

LIBRO DE ABSTRACTS



VIII SIMPOSIO de Investigación EN CIENCIAS EXPERIMENTALES

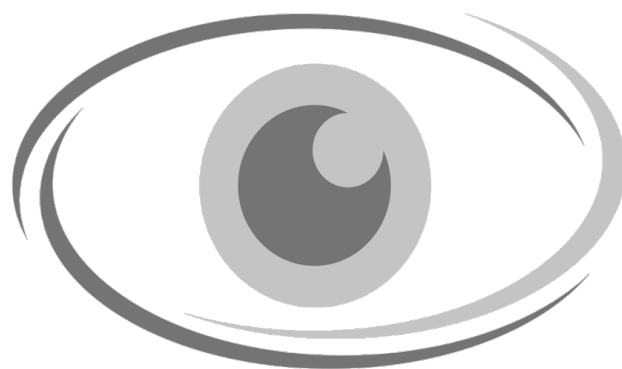
Festividad de San Alberto Magno
Patrón de Ciencias Experimentales

14-15 Noviembre 2019



Libro de Abstracts

2019



**VIII SIMPOSIO
de Investigación
EN CIENCIAS EXPERIMENTALES**

***Editores: Ignacio Fernández de las Nieves, M^a Carmen Cerón García,
Miriam Álvarez Corral, Enrique de Amo Artero.***

Edición: Universidad de Almería

ISBN: 978-84-17261-95-5

DEPÓSITO. LEGAL: AL 2538-2019

VIII Simposio de Investigación en Ciencias Experimentales

**Festividad de San Alberto Magno
14 y 15 de noviembre de 2019**

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	
Secretaría Técnica	
2. Saluda del Decano de la Facultad de Ciencias Experimentales	3
3. Carta del Comité Organizador	4
4. Información importante del Simposio	6
5. Programa	7
6. Patrocinio del Simposio	9
7. Lista de títulos de pósteres	10
8. Resúmenes	
Biotecnología y bioprocesos industriales	17
Ciencias aplicadas y medioambientales	46
Matemáticas	63
Química	70
Conferencias plenarias	95
9. Lista de los autores principales	101

1. Organización

Comité Organizador

Ignacio Fernández de las Nieves (Universidad de Almería)
M^a del Carmen Cerón García (Universidad de Almería)
Miriam Álvarez Corral (Universidad de Almería)
Enrique de Amo Artero (Universidad de Almería)

Comité Científico Evaluador

María Martínez Galera (Universidad de Almería)
Juan Capel Salinas (Universidad de Almería)
Francisco García Camacho (Universidad de Almería)
María Dolores Macías Sánchez (Universidad de Cádiz)
Cecilio Oyonarte Gutiérrez (Universidad de Almería)
Blas Torrecillas Jover (Universidad de Almería)
Daniel Sánchez-Rodas Navarro (Universidad de Huelva)
Cristina Armas Kulik (CSIC -EZAA Almería)
Pedro A. Guil Asensio (Universidad de Murcia)

Secretaría Técnica

Josefa Leticia López Martínez (Universidad de Almería)
Elvira Navarro López (Universidad de Almería)
Irene Torres García (Universidad de Almería)

2. Saluda del Decano de la Facultad de Ciencias Experimentales

Durante los próximos 14 y 15 de noviembre de 2019 celebraremos el VIII Simposio en Ciencias Experimentales, con motivo de la celebración de nuestro patrón, san Alberto Magno. Para esos días ya se habrá comenzado, de hecho, con las actividades del propio Simposio, pues desde el martes día 5 de noviembre, se han comenzado a exponer, en la planta baja del Aulario IV, los pósteres que aportan nuestros jóvenes investigadores para compartir parte de lo que ha sido su trabajo de investigación en este último año. Este es un compromiso de la Facultad de Ciencias Experimentales de la UAL, haciendo así explícito su apoyo a la tarea científica de sus miembros.

En esta octava edición seguimos con el formato, ya consolidado desde ediciones anteriores, en el que, además de la exposición de pósteres, tendrán lugar las comunicaciones tipo “flash” (de 5’ de duración) por los participantes, y las conferencias de 30’ impartidas por investigadores invitados desde cada una de las cuatro temáticas relacionadas con los doctorados que pretende dar cabida este encuentro: “Biotecnología y Bioprocesos Industriales”, “Ciencias Aplicadas y Medioambientales”, “Matemáticas” y “Química”. Por tanto, podemos decir que se ha consolidado un estilo propio que, así lo esperamos, parece satisfacer las expectativas de nuestros jóvenes investigadores.

Un año más es también imprescindible reiterar el agradecimiento de todas las personas e instituciones que hacen posible esta realidad: desde los miembros del Comité Organizador, con su Secretaría Técnica, hasta el Comité Científico Evaluador, por su incansable compromiso con el Simposio; a la Escuela Internacional de Doctorado, al Vicerrectorado de Investigación, cuya financiación hace realidad el Simposio; a los Centros de Investigación CIAIMBITAL y CEIA3, por su apoyo y trabajo; y a las empresas colaboradoras, DICSA y BRUKER ESPAÑOLA, pues hacen posible la entrega de los premios; así como el apoyo explícito de las Reales Sociedades de Matemáticas (RSME) y de Química (RSEQ), que nos dan su respaldo; a todos ellos, nuestro agradecimiento y el reconocimiento desde nuestra Facultad.

A todos vosotros quiero transmitir mis felicitaciones y agradecimiento, en nombre propio, en el del Equipo decanal que coordino y en el de toda la Junta de la Facultad de Ciencias Experimentales que presido, ahora ya en mi último año de mandato. A todos os deseo un fructífero VIII Simposio, y un feliz san Alberto Magno 2019.

Enrique de Amo Artero
Decano de la Facultad de Ciencias Experimentales

3. Carta del Comité Organizador

Bienvenidos a una nueva edición del Simposio de Investigación en Ciencias Experimentales que, un año más, y ya van ocho, quién lo diría, celebramos este 2019. El Simposio se consolida en nuestra institución, no sólo como evento científico que ya esperan nuestros estudiantes de doctorado, posdoctorales y alumnos de últimos años de grado, sino que además consolidamos su nuevo título, "El Simposio", que no "El Minisimposio". La experiencia adquirida durante las siete ediciones anteriores y sobre todo el éxito acumulado desde 2011 en el que se gestó la primera edición, son avales suficientes para darle una mayor proyección a una jornada tan querida y motivadora para todos nosotros.

En esta edición se ha modificado el programa de actividades. El jueves 14, un día antes al día de San Alberto Magno, se celebra el Simposio durante la mañana y la tarde. Por la mañana contamos con dos conferencias invitadas. Por un lado, una inicial que pondrá en contexto el sistema nacional de Investigación e Innovación, y una segunda que pondrá sobre la mesa los conceptos básicos de la patentabilidad. Por la tarde del jueves, al igual que durante la mañana del viernes contaremos con cuatro conferencias invitadas adicionales que intentarán abordar de una forma amena y divulgativa diferentes disciplinas científicas. Este año, como decíamos, cambia la planificación temporal al culminar el Simposio el viernes 15 de noviembre a medio día con la clásica Copa de Vino cortesía de DICSA. Una edición más, se les da continuidad a las comunicaciones *flash* a lo largo de los dos días, siendo las mejores premiadas con cuantías económicas de 300 euros. Como todos los años, las temáticas relacionadas con los doctorados en, Biotecnología y Bioprocesos industriales, Ciencias Ambientales, Matemáticas y Química, serán eje fundamental sobre el cual se sustenten todas estas contribuciones.

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

Una mención especial se ha de hacer a la segunda de las empresas que financian el Simposio, como es BRUKER ESPAÑOLA, que sigue fiel a su apoyo incondicional a los eventos científicos organizados por nuestra Universidad. Tanto a la empresa DICSA como a BRUKER, nuestro más sincero agradecimiento.

Al igual que en ediciones anteriores se ha de enfatizar la labor desinteresada que el comité científico realiza. A los profesores Dr. Blas Torrecillas Jover, Dr. Cecilio Oyonarte Gutiérrez, Dra. María Martínez Galera, Dr. Francisco García Camacho y Dr. Juan Capel Salinas, mil gracias. Queremos hacer extensivo este efusivo agradecimiento a los miembros del comité científico externo a la Universidad de Almería y que lo constituyen los profesores Dra. María Dolores Macías Sánchez (Universidad de Cádiz), Dr. Daniel Sánchez-Rodas Navarro (Universidad de Huelva), Dr. Gabriel del Barrio Escribano (CSIC -EZAA Almería) y Dr. Pedro A. Guil Asensio (Universidad de Murcia).

Os deseamos disfrutéis de este enriquecedor evento.

Comité Organizador

4. Información importante del Simposio

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

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

Los premios serán de 300 euros a las mejores comunicaciones flash, y de 150 euros a los mejores pósteres, pudiendo otorgarse más de uno por temática. Un año más, las temáticas para intentar abordar a todos los doctorados de Ciencias de la Universidad de Almería y fomentar así que la jornada sea aún más enriquecedora son 1) Biotecnología y Bioprocesos industriales, 2) Ciencias Aplicadas y medioambientales, 3) Matemáticas, y 4) Química. La resolución de los mismos se dará a conocer el día de San Alberto en el acto de clausura, el 15 de noviembre de 2019. La selección de premios la llevará a cabo el comité científico.

5. Programa

Jueves 14 de noviembre 9:00 – 13:30 h

9:00-9:30 h	Entrega de documentación
9:30-10:00 h	Bienvenida
10:00-10:30 h	Conferencia Plenaria de D. Carlos Herrero Sánchez (CIAIMBITAL) “The Spanish National Science, Technology and Innovation System: current situation, performance indicators and challenges”
10:30-11:00 h	Conferencia Plenaria de Dña. Beatriz Pérez Esteban (OEPM) “El valor de lo intangible: conceptos básicos de patentabilidad”
11:00-11:30	Comunicaciones Flash
11:30-12:00 h	Pausa para café
12:00-12:30 h	Sesión de Pósteres
12:30-13:00 h	Comunicaciones Flash
13:00-13:30 h	Comunicaciones Flash

Jueves 14 de noviembre 16:30 – 19:00 h

16:30-17:00 h	Conferencia Plenaria de Dña. María Dolores Macías Sánchez (UCA) “Extracción a alta presión de compuestos bioactivos a partir de microalgas”
17:00-17:30 h	Comunicaciones Flash
17:30-18:00 h	Conferencia Plenaria de D. José Antonio Rodríguez Lallena (UAL) “Números metálicos, proporciones y otras sorpresas”
18:00-18:30 h	Pausa para café
18:30-19:00 h	Sesión de Pósteres

Viernes 15 de noviembre 9:00 – 13:15 h

9:00-9:30 h	Conferencia Plenaria de D. Daniel Sánchez Rodas-Navarro (UHU) “Arsénico en el aire: Fuentes Antropogénicas y Análisis Químico”
9:30-10:00 h	Comunicaciones Flash
10:00-10:30 h	Conferencia Plenaria de D. Antonio Rodríguez Diéguez (UGR) “Coordination chemistry to build dreams”
10:30-11:00 h	Pausa para café
11:00-11:30 h	Entrega de premios
12:00-13:00 h	Conferencia de San Alberto D. Pedro J. Miana Sanz (Universidad de Zaragoza) “Matemáticos (y matemáticas) pioneros en España”
13:15 h	Copa de vino cortesía de DICSA

