superficie de la proteína dentro del cristal. Hemos aprovechado tal propiedad para utilizarla en la identificación de cristales de proteína, los cuales se tiñen, a diferencia de los cristales de sal. La tinción de los cristales no afecta a su morfología ni tampoco a su calidad.

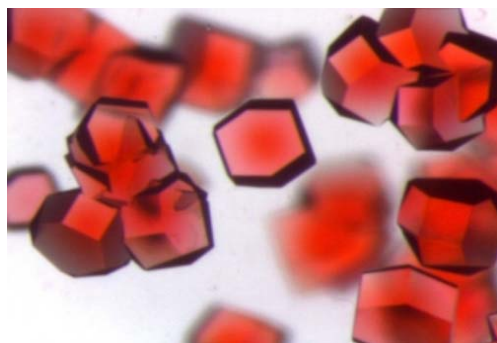


Figura 1.- Cristales de lisozima obtenidos a pH 4.6 en presencia de cloruro sódico 0.6 M y PEG4K al 20%. El colorante eosina-Y fue añadido en el pocillo donde habían crecido los cristales y como puede verse en la fotografía es adsorbido por los cristales de proteína clarificando la disolución en la cual se encuentran los mismos. Los cristales de sal no pueden adsorber el colorante y por tanto no se produce su tinción y la disolución muestra una coloración homogénea, sin decoloración.

Acknowledgements. Data collection was supported by a BAG grant from ALBA (Barcelona, Spain) [BAG number 2015071316].

¹Xanthipe J. Jordanides, Matthew J. Lang, Xueyu Song, Graham R. Fleming. Solvation Dynamics in Protein Environments Studied by Photon Echo Spectroscopy. *J. Phys.Chem. B.* **1999**, *103*, 7995-8005

NEW HYDROSILYLATION IRON CATALYSTS. THE PERK OF LIGAND DESIGN

Á. Raya-Barón,¹ P. Oña-Burgos,^{1,2} M.A. Ortuño,³ C.J. Cramer,³ I. Kuzu,⁴ I. Fernández^{1,5}

¹ Department of Chemistry and Physics, Universidad de Almería, Spain

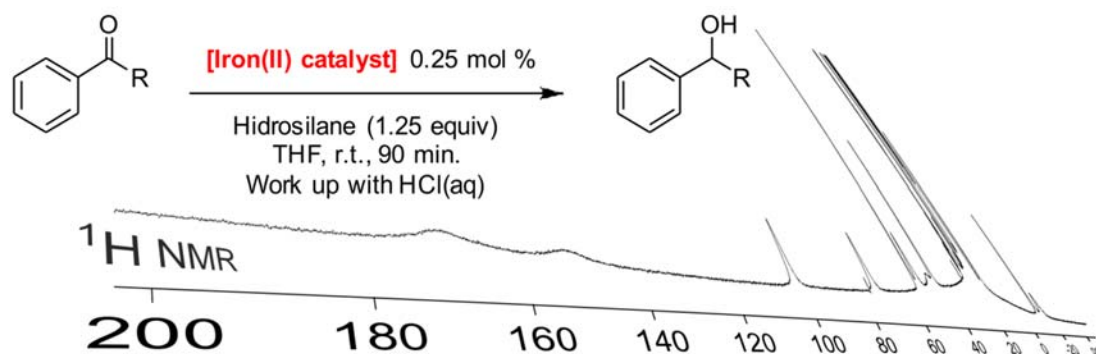
² Institute of Chemical Technology, UPV-CSIC, Valencia (Spain)

³ Department of Chemistry, University of Minnesota, Minneapolis, United States

⁴ Fachbereich Chemie, Philipps-Universität Marburg, Germany

⁵ BITAL-Centro de Investigación en Biotecnología Agroalimentaria, Almería, Spain
arb082@inlumine.ual.es

In this work, we present a new iron(II)-based catalytic system for the rapid hydrosilylation of ketones. Our catalytic experiments are conducted at room temperature with 0.25 mol % of catalyst, with conversions above 90% in less than 2 hours (Scheme 1). These outstanding results have been possible using anthraquinonic Fe(II) complexes where the ratio metal:ligand is key in order to obtain an efficient catalytic system. All the ligands and complexes have been thoroughly studied by advanced NMR methods, X-ray crystallography and cyclic voltammetry towards the full elucidation of their tridimensional structure and redox properties, paying special attention to the non-innocent behavior of the ligands involved. In addition, theoretical calculations at DFT level (M06-L functional) were performed to give mechanistic insight related with the performance of the catalyst.