6. Patrocinio del Simposio



EIDUAL



experimentales



Vicerrectorado de
Investigación, Desarrollo
e Innovación



7. Lista de títulos de pósteres

Biotecnología y bioprocesos industriales

- B-P1. Un nuevo enfoque para cuantificar la subestimación de la lipólisis intestinal in vitro en el modelo de titración pH-stat. I. M. Agredano
- B-P2. La mutación *RES* (*restored cell structure by salinity*) demuestra el papel esencial de una DEAD-box RNA helicasa en el desarrollo de tomate y su respuesta a estrés. C. Capel
- B-P3. Aislamiento y caracterización del gen *CyRPA*, para su uso en el tratamiento de la malaria. J. Cebrián-Carmona
- B-P4. Preparación y caracterización de agregados de enzima entrecruzados (CLEAs) del mutante XynB2GH52^{Y509E} de *G. stearothermophilus*. L. M. Contreras
- B-P5. *Genetic network* implicados en la formación de tricomas glandulares de tomate (*Solanum lycopersicum* L.). R. Fonseca
- B-P6. Evaluación de microalgas cultivadas en residuos agroindustriales como ingrediente para alimentación animal: rotura de la pared celular mediante enzimas exógenas. A. Galafat
- B-P7. Inclusion of microalgae carotenoid extract in diets for gilthead seabream *Sparus aurata*. A. Galafat
- B-P8. Desarrollo de cerveza funcional a partir de microalgas. L. García-Abad
- B-P9. Production of EPA rich polar lipid concentrates from microalgae *Nannochloropsis* sp. M. J. Jiménez
- B-P10. Microorganismos con potencial biotecnológico para la biorremediación de compuestos fenólicos. M. M. Jurado
- B-P11. Nuevos antibióticos: la pila de compostaje como fuente de productores de sustancias de interés en biomedicina. R. Lerma-Moliz
- B-P12. Removal ammonium amount of urban wastewater for using to culture *Amphidinium carterae*. P. López-García
- B-P13. Resistencia antibiótica asociada al grupo de coliformes fecales aislados en compost industriales. J. A. López-González
- B-P14. Isolating bioactive compounds from *Amphidinium carterae* by solvent sequential gradient partition. M. López-Rodríguez
- B-P15. Effect of lipidic structuration of *Aurantiochytrium limacinum* SR21 oil on in vitro permeability through a biological membrane. J. M. Delgado
- B-P16. Effect of an enzyme pretreatment on some antinutritional factors present in plant ingredients potentially used in aquaculture feeds. F. P. Martínez
- B-P17. Caracterización filogenética y metabólica de la microbiota de los sedimentos de balsas de evaporación de alpechín. M.R. Martínez-Gallardo
- B-P18. Comparison of culture media using wastewater for the production of MACC-1. A. Morillas

B-P19. Evaluación de la radiación UV-C para mantener la calidad postcosecha y como método acumulador de antioxidantes en frutos de tomate IV-gama.	C. Nájera
B-P20. A case of combustion optimization of biomass from crop residues in boilers.	J. V. Reinoso-Moreno
B-P21. Incidencia de portadores faríngeos de estreptococos alfa y beta-hemolíticos en una población de estudiantes de la Universidad de Almería y la relación con posibles desórdenes en los niveles de IgA secretora y otros factores poblacionales.	A. Saborido-Alconchel
B-P22. Assesment and modeling of microalgae photosynthesis considering the effects of nitrogen concentration.	A. Sánchez-Zurano
B-P23. Biodegradabilidad y humificación como indicadores en el proceso de compostaje industrial del alpeorujo.	A. B. Siles-Castellano
B-P24. Antibiofouling surfaces characterization and method validation allowing a rapid selection of the most suitable surface to built efficient closed-PBRs.	Y. Soriano-Jerez
B-P25. Aislamiento y caracterización de cianobacterias y microalgas con carácter biopesticida a partir de jardines urbanos.	A. J. Toribio
B-P26. Estudio del conocimiento, utilización y satisfacción del uso de terapias pseudocientíficas en la población.	M. Ortiz
B-P27. Percepción sobre las nuevas tecnologías entre universitarios científicos.	R. Salazar-Vergara
B-P28. Relación entre indicadores de biodiversidad y parámetros de maduración a partir de muestras de compost procedentes de alpeorujo.	M. J. Estrella-González
B-P29. Caracterización de un mutante insercional de <i>Solanum lycopersicum</i>	J. D. López-Fábregas

Ciencias aplicadas y medioambientales

CA-P1. Evaluando el impacto de la restauración con almendro ecológico en los servicios ecosistémicos y el bienestar humano: caso de estudio Sierra María-Los Vélez.	D. Alba-Patiño
CA-P2. Efecto del tipo de contenedor en el desarrollo vegetativo en plantas de tomate injertado en cultivo sin suelo.	J. Gallegos-Cedillo
CA-P3. Beneficio del silicio en el desarrollo vegetativo y producción del cultivo de tomate en fibra de coco.	V. M. Gallegos-Cedillo
CA-P4. Análisis de las amenazas que afectan a la flora amenazada española.	C. Hernández-Ruíz
CA-P5. Mutación frente a transferencia horizontal de genes. Diseño experimental para el estudio de la evolución de resistencia a Cu ²⁺ en <i>Pseudomonas syringae</i> .	A. López-Martín
CA-P6. Analysis of the baltic sea food web using dynamic bayesian networks with hidden variables.	A. D. Maldonado
CA-P7. Uso de vehículos aéreos no tripulados para validar la regeneración de bosques boreales.	P. Martínez-Carricondo

CA-P8. Evaluación de la infiltración mediante el uso de un modelo unidimensional de temperatura en el tramo medio del río Andarax.	F. Navarro-Martínez
CA-P9. Hidrogeología kárstica de la mina de Uchucchacua.	F. Navarro-Martínez
CA-P10. Preprocesado de imágenes multispectrales aplicado al campo de la agricultura.	L. O. López
CA-P11. Building blocks for quantum circuits.	F. Orts
CA-P12. Estudio de la correlación en la estrategia de Pairs Trading.	J. P. Ramos-Requena
CA-P13. Modulation of obesity-associated inflammation by dietary vegetable fats in a murine model.	C. Rodríguez-García
CA-P14. Key species have a higher effect on leaf litter decomposition and nutrient cycling than functional diversity.	J. Rubio-Ríos
CA-P15. Biorremediación de suelos contaminados por alpechín mediante <i>landfarming</i> y compostaje: efecto de la bioaumentación.	J. Salinas-Nieto
CA-P16. Estudio ionómico comparativo de la especie <i>Jurinea pinnata</i> sobre sustratos gipsófilos y dolomíticos.	I. Trujillo-Artero
CA-P17. Tipos emocionales de ecosistemas (TEEs): una aproximación para evaluar las conexiones humano-naturaleza.	L. M. Vázquez

Matemáticas

M-P1. Finite Markov chains in predictive study of Spanish telephony market.	E. Caballero-Ontiveros
M-P2. Lipschitz operator ideals and their relations with tensor norms.	M. G. Cabrera-Padilla
M-P3. Extension of isometries on the unit sphere of $C(K,H)$.	M. Cueto-Avellaneda
M-P4. A new estimation method based on fractal structures.	J. F. Gálvez-Rodríguez
M-P5. Intercambio de clave multiusuario en el contexto IoT.	M. D. Gómez-Olvera
M-P6. Incorporación del exponente de Hurst en el modelo factorial de Fama y French.	M. N. López-García
M-P7. Eigenvalues of a differential operator related to classical discrete Sobolev orthonormal polynomials.	J. F. Mañas-Mañas

Química

Q-P1. Cambios conformacionales en el sitio activo de la lisozima en una estructura cristalina con una hidratación baja.	D. Alba-Elena
Q-P2. Post-synthetic functionalization of MIL-100(Fe) metal-organic framework nanoparticles with phosphorylated cyclodextrin derivatives.	J. M. Casas-Solvas
Q-P3. An approach to the total synthesis of omega-3 fatty acids.	L. Escot-Navarro
Q-P4. Nuevos MOFS 2D y 3D basados en un ligando tricarboxílico.	A. García-García
Q-P5. Compuestos de coordinación multifuncionales basados en ligandos aromáticos nitrogenados con grupos carboxilato.	A. A. García-Valdivia

Q-P6. Propagation of pesticides from regenerated water to the crops by irrigation.	M. García-Valverde
Q-P7. Interacción de complejos de Ru(II) frente a ADN plasmídico (pKSII) bajo irradiación UV-Vis.	A. Hernández-Zanoletty
Q-P8. Development of a method of analysis for evaluating the contamination of edible oils with mineral oils with GC-FID.	J. L. Hidalgo-Ruiz
Q-P9. Estudio de la interacción de lisozima con colorantes sulfonados.	C. M. López-Berenguel
Q-P10. Reacción de Reformatsky diastereoselectiva mediada por diclorociclopentadieniltitanio(III).	J. L. López-Martínez
Q-P11. Procedure to study the interaction of water molecules with catalytic intermediates by AIMD and neutron scattering.	B. López
Q-P12. Cómo determinar plaguicidas polares en naranja y tomate mediante UHPLC-Orbitrap-MS.	L. Manzano-Sánchez
Q-P13. Use of CpTiCl ₂ in the synthesis of marine terpenoids analogs.	M. Martínez-López
Q-P14. La importancia de los artefactos de clonación en las propiedades biofísicas de las proteínas recombinantes.	M. Plaza-Garrido
Q-P15. Production of amphidinols and other bioproducts of interest by the marine microalga <i>Amphidinium carterae</i> unraveled by NMR metabolomics.	A. C. Abreu
Q-P16. Aplicación de una técnica avanzada (GC-HRMS-Q-Orbitrap) para la determinación de alqueni-bencenos en pimienta y sus variedades.	A. Rivera-Pérez
Q-P17. Análisis y clasificación de diferentes variedades de tomate en base a su contenido en calisteginas mediante GC-Q-Orbitrap y ANOVA.	A. Romera-Torres
Q-P18. Deaggregation agents: the key to boost the lithium-catalyzed hydrosilylation.	C. Ruiz
Q-P19. New hybrid materials based on gold nanotriangular prisms or nanospheres with anthraquinoid pendants.	A. B. Ruiz-Muelle
Q-P20. Unión del colorante azul de bromofenol a lisozima: ¿Dónde se une el colorante?	M. Salinas-García
Q-P21. Una cadena supramolecular 1D basada en unidades [H ₂ V ₁₀ O ₂₈] ⁴⁻ decorada con cationes orgánicos: un enfoque teórico y experimental.	E. Sánchez-Lara
Q-P22. Resolución estructural de la proteína CheY de <i>E. coli</i> y búsqueda de fragmentos inhibidores de su función.	J. M. Suárez
Q-P23. Síntesis total de dihidrorosefurano, un producto natural mal asignado.	I. Torres-García
Q-P24. NMR metabolomics as an efficient approach in the agri-food sector.	A. I. Tristán
Q-P25. Demonstration that it is possible to apply GC-HRMS to pesticide analysis with a routine method.	M. Vargas-Pérez

Conferencias plenarias

CP-1. The Spanish National Science, Technology and Innovation System: current situation, performance indicators and challenges	C. Herrero-Sánchez
CP-2. El valor de lo intangible: conceptos básicos de patentabilidad.	B. Pérez-Esteban
CP-3. Extracción a alta presión de compuestos bioactivos a partir de microalgas.	M. D. Macías-Sánchez
CP-4. Números metálicos, proporciones y otras sorpresas.	J. A. Rodríguez-Lallena
CP-5. Arsenic in the air: anthropogenic sources and chemical analysis	D. Sánchez-Rodas
CP-6. Coordination chemistry to build dreams	A. Rodríguez-Diéguez

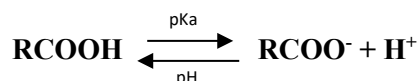
8. Resúmenes

UN NUEVO ENFOQUE PARA CUANTIFICAR LA SUBESTIMACIÓN DE LA LIPOLISIS INTESTINAL IN VITRO EN EL MODELO DE TITRACIÓN pH-STAT

I. M. Agredano, M. Díaz and F. J. Moyano

*Departamento de Biología y Geología, Facultad de ciencias experimentales,
Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
isagrpil@ual.es*

El modelo pH-stat, para digestión in vitro de lípidos es un medio poderoso para obtener conocimientos sobre la biodisponibilidad potencial y el comportamiento de la grasa durante la digestión. Es el método más usado, debido a la fácil configuración y al monitoreo rápido y continuo de las muestras. El cálculo del grado de hidrólisis (GH) con el pH-stat se basa en la titulación de los ácidos grasos liberados durante la hidrólisis enlaces éster lípidos, por enzimas digestivas. El consumo de solución valorante (NaOH) en la lipólisis es una medida indirecta del grado de hidrólisis, ya que evalúa cualquier especie química que se desprotona al pH del medio de reacción, en función de su pKa.



Esto supone que el NaOH consumido pueda no ser proporcional a la liberación de ácidos grasos (al haber enlaces ésteres hidrolizados que no liberan el protón y no son titulados), pudiéndose así sobreestimar o subestimar la digestión del lípido. En esta investigación se proponen, analizan y comparan varios métodos que solucionen la subestimación y la sobreestimación del grado de hidrólisis de lípidos medido con la técnica de pH-stat, usando la enzima lipasa recombinante de *Thermomyces lanuginosus* y lipasa de pancreatina porcina. La sobreestimación del grado de hidrólisis (GH) se solucionó con el uso de controles (blancos) que miden el consumo de fondo de solución valorante, producido por especies químicas que se desprotonan en las condiciones de digestión. El problema de subestimación del GH en lípidos, se abordó por dos métodos: uso de una retrovaloración de ácidos grasos tras la hidrólisis, a un pH (11,5) en el que todos carboxilos de los ácidos grasos liberados se desprotonan y la inclusión del coeficiente de disociación del ácido graso (α) en la fórmula para calcular el GH, obtenido a partir del pH del medio y el pKa de los ácidos grasos liberados. La obtención del pKa fue: a través de medida directa del pKa tras la hidrólisis de una hora, y por medida directa del pKa tras hidrólisis total del aceite (15 horas). Se descartó el método de retrovaloración debido a la baja replicabilidad de los ensayos. Tampoco se puede usar el pKa del ácido graso pues es variable (entre 4,2 y 10,5) y depende de varios factores: de la concentración del ácido graso, de la longitud de la cadena carbonada, de la mezcla de ácidos grasos, del número de insaturaciones y de las interacciones con otras sustancias químicas del medio (Kanicky et al., 2000)¹. Además de los factores anteriores, se observó que el pKa de los ácidos grasos es muy variable según las condiciones del medio usado para simular la digestión y disminuye al aumentar la concentración de cloruro de calcio. Por todo lo expuesto se determinó que el método más acertado para el cálculo del grado de hidrólisis es el uso de α con medida directa de pKa, por titulación al finalizar cada ensayo de digestión.

Agradecimientos: Esta investigación ha sido financiada con Fondos Europeos (FEDER) y del Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (Proyecto AGL2015-70997-R), y por el grupo de investigación AGR-152 Modelización Digestiva, de la Universidad de Almería.

¹ Kanicky, J.R., Poniatowski, A.F., Mehta, N.R., Shah, D.O. Cooperativity among Molecules at Interfaces in Relation to Various Technological Processes: Effect of Chain Length on the pKa of Fatty Acid Salt Solutions. *Langmuir*, 16, 172-177, (2000).

LA MUTACIÓN *RES* (RESTORED CELL STRUCTURE BY SALINITY) DEMUESTRA EL PAPEL ESENCIAL DE UNA DEAD BOX RNA HELICASA EN EL DESARROLLO DE TOMATE Y SU RESPUESTA A ESTRÉS

**C. Capel¹, I. Albadalejo², I. Egea², B. Pineda³, J. O. García-Abellán²,
F. B. Flores², F. J. Yuste-Lisbona¹, T. Angosto¹, V. Moreno³, R. Lozano¹,
M. C. Bolarín y J. Capel¹**

¹ Centro de Investigación en Agrosistemas Intensivos Mediterráneos y Biotecnología Agroalimentaria (CIAIMBITAL), Universidad de Almería. 04120 Almería, Spain.

² Centro de Edafología y Biología Aplicada del Segura (CEBAS), Campus Universitario de Espinardo. 30100 Murcia, Spain.

³ Instituto de Biología Molecular y Celular de Plantas (UPV-CSIC), Universidad Politécnica de Valencia. 46022 Valencia, Spain.

ccapel@ual.es

Con el objetivo de caracterizar nuevas funciones génicas relacionadas con la respuesta a estrés, el grupo de Genética y Fisiología del Desarrollo Vegetal de la Universidad de Almería ha caracterizado una colección de mutantes de inserción de T-DNA en tomate (*Solanum lycopersicum* L.) cv. MoneyMaker (MM) en condiciones de estrés salino. Durante dicha caracterización se seleccionó el mutante recesivo *res* (*restored cell structure by salinity*), que al ser cultivado en condiciones control muestra clorosis, reducción del crecimiento y desorganización celular. Sin embargo, el cultivo de este mutante en condiciones de estrés salino recupera el fenotipo silvestre. La mutación *res* es de naturaleza somaclonal, es decir, no está ocasionada por la inserción de T-DNA. Mediante una estrategia de mapeo por secuenciación hemos clonado el gen *RES*, lo que nos ha permitido demostrar que el fenotipo mutante está causado por un alelo hipomórfico de un gen de tomate que codifica una RNA helicasa del tipo DEAD-box. Las líneas de silenciamiento parcial RNAi del gen *RES* fenocopian el fenotipo mutante, sin embargo, el silenciamiento extremo ocasiona la muerte de las plantas. Por otra parte, la sobreexpresión del gen *RES* en un fondo genético mutante *res* complementa la mutación, demostrando así que el gen clonado es el responsable del fenotipo mutante. Finalmente, hemos demostrado que la proteína RES está implicada en el procesamiento del rRNA 23S, concretamente del sitio hb-B, al que la proteína se une en ensayos in vitro.

AISLAMIENTO Y CARACTERIZACIÓN DEL GEN *CyRPA*, PARA SU USO EN EL TRATAMIENTO DE LA MALARIA

**J. Cebrián-Carmona¹, J. A. Garrido-Cárdenas¹, C. M. Mesa-Valle¹,
L. González-Cerón² y F. García-Maroto³**

¹*Departamento de Biología y Geología, Universidad de Almería 04120 (España)*

²*Instituto Nacional de Salud Pública, Tapachula, Chiapas 30700 (México)*

³*Departamento de Química y Física, Universidad de Almería 04120 (España)*
jcc851@inlumine.ual.es

La Organización Mundial de la Salud (OMS) tiene una serie de objetivos de desarrollo del milenio, entre los cuales destaca la lucha contra la malaria, con el fin de su reducción y erradicación¹. La inexistencia de vacunas efectivas contra esta enfermedad se debe a las numerosas estrategias que utilizan los protozoos parásitos para evitar al sistema inmune². En este trabajo se ha trabajado con *Plasmodium vivax* -especie característica de las regiones del sur de América-³, y se ha centrado en el aislamiento del gen *CyRPA* a partir de muestras de pacientes de México del sur infectados con malaria. El objetivo fundamental ha sido la caracterización de dicho gen, y para ellos se han llevado a cabo diferentes análisis de secuencias tanto de ADN como de la proteína a la que da lugar (Tabla 1), además se llevó a cabo un estudio de las sustituciones sinónimas y no sinónimas. Los resultados obtenidos confirman a la proteína *CyRPA* como un buen candidato como diana terapéutica en la lucha contra la malaria.

Tabla 1. Comparación de secuencias entre las obtenidas en este trabajo y las del gen *CyRPA* en *P. falciparum* y *PvSal-1*. (pb: pares de bases, Aa: aminoácidos).

<i>Muestras</i>	<i>P. falciparum</i>		<i>PvSal-1</i>			
	Nº de pb	Nº de Aa	% Sim (pb)	% Sim (Aa)	% Sim (pb)	% Sim (Aa)
<i>M1</i>	1101	370	48,14	35,68	98,46	95,14
<i>M5</i>	1098	369	47,50	35,41	97,73	95,41
<i>M6</i>	1101	370	47,87	35,41	98,46	95,14
<i>M7</i>	1098	369	47,50	35,41	97,82	95,41
<i>M8</i>	1101	370	47,96	35,41	98,46	95,14
<i>M9</i>	1098	369	47,50	35,41	97,73	95,95
<i>M10</i>	1098	369	47,96	36,22	97,64	94,86

¹ Garrido-Cardenas, J. A., González-Cerón, L., Manzano-Agugliaro, F. & Mesa-Valle, C. Plasmodium genomics: an approach for learning about and ending human malaria. *Parasitol. Res.* 118, 1-27 (2019).

² Daily, J. P. Malaria 2017: Update on the Clinical Literature and Management. *Curr. Infect. Dis. Rep.* 19, 1-7 (2017).

³ Garrido-Cardenas, J. A., Cebrián-Carmona, J., González-Cerón, L., Manzano-Agugliaro, F. & Mesa-Valle, C. Analysis of Global Research on Malaria and Plasmodium vivax. *Int. J. Environ. Res. Public Health* 16, 1928 (2019)

PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE AGREGADOS DE ENZIMA ENTRECruzADOS (CLEAs) DEL MUTANTE XynB2GH52^{Y509E} DE *G. stearothermophilus*

G.V. Romero¹, C. Aguirre², J. M. Clemente-Jiménez³, F. J. Las Heras-Vázquez³,
F. Rodríguez-Vico³ y L. M. Contreras^{1,3}

¹Centro de Investigación de Ambiente, Biología y Química (Ambioquim), Universidad de Carabobo, Venezuela gyromero@uc.edu.ve

²Lab. de Biocatálisis y Biorecursos. Universidad Católica de la Santísima Concepción; Chile.

³CIAMBITAL Departamento de Química y Física. Universidad de Almería, España.
lellyscontreras@gmail.com

La preparación de agregados enzimáticos entrecruzados (CLEAs) ha cobrado relevancia como estrategia para la inmovilización de enzimas, siendo una alternativa a los métodos tradicionales de inmovilización que involucran soportes sólidos y que podrían reducir la especificidad y la actividad del biocatalizador¹. Entre las ventajas de inmovilizar en agregados entrecruzados está conferir a la proteína alta estabilidad a valores extremos de pH y temperatura. La β -xilosidasa de *G. stearothermophilus* perteneciente a la familia GH52 (XynB2 GH52) ha sido bien caracterizada bioquímica y biofísicamente². Esta enzima también ha sido sometida a mutagénesis sitio-dirigida lo que ha permitido el desarrollo de nuevas actividades enzimáticas, siendo por lo tanto una plataforma útil para generar enzimas multifuncionales³. Estas características hacen que XynB2 GH52 sea un candidato de gran interés para fines industriales, sobre todo en la producción de biocombustibles de segunda generación. En este trabajo el mutante XynB2 GH52^{Y509E} de *G. stearothermophilus* con actividad de β -xilosidasa y xilanasas fue inmovilizado como un agregado de enzimas entrecruzado. La enzima mutada XynB2GH52^{Y509E} se produjo de forma recombinante a partir de la expresión del plásmido recombinante pJAVI100 en células de *E. coli* C43 después de la inducción con IPTG. La enzima XynB2GH52^{Y509E} se obtuvo de forma soluble y aprovechando su carácter termófilo se sometió a purificación parcial por calentamiento. Previo a la formación de los CLEA se estudió del sulfato amónico y glutaraldehído como precipitante y entrecruzante respectivamente. La enzima parcialmente purificada se precipitó con sulfato de amonio al 90% y la formación de agregados se indujo con glutaraldehído 12,5 mM. El CLEA se recuperó como un precipitado insoluble y se sometió a lavados para eliminar el glutaraldehído sobrante y la enzima no ligada. Las condiciones optimizadas permitieron recuperar una actividad del 92,3% mejorándose también las condiciones de estabilidad térmica y de pH de la enzima mutada inmovilizada frente a la enzima mutada libre. En relación con la temperatura óptima de la reacción y la termoestabilidad se observó que la enzima en CLEA es activa a un mayor rango de temperatura en comparación con su forma libre, sugiriendo que la inmovilización la protege de la pérdida de su actividad. La inmovilización también le confirió a la enzima mayor estabilidad química evitando su desnaturalización frente a valores extremos de pH. Respecto a los parámetros cinéticos se obtuvo que la K_m de XynB2GH52^{Y509E} en CLEA sufrió un ligero aumento en comparación con la enzima soluble (1,16±0,22 vs 0,89±0,09 mM), mientras que la V_{max} disminuyó ligeramente. Esta disminución en la afinidad de la enzima inmovilizada podría explicarse por una dificultad del sustrato para acceder al sitio activo. Es oportuno señalar que aunque la XynB2GH52^{Y509E} inmovilizada en CLEA mantiene la actividad xilanasas ésta fue menor que la exhibida por la forma libre. En conclusión, la inmovilización de XynB2GH52^{Y509E} como agregado enzimático entrecruzado (CLEA) fue exitosa mejorando su estabilidad térmica y química.