Scheme 1. General reaction for the reduction of ketones into alcohols through catalytic hydrosilylation followed by acid hydrolysis.

Acknowledgements: We thank Junta de Andalucía (excellence project P12-FQM-2668) for financial support. A. Raya Barón thanks University of Almería for his predoctoral fellowship from Plan Propio de Investigación. P. Oña Burgos thanks MEC for his Ramón y Cajal contract.

ANÁLISIS DE CONTAMINANTES POLARES EN PRODUCTOS NUTRACEÚTICOS DE SOJA MEDIANTE LC-QqQ-MS/MS

A. Romera-Torres, R. Domingo-Alves, R. Romero-González, R. López-Ruiz, M. López García, A. Garrido Frenich

*Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
anaromeratorres@hotmail.es*

Actualmente, la tendencia respecto a los métodos de análisis de residuos de plaguicidas y contaminantes ha sido el desarrollo de métodos multi-residuo. No obstante, existen grupos de compuestos con una alta polaridad que no pueden ser analizados utilizando estos métodos. Ello se debe a que el método genérico de extracción no es eficiente o porque la separación cromatografía no es la deseada.¹ Por todo ello resulta imprescindible el desarrollo de métodos específicos para sustancias tales como fosetil-aluminio, etefón, hidrazida maleica, perclorato y clorato, que se caracterizan por su alta polaridad y rango de matrices en que pueden encontrarse.²

En este sentido, en los últimos años se ha desarrollado un mercado emergente relacionado con los productos nutracéuticos, que suelen presentar distintos beneficios médicos, no existiendo métodos analíticos para la determinación de contaminantes polares en estas sustancias, mientras que sí los hay en matrices vegetales.³

En este trabajo se ha desarrollado un método para la determinación de fosetil-aluminio, etefón, hidrazida maleica, perclorato y clorato en productos nutracéuticos derivados de soja mediante cromatografía de líquidos acoplada a espectrometría de masas con analizador de triple cuadrupolo (LC-QqQ-MS/MS). Para la extracción de los compuestos objeto de estudio, la muestra fue tratada con acetonitrilo acidificado con ácido fórmico. La columna cromatográfica que proporcionó mejores resultados fue la denominada Hypercarb, de 100 mm de longitud, 2.1 mm de diámetro interno y 5 µm de tamaño de partícula. La fase móvil utilizada fue una disolución acuosa de ácido acético y acetonitrilo (94:1:5; v/v/v) y acetonitrilo acidificado con ácido acético (1% v/v) como fase orgánica, obteniendo un tiempo total de análisis inferior a 10 minutos.

La validación del método se realizó calculando diversos parámetros característicos del método como veracidad, precisión, límites inferiores y efecto matriz. Se obtuvo una precisión inter-día por debajo del 17% para todos los casos y unos límites de cuantificación que fueron entre 8 y 100 µg/kg.

Por último, se aplicó el método desarrollado al análisis de 14 productos nutracéuticos obtenidos de comercios locales, detectándose clorato en 5 muestras a concentraciones comprendidas entre 63 y 1641 µg/kg.

¹ H. G. J. Mol, R. C. J. Van Dam, *Anal. Bioanal. Chem.* 2014, 406, 6817-6825.

² J. A. Padilla-Sánchez, P. Plaza-Bolaños, R. Romero-González, A. Grande-Martínez, E. M. Thurman, A. Garrido-Frenich, *J. Mass Spectrom.* 2012, 47, 1458-1465.

³ M. Anastassiades, D. I. Kolberg, D. Mack, C. Wildgrube, I. Sigalov, D. Dörk. Method for the analysis of residues of numerous highly polar pesticides in foods of plant origin involving simultaneous extraction with methanol and LC-MS/MS determination (QuPpe-Method). EU Reference Laboratories for Residues of Pesticides. Single Residue Methods. 2013.

POLYACRYLIC ACID POLYMER BRUSHES AS SUBSTRATES FOR THE INCORPORATION OF ANTHRAQUINONE DERIVATIVES

A.B. Ruiz-Muelle,¹ R. Contreras-Cáceres,² P. Oña-Burgos,³ A. Rodríguez-Dieguez,⁴ I. Fernández¹

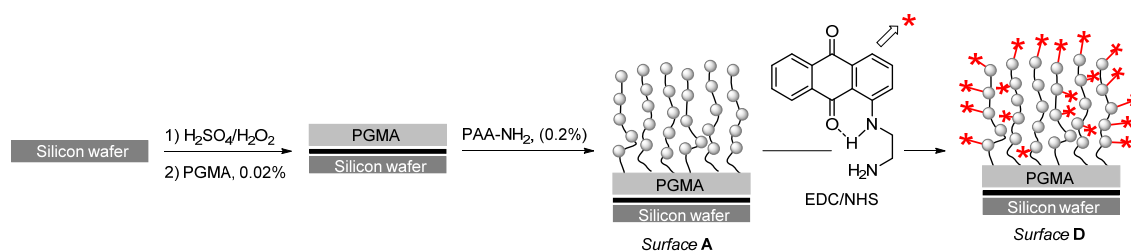
¹ Department of Chemistry and Physics, Research Centre for Agricultural and Food Biotechnology (BITAL), University of Almería.

² Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, University of Málaga

³ ITQ, Universitat Politècnica de València-CSIC

⁴ Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, University of Granada
arm350@inlumine.ual.es

In the present work, we report the synthesis and characterization of amino-terminated anthraquinone polymer brushes for the fabrication of nanometric devices to perform organocatalysis. The new surfaces were obtained following several steps, represented in Scheme 1: a) silicon wafers of *ca.* 1 cm² size were initially cleaned with ethanol in an ultrasonic bath and then immersed in a piranha solution; b) a thin layer of PGMA was deposited on the substrates through spin coating from a 0.01% w/w solution in chloroform and annealed during 10 min. at 100°C in a vacuum oven; c) at this surface, PAA-NH₂ (amino-terminated polyacrylic acid, M_n = 6000 g mol⁻¹) was spin coated from a 2% w/w solution in methanol and annealed during 3 h at 150°C in a vacuum oven; d) ungrafted polymer was removed by washing several times with ethanol. Ellipsometric measurements showed a polymer thickness of 47 ± 0.5 nm. As a final step, the incorporation of the anthraquinone derivative was performed by amidation reactions. Nuclear magnetic resonance (NMR) and X-ray diffraction (XRD) were used to characterize the anthraquinone. The polymer brushes were characterized by Ellipsometric, X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), Atomic Force Microscopy (AFM) and Scanning Electron Microscope (SEM) including microanalysis (EDS).¹



Scheme 1. Schematic representation for the functionalization of silicon wafers with PAA-NH₂ (surface A). Fabrication of surface D by amidation reaction using anthraquinone.

These fully characterized surfaces were employed in the catalytic alkylation of (*1H*)-indol as a bench heterogeneous catalysis. To the best of our knowledge, the use of an aminoanthraquinone grafted on polyacrylic (PAA) polymer brushes has never been reported in organocatalysis. These preliminary results are shown in this communication.

Acknowledgements. We thank Junta de Andalucía (excellence project P12-FQM-2668) for financial support. A. B. R-M. and P. O-B. thank Junta de Andalucía and MEC for a pre-doctoral fellowship and a Ramón y Cajal contract, respectively.