¹ R. Sheldon. CLEAs, Combi-CLEAs and 'Smart' Magnetic CLEAs: Biocatalysis in a Bio-Based Economy: *Catalysts*. **2019**, *9*, 261-292.

² L.M. Contreras, J. Gómez, J. Prieto, J.M. Clemente-Jiménez, F.J. Las Heras-Vázquez, et al. The family 52 beta-xylosidase from *Geobacillus stearothermophilus* is a dimer: structural and biophysical characterization of a glycoside hydrolase. *Biochim Biophys Acta*. **2008**, *1748*, 1924-1934

³ Z. Huang, X. Liu, S. Zhang, Z. Liu. GH52 xylosidase from *Geobacillus stearothermophilus*: characterization and introduction of xylanase activity by site directed mutagenesis of Tyr509. *J. Ind. Microbiol Biotech*. **2013**, *41*, 65-74.

GENETIC NETWORK IMPLICADOS EN LA FORMACIÓN DE TRICOMAS GLANDULARES DE TOMATE (*SOLANUM LYCOPERSICUM* L.)

R. Fonseca, R. R. Berenguel, C. Capel, T. Angosto, R. Lozano y J. Capel

¹Área de Genética. Centro de Investigación en Agrosistemas Intensivos Mediterráneos y Biotecnología Agroalimentaria (CIAIMBITAL).
Universidad de Almería, 04120 Almería
rfr770@ual.es

Debido al proceso de domesticación, la variabilidad genética del tomate cultivado (*Solanum lycopersicum* L.) se ha reducido considerablemente. Esta erosión genética es particularmente evidente para caracteres relacionados con la resistencia a estreses bióticos. Con el objetivo de incrementar dicha variabilidad genética, nuestro grupo de investigación ha caracterizado una colección de mutantes obtenidos mediante mutagénesis química empleando el mutágeno químico etil metil sulfonato (EMS) en plantas del cultivar Moneymaker de tomate. Como parte de dicha colección se seleccionó el mutante *hairplus* (*hap*), denominado así por presentar una elevada densidad de tricomas tipo I especialmente en tallos vegetativos y tallos de la inflorescencia. Los tricomas son células epidérmicas especializadas presentes en la superficie de casi todas las plantas y entre sus funciones se encuentran las de defensa frente a plagas, actuando como barrera física o secretando sustancias nocivas. Como parte de este trabajo se han generado y caracterizado agrónomicamente dobles mutantes obtenidos del cruzamiento de *hap* con todos los mutantes de tomate alterados en la densidad y la identidad de tricomas de tipo I descritos. La caracterización molecular de los dobles mutantes ha incluido la cuantificación de la expresión de todos los genes implicados en la formación de tricomas, lo que nos ha permitido concluir que existe una relación de epistasis entre los genes *HAIR* y *HAIRPLUS*.

EVALUACIÓN DE MICROALGAS CULTIVADAS EN RESIDUOS AGROINDUSTRIALES COMO INGREDIENTE PARA ALIMENTACIÓN ANIMAL: ROTURA DE LA PARED CELULAR MEDIANTE ENZIMAS EXÓGENAS

A. Galafat¹, A. J. Vizcaíno¹, M. I. Sáez¹, K. Parati², A. Di Biase³, T. F. Martínez¹ y F. J. Alarcón¹

¹ Departamento de Biología y Geología. Universidad de Almería, 04120 Almería, Spain; albagalafat@gmail.com

² Istituto Sperimentale Italiano L. Spallanzani- Loc. La Quercia, 26027 Rivolta d'Adda (CR), Italy.

³ AIA-Agricola Italiana Alimentare, Spa, Brand Veronesi Mangimi, Verona, Italy.

A pesar del creciente interés en la utilización de las microalgas para su uso en alimentación animal, su elevado coste de producción y la presencia de paredes celulares recalcitrantes que reducen su digestibilidad suponen un obstáculo para su uso generalizado. En este sentido, el cultivo de microalgas aprovechando los nutrientes contenidos en efluentes agroindustriales podría reducir su coste de producción y permitir la obtención de una biomasa con mayor contenido en nutrientes. Además, la realización de un tratamiento enzimático de esta biomasa para generar la rotura de la pared celular podría incrementar su valor nutritivo al aumentar la biodisponibilidad de sus componentes intracelulares. Dadas estas consideraciones, el objetivo de este trabajo fue evaluar la efectividad de un tratamiento enzimático para romper la pared celular en dos especies de microalgas, *Nannochloropsis gaditana* y *Scenedesmus almeriensis*, cultivadas ambas en un medio estándar con nutrientes inorgánicos o en un medio orgánico obtenido a partir de una dilución 1:10 (v/v) de purín derivado de la industria porcina. El grado de ruptura de las células se evaluó mediante la cuantificación de los azúcares reductores¹ y de los aminoácidos² liberados durante dicho proceso. Se observó que la concentración de azúcares reductores generados en las biomásas cultivadas en medio orgánico fue significativamente menor a la alcanzada con las biomásas cultivadas en medio estándar, especialmente en *S. almeriensis* se observó una disminución notable a las 6 horas de hidrólisis enzimática. La concentración de aminoácidos liberados fue variable en función de la biomasa utilizada, especialmente en *N. gaditana* se alcanzaron concentraciones significativamente mayores con las biomásas producidas en medio orgánico. Los resultados obtenidos confirman que un tratamiento enzimático previo permite incrementar la biodisponibilidad de los glúcidos y las proteínas contenidas en las biomásas algales.

Agradecimientos. Esta investigación ha sido financiada por los proyectos SABANA (#727874), TRFE-I-2018/001-UAL y CEIJ-C05.1-CEIMAR. Durante el desarrollo del estudio A. Galafat ha sido beneficiaria de una beca TRANSFIERE 2018-UAL.

¹ Church, F.C. Swaisgood, H.E. Porter, D.H. y Catignani, G.L. *J. Dairy Sci.* **1983**, *66*, 1219-1227.

² Miller, G.L. *Anal. Chem.* **1959**, *31*, 3, 426-428.

INCLUSION OF MICROALGAE CAROTENOID EXTRACT IN DIETS FOR GILTHEAD SEABREAM *Sparus aurata*

R. Sales³, A. Galafat¹, F. J. Alarcón-López¹, A. Vizcaíno¹, M. I. Sáez¹,
E. Navarro-López², M. C. Cerón-García², M. Yumi-Tsuzuki³,
F. G. Acién- Fernández², E. Molina-Grima²

¹ Department of Biology and Geology, University of Almería, 04120, Almería, Spain
albagalafat@gmail.com

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

³ Department of Aquaculture, Federal University of Santa Catarina, Florianópolis, Brazil

Carotenoids play an important role on metabolism as immunostimulants, antioxidants and as vitamin A precursor, they are also applied as natural pigments in food industry. Carotenoids are available in plant and algae biomass and must be included in diets for rearing fish, since animals do not synthesize this nutrient¹. Taking into account those potential benefits of carotenoids, the present study produced diets for juvenile gilthead seabream *Sparus aurata* with the inclusion of a carotenoid extract from the microalgae *Nannochloropsis gaditana*, and evaluated the growth performance and the accumulation of carotenoids in the muscle. Four diets were produced: DC – 2% inclusion of carotenoid extract, DC50 – 2% inclusion of carotenoid extract and 50% substitution of fish oil for algae oil, DC100 – 2% inclusion of carotenoid extract and without any fish ingredients (100% substitution of fishmeal and fish oil for *Isochrysis* sp. meal and algae oil) and CT – control diet. The total carotenoid content of each diet was as follows: CT = 1.57 ± 0.10 mg kg⁻¹ d.w., DC = 662.72 ± 21.79 mg kg⁻¹ d.w., DC50 = 657.28 ± 30.52 mg kg⁻¹ d.w., DC100 = 1266.93 ± 106.37 mg kg⁻¹ d.w., the most abundant carotenoids were neoxanthin, violaxanthin and β -carotene. Overall, the inclusion of the carotenoid extract did not influence fish growth performance; however, the full replacement of fish ingredients (DC100) resulted in the reduction of growth and inferior somatic indexes. Fish fed the diets with the inclusion of the extract presented significantly higher carotenoid content than the ones fed the control diet ($p < 0.05$), muscle carotenoid content: 2.52 ± 0.23 , 2.63 ± 0.22 , 3.37 ± 0.74 mg kg⁻¹ d.w. for fish fed DC, DC50 and DC100 respectively, and 0.97 ± 0.30 mg kg⁻¹ d.w. for fish fed CT. The diet DC100 presented the highest carotenoid content, besides, it contained but-fucoxanthin, fucoxanthin, hex-fucoxanthin, diatoxanthin and diadinoxanthin, those carotenoids were available at *Isochrysis* sp. meal, thus, fish fed this diet were the only ones to show those carotenoids in the muscle. Due to the specific deposition metabolism of gilthead seabream the carotenoid accumulation in the muscle was low, which deposits the carotenoids mainly in the skin². The deposition of pigments in the skin is positive to increase the visual aspect of the fish and its marketability. In a point of view of human nutrition, the provision of carotenoids in fish muscle was not reached, since the concentration of this nutrient was much lower than in other foods, as vegetables³. Further analysis on fish immunology and tissue oxidative stress must be done to evaluate other potential effects of the carotenoids included to the diets.

Acknowledgements. This research was funded by H2020-SABANA (727874), TRFE-I-2018/001-UAL and CEIJ-C05.1-CEIMAR projects. A Galafat received a grant from TRANSFIERE 2018-UAL. This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001.

¹ Meyers, S.P., *Pure Appl. Chem.* **2007**, *66*, 1069–1076.

² Gouveia, L., Choubert, G., Pereira, N., Santinha, J., Empis, J., Gomes, E., *Aquac. Res.* **2002**, *33*, 987–993.

³ Saini, R.K., Nile, S.H., Park, S.W. *Food Res. Int.* **2015**, *76*, 735–750.