¹ Ruiz-Muelle, A. B.; R.; Contreras-Cáceres, C.; Oña-Burgos, P.; Rodríguez-Dieguez, A.; López-Romero, J. M.; Fernández, I. *Adv. Funct. Mat.* **2016**, submitted.

FORMACIÓN DE FIBRAS AMILOIDES EN PROTEÍNAS QUIMERA DEL DOMINIO C-SRC SH3: SRC-RT, UN ESTUDIO PRELIMINAR

**M. Salinas-García, M. Plaza-Garrido, L. Moreno-García, E. Ortiz-Salmerón,
M. Andújar-Sánchez y Ana Cámara-Artigas**

*Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales, ceiA3, CIAMBITAL,
Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
mary94_gador@hotmail.com*

Las fibras amiloides forman depósitos de proteína insolubles que se originan a partir de proteínas que adquieren un plegamiento preferente en lámina beta, independiente del plegamiento original de la misma. Su importancia radica en su relación con diversas enfermedades como Alzheimer, Parkinson o Huntington. Actualmente, los factores que favorecen su formación son desconocidos y su estudio está dificultado, en parte a la falta de información estructural a nivel atómico. Una estrategia para abordar tales estudios es partir de proteínas que sufren procesos de plegamientos alternativos como son oligómeros entrecruzados mediante intercambio de dominios, que en general pueden cristalizarse y resolver su estructura a nivel atómico mediante difracción de rayos X. En concreto, el dominio SH3 de la Src tirosina quinasa es un modelo ideal para abordar tales estudios, ya que nuestro grupo ha descubierto que es capaz de formar dímeros entrecruzados y amiloides¹. Los dominios SH3 han sido utilizados como modelos para estudiar el plegamiento de proteínas y nuestra propuesta es utilizarlos también para el estudio de los plegamientos “erróneos” en proteínas.

Los procesos de intercambio de dominios tienen lugar mediante la apertura de un lazo en la proteína. En el caso del dominio c-Src SH3 el lazo implicado es el llamado n-Src. En este trabajo se ha llevado a cabo la purificación y caracterización de una quimera del dominio c-Src-SH3 donde se han intercambiado residuos de uno de los lazos de la proteína, el llamado lazo RT, por el presente en otro dominio SH3 que no forma ni dímeros entrecruzados ni amiloides: el dominio SH3 de la Abl tirosina quinasa. A esta proteína quimera la hemos denominado SRC-RT. Previamente, una quimera construida con los lazos RT y n-Src de la Abl (SCR-2X) ha demostrado formar dímeros entrecruzados mediante la apertura de los dos lazos²². En el caso de la quimera SRC-RT, no forma dímeros entrecruzados como puede visualizarse en las estructuras disponibles en el PDB 5ECA (pH 6,5) y 5EC7 (pH 5). En este trabajo se ha llevado a cabo un estudio para determinar si esta quimera, aunque no forma dímeros entrecruzados, es capaz de formar fibras amiloides. Para ello, se ha llevado a cabo un estudio en función de la concentración de proteína, pH y fuerza iónica del medio usando el método de detección de fibras amiloides con el colorante tioflavina T (ThT). Los resultados obtenidos muestran que la quimera SRC-RT (concentración 20, 5 y 0,8 mg/mL) reacciona con la ThT tras incubarse dos meses a 4°C en presencia de cloruro sódico 0,1 M, fosfato 0,1 M (pH 7) lo que es indicativo de formación de fibras amiloides. Un estudio más pormenorizado de la caracterización de estas fibras se está llevando a cabo para corroborar su presencia por metodologías alternativas.

Agradecimientos. Esta investigación es parte del proyecto de investigación financiado por el Ministerio de Economía y Competitividad y FEDER (EU) BIO2016-78020-R.