DESARROLLO DE CERVEZA FUNCIONAL A PARTIR DE MICROALGAS

L. García-Abad, J. J. Gallardo-Rodríguez y L. López-Rosales

*Departamento de Ingeniería Química, Escuela Superior de Ingeniería,
Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
lucia.gabad96@gmail.com*

En los últimos años se ha producido un creciente interés por la elaboración de cervezas artesanales debido a la influencia internacional en este tipo de prácticas y a la búsqueda de nuevos productos de calidad por parte del consumidor. En 2008 existían un total de 21 microcerveceras a nivel nacional mientras que en el año 2015 el número de microcerveceras ascendió hasta 361, lo que supone un aumento del 1600%¹. Esta práctica permite obtener un producto de mayor calidad que el fabricado industrialmente ya que la materia prima está seleccionada cuidadosamente y permite la elaboración de recetas personalizadas dando lugar a nuevos productos.

Por otro lado, la demanda de alimentos y bebidas funcionales también crece a nivel mundial². Dentro de los ingredientes funcionales, los obtenidos de microalgas son muy relevantes ya que aportan ácidos grasos de cadena larga, carotenoides antioxidantes, etc., todos ellos con gran valor nutracéutico³.

En este trabajo el objetivo último planteado es desarrollar una cadena de valor a partir de microalgas en base al potencial de la biomasa para su uso en la producción de bebidas fermentadas. La biomasa microalgal empleada no es rica en azúcares fermentables por lo que su funcionalidad no estaría sujeta al propio proceso fermentativo por parte de la levadura. La biomasa de microalgas (*Chlorella*) se utilizó en el proceso de elaboración de cerveza modificando añadiéndose en el proceso de hervido, tras la maceración de la malta (Figura 1).

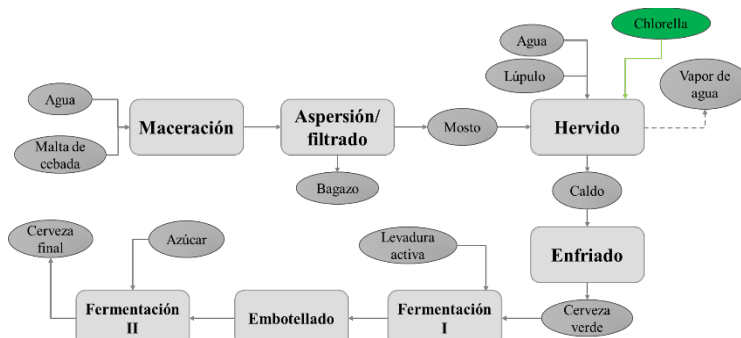


Figura 1. Diagrama de flujo del proceso de producción de la cerveza funcional.

En este estudio se realizó un seguimiento del proceso de fermentación y la influencia de la biomasa microalgal en el contenido de alcohol, color, y apariencia de la cerveza elaborada. El resultado final nos reveló que el uso de biomasa microalgal no permite el crecimiento de la levadura *Sacharomices Cerevisiae* y con ello se inhibe la producción de alcohol.

Agradecimientos. Este estudio fue realizado gracias a los recursos y apoyo del departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Almería.

¹ Aitana Constants, 'La Crisis Dispara Un 1.600% La Fiebre Por La Cerveza Artesana En España', *El Mundo*, 2016 <<https://www.elmundo.es/economia/2016/02/05/56aa63a4e2704ea0368b45d9.html>>.

² Alicia Alvidrez-Morales, Blanca Edelia González-Martínez, and Zacarias Jiménez-Salas, 'Tendencias En La Producción de Alimentos: Alimentos Funcionales', *Revista Salud Pública y Nutrición*, 3.3 (2002).

³ J. Gallardo-Rodríguez and others, 'Bioactives from Microalgal Dinoflagellates', *Biotechnology Advances*, 30.6 (2012), 1673–84 <<https://doi.org/10.1016/j.biotechadv.2012.07.005>>.

PRODUCTION OF EPA RICH POLAR LIPID CONCENTRATES FROM MICROALGAE *NANNOCHLOROPSIS* SP.

M. J. Jiménez¹, M. D. Macías², A. Robles¹, P. A. González¹, L. Esteban¹ and E. Molina¹

¹ *Department of Chemical Engineering, University of Almería, Spain;*

² *Department of Chemical Engineering and Food Technology, University of Cádiz, Spain
mjc866@ual.es*

There is wide scientific evidence on the health benefits of omega-3 polyunsaturated fatty acids (n-3 PUFAs), especially docosahexaenoic acid (DHA, 22:6n3) and eicosapentaenoic acid (EPA, 20:5n3). On the other hand, polar lipids (phospholipids, PLs, and glycolipids, GLs) are excellent emulsifying agents, which make them useful both in food products and in excipients of drugs and cosmetics. In addition, the bioavailability of n-3 PUFAs in the form of PLs is greater than that of ethyl esters and triacylglycerols (TAGs) ¹. As source of n-3 PUFAs, microalgae present the advantages of being able to be cultivated under controlled conditions, maintaining a constant biochemical composition and eliminating contaminants; they present greater photosynthetic efficiency, biomass productivity and growth velocity than most oleaginous crops; microalgal lipids have higher EPA or DHA concentrations than fish oils and higher antioxidant lipid contents (such as carotenoids) ².

This work deals with the development of an easy method for the simultaneous extraction and fractionation of saponifiable lipids (SLs), from the microalga *Nannochloropsis* sp., using low toxicity solvents, to produce eicosapentaenoic acid (EPA) concentrates in the form of polar lipids, either as glycolipids (GLs) or as phospholipids (PLs). A step-by-step extraction was developed. Firstly, and due to the selectivity of hexane toward NSLs observed in previous works ³, this solvent was used for remove in particular this lipid class from the biomass. At the optimal temperature (40 °C), the hexanic extract contained up to 89.0% of NSLs of the biomass. Next, an EPA and polar lipids enriched fraction was obtained from the biomass residue using ethanol (96%) as extraction solvent. A SL extract with 87.3% of polar lipids and up to 35.2% of EPA was obtained. In this extract the 87.1% of polar lipids were recovered, which contain the 75% of EPA of the original biomass. Therefore, the proposed method allows a simple and simultaneous extraction and fractionation of the NSLs and polar lipids of *Nannochloropsis* sp. and produces EPA enriched polar lipid fractions.

Acknowledgements. This research was supported by grants from the Ministerio de Economía, Industria y Competitividad (Spain), Project CTQ2017-85613-R. This project was co-funded by the FEDER (European Fund for Regional Development).

¹ P. Van Hoogevest, A. Wendel. *European Journal Lipid Science Technology*, **2014**, *116*, 1088–1107.

² R., Draaisma, R. Wijffels, P. Slegers, L. Brentner, A. Roy, M. Barbosa. *Current Opinion in Biotechnology*, **2013**, *24*, 169-177.

³ M.J. Jiménez, A. Robles, M.D. Macías, E. Hita, L. Esteban, P.A. González, E. Molina. *Bioresource Technology*, **2014**, *169*, 198-205.

MICROORGANISMOS CON POTENCIAL BIOTECNOLÓGICO PARA LA BIORREMEDIACIÓN DE COMPUESTOS FENÓLICOS

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

*Área de Microbiología, Dpto. Biología y Geología, CITE II-B, Universidad de Almería,
Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, CIAMBITAL
E04120, Almería, España; mjr956@ual.es*

Una de las agroindustrias más significativas en la cuenca Mediterránea, con especial incidencia en el sur de España, es la relativa a la producción de aceite de oliva. Entre los subproductos derivados de la extracción de este aceite, destaca el alpechín por su elevado contenido en compuestos fenólicos, que le confieren actividad fitotóxica y antimicrobiana. Durante décadas se ha omitido una gestión responsable de este residuo, siendo relegado exclusivamente a su mera disposición en balsas de evaporación. Como consecuencia, graves efectos medioambientales son notables en las áreas de influencia de dichos vertidos. En el actual contexto de las políticas de la Unión Europea, que tienden a la implantación de sistemas basados en una filosofía bioeconómica, urge el desarrollo de técnicas sostenibles para su tratamiento, entre las cuales destaca la biorremediación por su demostrada fiabilidad y rendimiento económico.

Con el fin de encontrar microorganismos con potencial para ser empleados como herramientas biotecnológicas en tareas de biorremediación de alpechín, se evaluó la capacidad degradadora de diferentes compuestos fenólicos a partir de una colección de 55 cepas previamente aisladas de este residuo. Los compuestos escogidos para la realización de este trabajo fueron seis de los ácidos fenólicos mayoritarios en el alpechín: ácido benzoico, ácido gálico, ácido p-hidroxibenzoico, ácido ferúlico, ácido p-cumárico y ácido vainílico. En primer lugar, se realizó un cribado comprobando la capacidad de toda la colección de microorganismos para tolerar e incluso utilizar para su crecimiento los compuestos ensayados como única fuente de carbono o, en su defecto, en procesos de co-metabolismo con una fuente adicional fácilmente asimilable (glucosa). De acuerdo con los resultados obtenidos, se seleccionaron las mejores cepas de cada grupo taxonómico (hongos y bacterias), para llevar a cabo un ensayo de cuantificación sobre la metabolización de los ácidos fenólicos que mostraron un comportamiento más restrictivo. Por último, las mejores cepas fueron secuenciadas para determinar su identidad a nivel de especie.

El estudio del metabolismo y co-metabolismo de las 55 cepas mostró una mayor capacidad, en general, de los hongos para tolerar y degradar compuestos fenólicos respecto a los resultados ofrecidos por las bacterias. No obstante, tanto un hongo (H4) como una bacteria (B19) fueron seleccionados para la siguiente fase de cuantificación debido a su capacidad para presentar un amplio espectro de actuación *in vitro* sobre los diferentes ácidos fenólicos estudiados. De estas cepas, el hongo H4 fue el que resultó ser más eficaz en la eliminación de los ácidos fenólicos más recalcitrantes (ácidos gálico y ferúlico). De hecho, los mejores resultados se consiguieron tras 120 horas de incubación en un medio suplementado con glucosa, llegándose a observar un porcentaje de degradación de más del 70%. Finalmente, la identificación molecular de las cepas B19 (*Klebsiella oxytoca*) y H4 (*Penicillium charlesii*), permitió corroborar su potencial biotecnológico para la biodegradación de compuestos fenólicos, especialmente patente en el caso del hongo (H4).

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

NUEVOS ANTIBIÓTICOS: LA PILA DE COMPOSTAJE COMO FUENTE DE PRODUCTORES DE SUSTANCIAS DE INTERÉS EN BIOMEDICINA

R. Lerma-Moliz, J. A. López-González, F. Suárez-Estrella, M. J. López, M. M. Jurado y J. Moreno.

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

El uso desmedido de antibióticos en las últimas décadas ha generado la aparición de importantes resistencias a estos compuestos, lo que supone un riesgo para la salud, la seguridad alimentaria y el desarrollo mundial. Por tanto, en este trabajo se llevó a cabo la búsqueda de nuevos compuestos antibióticos entre aislados del género *Bacillus* procedentes de un proceso de compostaje de residuos de tomate y astillas de pino.

Para ello, se estudió la producción de compuestos antimicrobianos de una colección de 160 cepas del género *Bacillus* aisladas sobre pilas de compostaje con dos patógenos humanos tipo, *Escherichia coli* (Gram negativo) y *Staphylococcus aureus* (Gram positivo). Las cepas que inhibieron a ambos patógenos y otras cuatro que presentaron un promedio de inhibición destacable para *S. aureus* se seleccionaron para obtener la Concentración Mínima Inhibitoria (CMI) de extractos acelulares y precisar así la capacidad de las sustancias antimicrobianas producidas de inhibir el crecimiento de los dos patógenos. Por último, se rastrearon cuatro antibióticos asociados al género *Bacillus* usando técnicas moleculares sobre las cepas seleccionadas (surfactinas, fengicinas, bacilisininas e iturinas).

Se obtuvieron 31 cepas inhibidoras del crecimiento en ambos patógenos, aunque el porcentaje de cepas que inhibieron a *S. aureus* fue mayor que las que inhibieron a *E. coli* (58,12% frente a 20,62%). Estos resultados fueron contrastados con los obtenidos en la CMI, ya que los valores para *E. coli* oscilaban entre 1:1 y 1:2 mientras que para *S. aureus* fueron destacablemente inferiores. Esto es debido a que los antibióticos producidos por el género *Bacillus* presentan un mayor efecto inhibitorio del crecimiento frente a especies Gram positivas. Los resultados del estudio molecular mostraron que cinco cepas del estudio produjeron, al menos, dos tamaños de amplicones óptimos asociados a la producción de sustancias antibióticas, y las cinco fueron productoras del antibiótico surfactina.

Agradecimientos. Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Economía y Competitividad a través de los proyectos AGL2009-08405 y AGL2012-36434.

REMOVAL AMMONIUM AMOUNT OF URBAN WASTEWATER FOR USING TO CULTURE *AMPHIDIINIUM CARTERAE*

**P. López-García, L. López-Rosales^{1,2}, A. Molina-Miras^{1,2}, M.C. Cerón-García^{1,2},
A. Sánchez-Mirón^{1,2} and F. García-Camacho^{1,2}**

¹Chemical Engineering Area, University of Almería, Almería04120 (Spain)

²Research Center in Agrifood Biotechnology (CIAMBITAL), University of Almería
paula.lg9.pl@gmail.com

Now a day, the majority of industrial and biotechnological processes tend to minimize the wastes and to recycle resources. In this aspect, the use of wastewater to grow microalgae is a very interesting strategy. Wastewater is a complex solution with a large number of compounds, which can be used as nutrients for microalgae moreover; some of them must be eliminated due to cause inhibitory effects. Nitrogen is an essential nutrient which limiting the growth in microalgae but not all forms and the concentrations of this compound are metabolizable. Dixon et al¹ showed that the use of ammonia as a nitrogen source has some inhibitory effects on the growth of the marine dinoflagellate *Amphidinium carterae*. Dinoflagellates are a special kind of microalgae producer of a lot variety of bioproducts with a high biotechnological importance.^{2,3} In previous experiments carried out in the Biotechnology research group of the University of Almería, it was used conventional culture media with an extra supplementation of ammonium ion (NH₄⁺) for growing *A. carterae*, the results revealed the need of a pretreatment of the wastewaters regarding to remove NH₄⁺ content before being used in a hypothetical culture.

Natural volcanic zeolites are known to be a good absorber of NH₄⁺^{4,5} and for this reason they were selected to pretreat the wastewater in order to formulate the different *A. carterae*'s culture media. Due to the irregular size of the commercial zeolites used, a homogenization treatment was carried out with a ball mill that allowed to obtain different zeolite fractions grouped by size through the use of a sieve. All the adsorption processes tested were described by the Langmuir model (homogeneous and monolayer adsorption). It was calculated the non-dimensional separation factor (R_L), which ranged between 0.4 and 0.04 (decreasing for increasing NH₄⁺), thus showing and confirming the favorable nature of the adsorption process between this particular natural zeolite and NH₄⁺ as the process is favorable for 0 < R_L < 1. The fine fraction (0.05-0.10 mm) was selected like the optimum size and the minimum time of adsorption was fixed in 8h. The adsorption treatment reduced the NH₄⁺ concentration of wastewater from 70 mg/L to 11.92 mg/L.

It has been found that *A. carterae* species tolerates up to 75% (8.94 mg/L of NH₄⁺) of wastewater from the secondary treatment previously treated with zeolites and with salinity adjusted without damage to its growth. A percentage of 50% (5.96 mg/L of NH₄⁺) of wastewater managed to exceed 40% the value of the cellular productivity of the control media (F/2 in seawater) without cell viability parameters damage such as the photosynthetic efficiency of the photosystem II (Fv/Fm). Therefore, the formulation of a culture media based on wastewater for the dinoflagellate *A. carterae* microalgae has been successfully achieved.

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

¹ Dixon GK, Syrett PJ. The growth of dinoflagellates in laboratory cultures. *New Phytol.* **1988**;109(3):297-302.

² Gallardo-Rodríguez J, Sánchez-Mirón A, García-Camacho F, López-Rosales L, Chisti Y, Molina-Grima E. Bioactives from microalgal dinoflagellates. *Biotechnol Adv.* **2012**;30(6):1673-1684

³ Assunção J, Guedes AC, Malcata FX. Biotechnological and Pharmacological Applications of Biotoxins and Other Bioactive Molecules from Dinoflagellates. *Mar Drugs.* **2017**;15(12):393

⁴ Wen D, Ho Y-S, Tang X. Comparative sorption kinetic studies of ammonium onto zeolite. *J Hazard Mater.* **2006**;133(1-3):252-256

⁵ Huang H, Xiao X, Yan B, Yang L. Ammonium removal from aqueous solutions by using natural Chinese (Chende) zeolite as adsorbent. *J Hazard Mater.* **2010**;175(1-3):247-252

RESISTENCIA ANTIBIÓTICA ASOCIADA AL GRUPO DE COLIFORMES FECALES AISLADOS EN COMPOST INDUSTRIALES

J. A. López-González, I. Fernández-Luque, F. Suárez-Estrella, M. J. López, M. M. Jurado y J. Moreno

Área de Microbiología, Dpto. Biología y Geología, CITE II-B, Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, CIAMBITAL E04120, Almería, España; lgj132@ual.es

Los coliformes fecales son un grupo de bacterias Gram-negativas pertenecientes a la familia *Enterobacteriaceae* que se caracterizan por ser indicadoras de contaminación fecal. El principal hábitat natural de estos microorganismos es el tracto gastrointestinal de animales y humanos. La presencia de un nivel de coliformes fecales superior al permitido en muestras de compost obtenidas de plantas de compostaje puede indicar la ineficiencia del proceso en cuanto a su higienización o la contaminación externa de las pilas de compostaje durante el proceso o una vez finalizado el mismo.

Este trabajo estuvo enfocado en la determinación de los niveles de coliformes fecales en 15 muestras de compost de plantas de compostaje industrial diferentes procedentes de cinco tipos distintos de materias primas que se correspondieron con residuos vegetales, residuos sólidos urbanos, lodos, residuos agroalimentarios y alpeorujo. El posterior aislamiento de los resultados positivos permitió la creación de un cepario de coliformes fecales, el cual fue sometido a pruebas de antibiograma, empleando 8 antibióticos diferentes con el fin de realizar una caracterización de la resistencia antibiótica de cada una de ellas. Los antibióticos empleados pertenecían a la familia de los beta-lactámicos, quinolonas, aminoglucósidos y macrólidos.

Todos los compost analizados presentaron niveles significativos de coliformes fecales, pero tan solo uno presentó unos recuentos inadmisibles por la legislación actual. Además, se pudo detectar que, tras la higienización del proceso, existe una recontaminación de origen fecal de los compost industriales, como consecuencia de la acción de la fauna colindante. Adicionalmente, se obtuvieron un total de 55 cepas aisladas de las cuales 32 de ellas se correspondían con cepas de *Escherichia coli*. Finalmente, se pudo determinar que fueron el doripenem y la ciprofloxacina los antibióticos que generaron un mayor efecto de inhibición en el crecimiento bacteriano, detectándose además cepas resistentes a varios de los antibióticos comúnmente empleados para tratar infecciones de estos patógenos.

Agradecimientos. Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Economía y Competitividad a través del proyecto ALG2015-64512-R.

ISOLATING BIOACTIVE COMPOUNDS FROM *AMPHIDIINIUM CARTERAE* BY SOLVENT SEQUENTIAL GRADIENT PARTITION

**M. López-Rodríguez¹, A. Molina-Miras¹, M. C. Cerón-García¹, L. López-Rosales¹,
A. Abreu², I. Fernández², A. Sánchez-Mirón¹, F. García-Camacho¹,
E. Molina-Grima¹**

¹*Department of Chemical Engineering, Research Centre CIAIMBITAL*

²*Department of Chemistry and Physics, Research Centre CIAIMBITAL
Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain); mlr908@ual.es*

Bioactive molecules from marine dinoflagellate microalgae are getting intense attention because of their potential use in cosmetics, biomedical and pharmacological industry, specially, in drugs development. Some extraction and isolation strategies, which encompass a multi-step process using different analytical techniques, reached high recovery yields of bioactives from dinoflagellates¹. This work present a method based in a sequential gradient liquid-liquid extraction (LLE) with different MeOH:H₂O mixtures (10-100%) and different organic solvent (hexane, Cl₄C, CH₂Cl₂, n-BuOH)² by integral use of *Amphidinium carterae* biomass. This methodology obtained different fractions rich in unsaponifiable fatty acids (carotenoids), saponifiable fatty acids, amphidinols, sugars, amino acids according to their polarity. Briefly, the process consisted in a double extraction with acetone and subsequently fractionation of the resulting extract by sequential gradient liquid-liquid extraction (LLE) mentioned previously. Carotenoids and fatty acids were determined using a photodiode-array HPLC and gas chromatography-FID respectively. Amphidinols and other minor compounds were determined by nuclear magnetic resonance (NMR)³. The extract fractionation was done in single contact and four single contact repeated L-L extraction aimed to compare both strategies and maximize the compounds recovery yields. With the proposed process an 87.14% of carotenoids were recovered. It supposed a 27.99% higher than that achieved using one extraction. Carotenoids were mainly found in Cl₄C fraction (60.24% of the total). The predominant carotenoid, peridinin, reached an 80.78% of the total. A 97.66% of fatty acids were recovered, a 5.61% higher than when it was used one extraction. Hexane fraction contained 70.48% of the total. EPA and DHA reached percentages of a 66.67% and 84.94% respectively. The n-BuOH fraction contained amphidinols (100%) and compound like amino acids, sugars, organic acids and others were recovered principally in water fraction. The high cost and time consuming process necessary to link and optimize different bioactive extraction methods, designed originally to extract and recover them individually, make of this work a quick, selective isolation and separation method where was achieved high percentages of bioactive, in only one bioprocess and it is considered as a valid method for the integral use of *A. carterae* biomass.

Acknowledgements. This research was founded by the Spanish Ministry of Economy and Competitiveness (grants RTC-2016-5239-2, RTC-2017-6405-1, CTQ2017- 84334-R, and CTQ2014-55888-C3-02) and the European Regional Development Fund Program.

¹ M. López, M.C Cerón, L. López, C.V González, A. Molina, A. Ramírez, A. Sánchez, F. García, E. Molina, *Bioresource technology*, **2019**, 282,370-377

² R. Riguera, *Journal of Marine Biotechnology*, **1997**, 5,187-193.

³ A. Abreu, A. Molina, L.M. Aguilera, L. López, M.C Cerón, A. Sánchez, L. Olmo, A. Carrasco, F. García, E. Molina, I. Fernández, *Journal of agricultural and food chemistry*, **2019**, 67,9667-9682.

EFFECT OF LIPIDIC STRUCTURATION OF AURANTIOCHYTRIUM LIMACINUM SR21 OIL ON IN-VITRO PERMEABILITY THROUGH A BIOLOGICAL MEMBRANE

**J. M. Delgado¹, A. C. Velásquez¹, M. J. Jiménez², O. Florez¹, M. Peñuela¹ and
A. Robles²**

¹ Grupo Bioprocesos, Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, University of Antioquia, Medellín, Colombia.