¹ Bacarizo, J., Martínez-Rodríguez, S., Martín-García, J. M., Andujar-Sanchez, M., Ortiz-Salmeron, E., Neira, J. L., & Cámara-Artigas, A. (2014). “Electrostatic effects in the folding of the SH3 domain of the c-Src tyrosine kinase: pH-dependence in 3D-domain swapping and amyloid formation”. *PLoS One*, 9 (12), e113224.

² Cámara-Artigas, A., Martínez-Rodríguez, S., Ortiz-Salmerón, E., & Martín-García, J. M. (2014). “3D domain swapping in a chimeric c-Src SH3 domain takes place through two hinge loops”. *Journal of Structural Biology*, 186 (1), 195–203.

MODELADO DE LA ESTRUCTURA DE LA PROTEÍNA REP DE ToLCNDV Y BÚSQUEDA DE INHIBIDORES DE SU ACTIVIDAD

J.M. Suárez-Sierra¹, M. Andújar-Sánchez¹, R. Estrada-Tejedor² y E. Ortíz-Salmerón¹

¹*Departamento de Química y Física. CEIA3. Facultad de Ciencias Experimentales. Universidad de Almería, 04120 Almería (España)*

²*Grup d'Enginyeria Molecular, IQS School of Engineering, Universitat Ramon Llull, 08017 Barcelona (Spain); josemsuarezsierra@gmail.com*

El virus ToLCNDV es un geminivirus que afecta a plantas cucurbitáceas. Este virus tiene un gran impacto en las regiones de Murcia y fundamentalmente Almería, donde la agricultura es la principal fuente de sustento. Dicho virus afecta gravemente a las plantas de calabacín y melón, devastando plantaciones completamente. En 2014 se estimaron unas pérdidas a causa del virus en torno a los 30 Millones de euros solamente en plantaciones de calabacín, lo que supone un 17% de la producción total del mismo¹.

Actualmente no se dispone de un tratamiento específico para el virus. Por este motivo, el presente trabajo se centra en el uso de técnicas computacionales para diseñar nuevos compuestos que inhiban la acción del virus.

Se ha realizado un estudio sobre las posibles dianas terapéuticas, pudiéndose identificar la proteína Rep como la más interesante, dada que está relacionada con la replicación del ToLCNDV. La principal dificultad que presenta este estudio es la gran ausencia de datos acerca de la estructura de dicha proteína, por lo que mediante técnicas computacionales se han buscado estructuras homólogas. Cada uno de los dominios de la proteína se modelizó por homología, obteniendo una estructura final que se refinó mediante dinámica molecular².

Con el modelo computacional obtenido se realizó una búsqueda de inhibidores del sitio activo con actividad ATPasa, con el objetivo de inhibir su función y, consecuentemente, el mecanismo de replicación del virus. Datos experimentales han demostrado la existencia de un sitio activo alostérico que modula la conformación del sitio activo con actividad ATPasa³. Se aplicaron métodos de docking molecular para el estudio de dicho sitio activo y se buscaron moléculas que interaccionasen preferentemente en dicho sitio. Una vez identificados una serie de posibles inhibidores que modulasen la actividad ATPasa se realizaron estudios complementarios de docking y de dinámica molecular para evaluar los efectos de estos inhibidores sobre la estructura del sitio activo.

Se encontraron una serie de inhibidores que podrían ser candidatos a posibles agroquímicos frente al virus, uno de los cuales dio resultados muy prometedores en ensayos sobre muestras de planta de calabacín infectadas.

¹ <http://www.hortoinfo.es/index.php/noticia/4342-perdidas-calabacin-241114>

² *Molecular Operating Environment (MOE)*, 2014.09; Chemical Computing Group Inc., 1010 Sherbooke St. West, Suite #910, Montreal, QC, Canada, H3A, 2R7, 2016.

³ Seguin, S. P., Evans, C. W., Nebane-Akah, M., Mckellip, S., Ananthan, S., Tower, N. A. & Noah, J. W. (2012). "High-Throughput Screening Identifies a Bisphenol Inhibitor of SV40 Large T Antigen ATPase Activity." *Journal of Biomolecular Screening*, 17(2), 194–203.

USE OF THE SONOGASHIRA-HAGIHARA REACTION FOR THE SYNTHESIS OF LIQUID CRYSTALS AS THERMAL STORAGE SYSTEMS

I. Torres, M. Álvarez-Corral, M. Muñoz-Dorado, I. Rodríguez-García

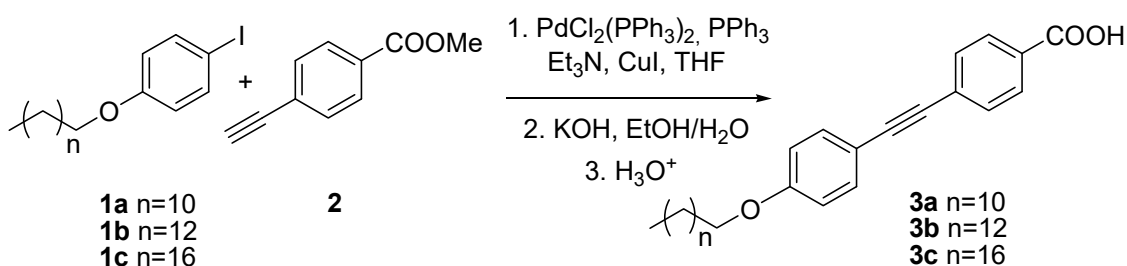
*Department of Chemistry and Physics, ceiA3, University of Almería, E04120 Almería (Spain)
irene.tg.94@gmail.com*

The most characteristic states of matter present in nature are solid, liquid and gas, although there can also be found intermediate phases called liquid crystals. The materials with these properties present a mesomorphic state, one or more phases located between the solid and liquid, characterized by ordered structures while, at the same time, the typical mobility of liquids. Changing from this fluidic phase to the liquid involves a phase transition heat that could be used to store energy in solar thermal power plants (STPPs).¹

The Differential Scanning Calorimetry (DSC) measures the difference in the energy required to heat a sample and a reference as a function of temperature. DSC allows measuring the energy changes of a liquid crystal in the transitions from solid to a liquid crystal and from a liquid crystal to an isotropic liquid.

One of the most successful reaction for the preparation of these compounds synthesis is the coupling of terminal acetylenes with vinyl or aryl halides catalyzed by palladium and copper iodide in presence of a base, known as Sonogashira-Hagihara reaction.

We chose a series of 4-((4-(alkyloxy)phenyl)ethynyl)benzoic acids (**3**) with different chain's lengths (n=10,12,14,16) as potential candidates for new liquid crystals. These target products were obtained by Sonogashira-Hagihara reaction between commercial methyl 4-ethynylbenzoate (**2**) and 1-iodo-4-(alkyloxy)benzenes (**1**), which in turn were prepared from 4-iodophenol and 1-bromoalkanes with appropriate chain lengths.



All the synthesized objective molecules were confirmed to be liquid crystals by measurement of their DSC curves (DSC), which also allowed to obtain the transition phase enthalpies values in order to evaluate the compounds as candidates for latent heat storage materials in solar thermal power plants.

Acknowledgements. We thank the "Ministerio de Economía y Competitividad" (Project CTQ2015-70724-R) for financial support.

¹ Bayón, R; Rojas, E. Liquid crystals: a new approach for latent heat storage. *Int. J. Energy Res.* **2013**; 37, 1737–1742.

BIG DATA. UNA PERSPECTIVA ESTADÍSTICA

Antonio Salmerón

*Data Analysis Group
Department of Mathematics, University of Almería (Spain)
antonio.salmeron@ual.es*

El fenómeno del big data, ocasionado por la forma en que la sociedad actual es capaz de generar enormes volúmenes de datos de diversa naturaleza, conlleva a la vez una serie de retos y de oportunidades. Desde el punto de vista de la estadística, disciplina tradicionalmente relacionada con el análisis de los datos, el big data ha supuesto un verdadero cambio de paradigma, renovando herramientas casi olvidadas y obligando a redefinir esquemas que se daban por bien asentados.