² Center for Research in Mediterranean Intensive Agrosystems and Agri-Food Biotechnology (CIAMBITAL). Department of Chemical Engineering, University of Almería, Almería, Spain.
martin.delgado@udea.edu.co

Structured triglycerides (STAGs) are triglycerides that are modified for changing their structure by the modification of the fatty acid (FA) composition and/or their positional distribution in the glycerol backbone to obtain specific nutritional and/or physicochemical properties. Enzymatic interesterification reactions, like acidolysis, use *sn*-1,3 specific lipases to generate STAGs in which the new FAs are placed in the *sn*-1,3 positions of the TAGs. Caprylic acid (CA) is commonly used to replace FAs with low nutritional value, like palmitic acid (PA), in the *sn*-1,3 positions. The aim of this work was to obtain STAGs rich in DHA at *sn*-2 position and CA at *sn*-1,3 positions from *A. limacinum* SR21 oil and to evaluate its permeability by mean of an in-vitro test, using pork intestinal membrane assembled in a Franz cell. To do so, it was development a lipidic structuration process based on acidolysis reactions between CA and *A. limacinum* SR21 oil. Intensity of treatment (IOT, lipase amount \times reaction time/TAG amount; range: 1,8-10 g \times h/g) and reaction temperature (range: 37-56°C) on reactions catalyzed by Lipozyme TL-IM were studied by mean of a central composite design with response surface. Under optimal conditions, STAGs with 21.7 mol% PA, 25.7 mol% DHA and 40.8 mol% CA, were obtained. 59.2 mol% of total DHA was located at the *sn*-2 position, meanwhile 91.2 mol% of total CA was located at *sn*-1,3 positions. Later, a volume of this lipidic extract was used to perform a permeability through pork intestinal membrane (jejunum) assembled in Franz cell. Briefly, the sample (100 mg STAG, mainly 21.7 mol% PA 25.7 mol% DHA and 40.8 mol% CA) was mixed with pancreatic lipase, pancreatin, bile salts, and lecithin in trizma-maleate buffer pH 7.5 in a thermostatically controlled vessel (37°C) under continuous stirring. STAG showed a decrease in concentration in the donor cell over time, this indicates that there is an absorption of DHA with an apparent permeability value of 0.251 mg DHA/cm² \times h vs 0.156 0.251 mg DHA / cm² \times h in the control sample. The viability of the membrane was also determined, enterocytes in contact with structured lipid extract showed higher cells death after 4 hours in compare with control sample. Nevertheless, the viability of enterocytes was greater to 50% during the hole test, indicating metabolic activity in the membrane for cell transport activities. These results suggest that lipid structuring facilitates the transport of DHA through the epithelial cell layer in the small intestine and therefore, the absorption of this essential nutrient is increased.¹

Acknowledgements. This research was funded by a grant from “Departamento de Ciencia, Tecnología e Innovación-COLCIENCIAS, Project CT021-2017. We also thank to “Supercerdo S.A.S” company who kindly donated the pork intestine used in this project.

¹ a) Esteban, L., Jiménez, M.J., Hita, E., González, P.A., Martín, L., Robles, A., 2011. Production of structured triacylglycerols rich in palmitic acid at *sn*-2 position and oleic acid at *sn*-1,3 positions as human milk fat substitutes by enzymatic acidolysis. *Biochem. Eng. J.* 54, 62–69. b) Jung, E. Y., Hong, K. B., Son, H. S., Suh, H. J., & Park, Y. (2016). Effect of layer-by-layer (lbl) encapsulation of nano-emulsified fish oil on their digestibility ex vivo and skin permeability in vitro. *Preventive nutrition and food science*, 21(2), 85.

EFFECT OF AN ENZYME PRETREATMENT ON SOME ANTINUTRITIONAL FACTORS PRESENT IN PLANT INGREDIENTS POTENTIALLY USED IN AQUACULTURE FEEDS

F. P. Martínez, L. Bermúdez, M. J. Aznar and F. J. Moyano

*Department of Biology and Geology, Faculty of Experimental Sciences,
Universidad de Almería,
E04120 Almería (Spain); paqui_78@hotmail.es*

The Mugilidae (mullet) are a group of fish showing an increasing interest for aquaculture due to their rapid growth, resistance to environmental variations and omnivorous profile. Linked to this latter, the selection of feed ingredients for these species is focused on the use of a high amount of plant by-products. This presents important advantages, like the diversity of offer and high availability as well as positive environmental and economical features. Nevertheless, from a nutritional point of view, such ingredients also present limitations linked both to their amino acid imbalances as well as to the presence of a wide variety of antinutritional compounds like alkaloids, lectins, digestive enzyme inhibitors, indigestible carbohydrates (mainly non-starch polysaccharides; NSPs) and phytate. Different physical, chemical or biochemical treatments have been developed to counteract these potential negative effects, being the addition of enzymatic mixtures only very recently evaluated. In the present work we present some results obtained within a project aimed to reduce the presence of NSPs, protease inhibitors and phytate in feeds for the grey mullet, *Mugil cephalus*, formulated with a very high contents of plant ingredients (>70% in weight, including beer bagasse and rice bran). A pre-treatment of such ingredients with a mixture of enzymes (phytase + glucanases) under controlled conditions was carried out prior to the elaboration of the feed pellets. Results showed that the enzymatic treatment significantly modified the potential bioavailability of some nutrients such as reducing sugars, pentoses and phytic phosphorus, while had no effect on the levels of protease inhibitors. This net positive effect on the availability of nutrients was confirmed by the significant improvement in some zootechnical indicators, like the efficiency of feed use (Food Conversion Ratio) and growth (Specific Growth Rate), obtained in an assay carried out using fish juveniles (average weight 12 g) which were fed during 6 weeks on the feed, treated or not with the enzymes.

Table 1. Resume of zootechnical indicators obtained in the nutritional assay performed on mullet juveniles

<i>Parameter</i>	<i>Control diet</i>	<i>Enzyme treated diet</i>
Initial weight (g/fish)	11.89 ± 0.55 ^a	12.38 ± 0.16 ^a
Final weight (g/fish)	13.21 ± 0.49 ^a	15.36 ± 0.04 ^b
Increase (g/fish)	1.33 ± 0.28 ^a	2.98 ± 0.15 ^b
Feed consumption (g/fish)	8.65 ± 0.45 ^a	9.23 ± 0.17 ^b
FCR (g feed/g fish)	5.89 ± 1.48 ^a	3.11 ± 0.19 ^b
SGR (g/100 g fish/day)	0.25 ± 0.05 ^a	0.50 ± 0.03 ^b

The results obtained suggest the utility of the enzyme treatment of ingredients, at least in the case of diets for *M. cephalus*, and oriented the future development of commercial feeds based on vegetable by-products for this species.

Acknowledgements. The present work was funded by CEIMAR (II Call for Projects of Bussines Innovation) and by Pesquerías Isla Mayor S.L. (PIMSL)

CARACTERIZACIÓN FILOGENÉTICA Y METABÓLICA DE LA MICROBIOTA DE LOS SEDIMENTOS DE BALSAS DE EVAPORACIÓN DE ALPECHÍN

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

*Área de Microbiología, Dpto. Biología y Geología, CITE II-B, Universidad de Almería,
Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, CIAMBITAL
E04120, Almería, España mmg113@ual.es*

El método más empleado para la disposición del alpechín, residuo líquido de la extracción del aceite de oliva, ha sido su acúmulo en balsas de evaporación. Actualmente muchas de estas balsas no están en uso, debido a que el método de extracción de aceite más extendido, la centrifugación a dos fases, no genera alpechín. Sin embargo, el efecto contaminante del alpechín, derivado de su alto contenido en compuestos fenólicos, persiste en las balsas abandonadas, puesto que la mayoría de ellas no presentan una impermeabilización adecuada o están mal dimensionadas, de modo que contaminan suelos y acuíferos.

El objetivo de este trabajo fue determinar el estado inicial y el potencial de la microbiota residente en los sedimentos de balsas de evaporación de alpechín para favorecer el posterior diseño de tratamientos de biorremediación.

El área de estudio estuvo constituida por 7 balsas de sedimentos de alpechín ubicadas en el municipio de Mora (Toledo) en las que se tomaron muestras representativas de cada balsa. Los parámetros analizados en estas muestras fueron la diversidad taxonómica, mediante análisis metagenómico; y la actividad metabólica microbiana, mediante el uso de microplacas Biolog® EcoPlate™. Estos parámetros ofrecen información sobre la diversidad de especies microbianas presentes en los sedimentos de alpechín y su perfil fisiológico a nivel de comunidad.

La biodiversidad bacteriana fue bastante más elevada que la de hongos, con índices de Simpson corregido (1-D) cercanos a 1 (media de 0,9) en bacterias y en torno a 0,4 en hongos. Entre los géneros bacterianos detectados destacaron por su elevada proporción: *Halomonas*, *Alkalibacterium*, *Nocardiopsis* y *Paracoccus*; y entre los fúngicos: *Fusarium*, *Aspergillus*, *Scopulariopsis*, *Tritirachium*, *Scedosporium* y *Microascus*. En general, la biodiversidad funcional fue moderadamente elevada, con un valor medio del índice de biodiversidad funcional de Shannon (H) de 2,5. Las funcionalidades mayoritarias estuvieron relacionadas con la metabolización de ácidos carboxílicos, carbohidratos y polímeros, y se presentó una notable presencia de actividades degradativas de compuestos fenólicos. Estos resultados indican la presencia de un importante potencial metabólico en los sedimentos de las balsas de evaporación de alpechín, no afectada considerablemente por las condiciones imperantes, y que se puede estimular mediante su adecuado manejo.

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

COMPARATION OF CULTURE MEDIA USING WASTEWATER FOR THE PRODUCTION OF MACC-1

A. Morillas, C. V. González-López, P. Zatta, M. Ciardi, C. Gómez, F. G. Acién.

*Department of Chemical Engineering, University of Almería, 04120, Almería, Spain;
morillas.aino@gmail.com*

The use of microalgae for wastewater treatment was proposed for the first time more than 50 years ago. Nevertheless, up to the last decade microalgae have been grown with either seawater or tap water. During the last years the focus has changed towards the use of wastewater and the biorefinery concept trying to make the process more sustainable. Previous studies shown that wastewater treated with microalgae-bacteria consortia reduced its content in total nitrogen and phosphorus. In this work, we have studied the growth of the microalga MACC-1 in wastewater at laboratory scale and its capacity to remove nitrogen and phosphorus. This strain has been selected because of its potential act as a biostimulant for agriculture applications. The biomass productivity of the microalga has been studied using different treatments:

1. Wastewater effluent from secondary treatment provided by “El Toyo” municipal water treatment plant (SWW).
2. Secondary wastewater effluent from “El Toyo” with the addition of 10% of centrate (SWW+C).
3. Wastewater effluent from secondary treatment obtained after harvesting the culture of a raceway reactor that is feed with primary wastewater (SWW-RW).
4. ARNON culture medium as control.

The main objectives were to obtain the maximum biomass productivity and to evaluate the purification capacity of the different treatments.

The results show that it is possible to achieve similar productivities when using SWW or SWW-RW (0.23 and $0.26 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{day}^{-1}$, respectively), demonstrating that both effluents are similar in nutrients composition. On the other hand, a higher productivity was obtained using ARNON and when supplementing the SWW with centrate (0.38 and $0.34 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{day}^{-1}$, respectively). This fact shows the importance of performing this supplementation in order to simulate the nutrients composition of the control culture medium and avoid a limitation in growth because of the lack of nutrients.

Regarding the depuration capacity of the different treatments we attained a depuration of $27,5 \text{ mg/L}$ for N (nitrogen) and $24,5 \text{ mg/L}$ for P (phosphorous) initial content, respectively, in the test with ARNON (treatment control). When using SWW+C we achieved a higher N depuration of $35,6 \text{ mg/L}$ although a lower P depuration of $1,9 \text{ mg/L}$ was shown. When using SWW we achieved similar values to those of ARNON, showing a depuration of $20,5 \text{ mg/L}$ of N and $2,5 \text{ mg/L}$ of P initial content. Accordingly, when using SWW-RW we obtained a depuration of 21 mg/L of N and $1,3$ of P.