En la charla analizaremos algunos de estos aspectos y presentaremos resultados de investigaciones recientes con el ánimo de ilustrar las amplias posibilidades que el big data supone para la investigación en estadística.

LAS CIENCIAS AMBIENTALES EN EL ANTROPOCENO

Javier Cabello Piñar

*Centro Andaluz para la Evaluación y Seguimiento del Cambio Global (CAESCG)
Dpto. Biología y Geología, Universidad de Almería
jcabello@ual.es*

Los procesos de cambio global generados por el impacto de las actividades humanas sobre el sistema Tierra representan uno de los mayores retos del siglo XXI para nuestra sociedad. A escala mundial, estos procesos están provocando la pérdida de biodiversidad y la disminución de los servicios que proveen los ecosistemas, poniendo en peligro el mantenimiento del bienestar humano. Como resultado de ello, la comunidad científica considera que estamos en una nueva era, el Antropoceno, en la que las actividades humanas actúan modificando la dinámica del Planeta con una magnitud similar a la de las fuerzas geológicas. En este escenario adverso, surge la necesidad de abordar los problemas ambientales desde una perspectiva científica que permita la conceptualización y comprensión de la relación actual entre la especie humana y la naturaleza. Para ello es necesario transitar hacia esquemas de trabajo realmente transdisciplinarios, a la par que se progresa en la configuración de una especialidad científica dedicada al estudio de los llamados socioecosistemas.

Los ambientólogos aparecen como los profesionales mejor preparados para desempeñar este papel, ya que su formación se centra en el estudio de las herramientas y conceptos necesarios para entender y dar respuesta a los sistemas acoplados humanos-naturaleza.

8. Lista de los autores principales

<i>Póster</i>	<i>Autor</i>	<i>Pág.</i>	<i>Póster</i>	<i>Autor</i>	<i>Pág.</i>
1	Arzate-Salgado	13	39	Aguilera-Sáez	51
2	Aznar-García	14	40	Aït-Hammi	52
3	Barceló-Villalobos	15	41	Arrabal-Campos	53
4	Campos-Mañás	16	42	Belmonte-Sánchez	54
5	Céspedes	17	43	Cutrone	55
6	de la Obra	18	44	Díaz-Galiano	56
7	Esteban-García	19	45	Ferrer-Aguirre	57
8	Estrella	20	46	González-Fernández	58
9	Ezzizaoui	21	47	Hinojo-Ibáñez	59
10	Gómez-Serrano	22	48	López	60
11	González-Céspedes	23	49	López-García	61
12	González-López	24	50	López-Martínez	62
13	Jurado	25	51	López-Ruiz	63
14	Martínez-García	26	52	Lorenzo	64
15	Morillas	27	53	Marín-Sáez	65
16	Navarro-López	28	54	Martínez-Piernas	66
17	Pérez-Martín	29	55	Moreno-García	67
18	Roncero-Ramos	30	56	Murcia-Morales	68
19	Sepúlveda	31	57	Navarro	69
20	Soriano-Molina	32	58	Plaza-Garrido	70
21	Zerouh	33	59	Raya-Barón	71
22	Bujaldón-Berruezo	34	60	Romera-Torres	72
23	Fenoy	35	61	Ruiz-Muelle	73
24	Fenoy	36	62	Salinas-García	74
25	Hernández-Hernández	37	63	Suárez Sierra	75
26	Navarro-Martínez	38	64	Torres	76
27	Navarro-Martínez	39	CP	Salmerón	77
28	Ortega	40	CP	Cabello-Piñar	78
29	Román	41			
30	Ropero	42			
31	Salinas	43			
32	Veiga	44			
33	Cabrera-Padilla	45			
34	Gálvez-Rodríguez	46			
35	Márquez-García	47			
36	Moreno	48			
37	Ramos-López	49			
38	Sánchez-García	50			



experimentales



UNIVERSIDAD DE ALMERÍA
Escuela Internacional de Doctorado