Acknowledgements. This study was funded by the Ministry of Science, Innovation and Universities through the program “Programa Estatal de I+D+i Orientada a los Retos de la Sociedad” 2018 (project code AL4BIO) along with the European Union's Horizon 2020 Research and Innovation Program under Grant Agreement No. 727874 SABANA. We acknowledge the Junta de Andalucía IFAPA Almería station for their practical assistance as well as the Chemical Engineering Department of the University of Almería.

EVALUACIÓN DE LA RADIACIÓN UV-C PARA MANTENER LA CALIDAD POSTCOSECHA Y COMO MÉTODO ACUMULADOR DE ANTIOXIDANTES EN FRUTOS DE TOMATE IV-GAMA

C. Nájera, V. M. Gallegos-Cedillo, J. Gallegos-Cedillo and M. Urrestarazu

*Departamento de Producción Vegetal, Facultad de Ciencias Experimentales,
Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
cinthia_nv4@hotmail.com*

En la actualidad, el interés que se ha promovido sobre los antioxidantes en la salud humana ha propagado la investigación en el campo de la horticultura y la ciencia de los alimentos, sobre todo con el tomate, conocido por sus cualidades nutricionales. Los productos IV Gama, consisten en frutas o verduras cortadas, desinfectadas y envasadas que en los últimos años se ha convertido en una manera de comercializar para facilitar el tiempo a los consumidores. El tomate, es una hortaliza difícil de darle el formato mínimamente procesado por sus características físicas, debilidad de la placenta y gran cantidad de agua que derrama cuando se realiza el corte, lo que puede desarrollar bacterias en la vida de anaquel o almacenamiento. Se ha estudiado que la irradiación UV-C conserva la calidad de almacenamiento y retrasa el desarrollo del color rojo. El objetivo del trabajo es evaluar el comportamiento de los frutos de tomate mínimamente procesado mediante la desinfección a través de radiaciones UV-C. Se empleó un sistema continuo de radiación UV-C equipado con lámparas de longitud de onda 254 nm, se aplicó un baño de radiación a dos dosis de radiación 2 y 4 kJ m⁻² frente a un testigo (0 kJ m⁻²). Se midió la cantidad de antioxidantes utilizando el método DPPH y espectrofotómetro modelo EF009. Se determinaron los parámetros fisicoquímicos: color, pérdida de peso, firmeza, análisis sensorial y la evolución de la atmósfera en el interior del envase. La dosis 2 kJ m⁻² obtuvo los mejores resultados en el contenido de antioxidantes, así como también es la dosis que a través del tiempo fue la que perdió menos peso y mantuvo el O₂ en la atmosfera del envase.

A CASE OF COMBUSTION OPTIMIZATION OF BIOMASS FROM CROP RESIDUES IN BOILERS

**J. V. Reinoso-Moreno¹, M. G. Pinna-Hernández², J. A. Sánchez-Molina³,
M. D. Fernández-Fernández⁴, J. C. López-Hernández⁵, F. G. Acién-Fernández⁶**

¹*Department of Chemical Engineering, Faculty of Experimental Sciences, Universidad de Almería, E04120 La Cañada de San Urbano, Almería (Spain); rmj519@ual.es*

²*Solar Energy Research Centre (CIESOL), Joint Centre University of Almería-CIEMAT, E04120 La Cañada de San Urbano, Almería (Spain);*

³*Department of Informatics, Faculty of Engineering, Universidad de Almería, E04120 La Cañada de San Urbano, Almería (Spain);*

⁴*Las Palmerillas Experimental Station, Cajamar Caja Rural Foundation, E04710 Santa María del Águila, Almería (Spain),*

⁵*Las Palmerillas Experimental Station, Cajamar Caja Rural Foundation, Paraje de Las Palmerillas, 25, E04710 Santa María del Águila, Almería (Spain)*

⁶*Department of Chemical Engineering, Faculty of Experimental Sciences, Universidad de Almería, E04120 La Cañada de San Urbano, Almería (Spain)
rmj519@ual.es*

An alternative for revalorizing the areal part of fruit vegetable plants once their growing is finished is to employ them as solid fuel¹. Additionally, the CO₂ generated could be captured and used for enrichment, for example in greenhouses. It would be required to optimize the different and relevant combustion parameters involved for this capture. In other previous work, this point was tackled studying different commercial biomass cases along tomato crop residues².

In this work, a similar optimization has been performed but for a blend of these tomato crop biomass with almond pruning (75%- 25%). The variables employed to assess the combustion performance were with respect to flue gasses 1) temperature, and 2) CO₂ 3) CO, 4) NO_x and 5) SO₂ concentrations. Additionally, 6) the thermal efficiency was estimated from the temperature and the CO₂ concentration measurements).

Comparing the performance obtained with the optimal configurations for 100% tomato crop residues and the blend (75%- 25%). The flue gas temperature decreased, and the thermal efficiency and CO₂ concentration were higher. The correspondent values varied from 211.7°C, 48.5% and 1.98% to 2.2°C, 39.2% and 2.20% respectively. At the same time, the CO and NO_x levels were lower, and the SO₂ one decreased. The correspondent values varied from 18.8, 0.710 and 7.97 mg/ Nm³ to 11.7, 0.906 and 1.13 g/ Nm³ respectively (concentration values recalculated considering 0% O₂, Nm³: m³ at normal conditions). At the same time, these levels were also in accordance with regional legislation. Another observation made in this work, is the importance of using a proper adjustment of the combustion device to be employed.

Acknowledgements. The “Las Palmerillas” Research Station of the Cajamar Caja Rural Foundation for its contributions. At the same time, this work is part of the research Project “Carbon4Green”, UAL18- TEP- A055- B, comprehended within the frame of the Operative Program FEDER Andalucía 2014- 2020 of the Economy, Knowledge and Companies Office of Junta de Andalucía (Regional Government).

¹ J. V. Reinoso Moreno, M. G. Pinna-Hernández, M. D. Fernández Fernández, J. A. Sánchez Molina, J. C. López Hernández, F. G. Acién Fernández, Ind. Crops Prod. **2019**. 137, 662–671

² J. V. Reinoso Moreno, M. G. Pinna-Hernández, J. A. Sánchez Molina, M. D. Fernández Fernández, J. C. López Hernández, F. G. Acién Fernández, **2018**. In: 1^{er} Congreso Jóvenes Investigadores en Ciencias Hortícolas. CIAIMBITAL, Almería (12/20/2019)

INCIDENCIA DE PORTADORES FARÍNGEOS DE ESTREPTOCOCOS ALFA Y BETA-HEMOLÍTICOS EN UNA POBLACIÓN DE ESTUDIANTES DE LA UNIVERSIDAD DE ALMERÍA Y LA RELACIÓN CON POSIBLES DESÓRDENES EN LOS NIVELES DE IGA SECRETORA Y OTROS FACTORES POBLACIONALES

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

*Dpto. Biología y Geología, Área de Microbiología, Facultad de Ciencias Experimentales, Ceia3, Ciambiental, Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
asaborido16@gmail.com*

La deficiencia de IgA se define como la ausencia o disminución de la concentración de IgA sérica por debajo de 5 mg/dL, con niveles séricos normales o aumentados del resto de inmunoglobulinas. Es la inmunodeficiencia más frecuente de todas, siendo su frecuencia de 1 por cada 1000 personas. Normalmente, la deficiencia de IgA es un trastorno asintomático, pero los individuos afectados a veces pueden presentar predisposición a la infección respiratoria¹.

Las enfermedades infecciosas bacterianas que afectan al tracto respiratorio son causadas con frecuencia por diversas especies del género *Streptococcus*². La patogenicidad de este grupo microbiano radica, en parte, en su capacidad para producir hemolisis de tipo alfa (parcial) o beta (completa), así como en la posibilidad de desarrollar resistencias frente a antibióticos betalactámicos³. El objetivo principal de este trabajo fue detectar la presencia de portadores sanos asintomáticos de cepas de estreptococos alfa y betahemolíticos, a partir de muestras orofaríngeas de una población de alumnos de la Universidad de Almería, así como su relación con los niveles de IgA en saliva y otros factores endógenos. Adicionalmente, a partir de la colección de cepas, se evaluó el grado de sensibilidad/resistencia frente a antibióticos betalactámicos.

Para establecer la relación entre distintos factores de interés epidemiológico se analizó la concentración de IgA en muestras de saliva de una población de estudiantes de la Universidad de Almería y se entrevistaron los individuos de la población, en relación con la frecuencia de padecer faringitis, u otras afecciones respiratorias de carácter leve o grave. Por otro lado, la mayor o menos sensibilidad a betalactámicos fue evaluada mediante la realización de antibiogramas.

A partir de los resultados obtenidos, se detectó un 60,6% de portadores de estreptococos alfa hemolíticos y un 14,1% de portadores de estreptococos beta hemolíticos. La colección de cepas aisladas a partir de la población de estudio resultó ser muy diversa en cuanto a la sensibilidad mostrada frente a un amplio espectro de antibióticos betalactámicos. Se encontró, además, una relación significativa entre la concentración de IgA y la condición de ser portador o no de estreptococos beta hemolíticos a nivel faríngeo, así como con la frecuencia de padecer faringitis y otras enfermedades respiratorias de carácter leve.

¹ M. Tortajada y R. Fernández-Delgado, *Revista Española de Pediatría Clínica e Investigación*, **2004**, 60, 339-347.

² O. Abdullahi, J. Nyiro, P. Lewa, M. Slack y A. Scott, *The Pediatric Infectious Disease Journal*, **2008**, 27(1), 59-64.

³ W. Albrich, D. Monnet y S. Harbarth, *Emerging Infectious Diseases*, **2004**, 10, 514-517.

ASSESSMENT AND MODELING OF MICROALGAE PHOTOSYNTHESIS CONSIDERING THE EFFECTS OF NITROGEN CONCENTRATION

A. Sánchez-Zurano, A. Morillas, G. Gamarra, J. M. Fernández-Sevilla, E. Molina-Grima

*Department of Chemical Engineering, Faculty of Experimental Sciences,
Universidad de Almería,
E04120 Almería (Spain); asz563@ual.es*

The main factor which determining microalgal photosynthetic performance is the solar irradiance. However, the microalgal activity can be affected by several factors as environmental parameters (temperature, pH or dissolved oxygen), operational conditions and nutrients concentrations. Nitrogen is an important nutrient to take in mind in order to produce microalgal biomass. It can have great influence on microalgal activity, which is dependent upon the amount, the availability and the type of the nitrogen source¹. Depending on the type of medium used for microalgae growth (fertilizers, primary domestic water, pig manure, etc), the nitrogen will be under or over-its optimal concentration. Determining and developing biological models which take account both the effect of environmental parameters and the effect of nutrients dissolved in the medium on microalgal photosynthesis is mandatory.

Once the effect of irradiance, temperature, pH and dissolved oxygen on microalgae activity has been calculated and evaluated. In this work, an improved model which incorporate the effect of nitrogen concentration on *Scenedesmus almeriensis* photosynthesis activity has been developed. For this purpose, to determine the net photosynthesis activity of *Scenedesmus almeriensis* at different nitrogen concentration, respirometric techniques have been used. Also, the yield coefficients of the *S. almeriensis* at different nitrogen concentrations have been determined too. Finally, the nitrogen model for microalgae culture has been introduced to the biological model, which include environmental parameters, in order to simulate the productivity of a raceway reactor with *S. almeriensis*. These biological models developed have led to compare the teorical productivity in a raceway reactor and the real productivity evaluated daily^{2,3}.

Acknowledgements. This research was funded by the SABANA project (grant # 727874) of the European Union's Horizon 2020 Research and Innovation Programme, the Marine Microalgal Biotechnology group (BIO 173) in the Chemical Engineering Department, University of Almeria, Spain, the PURASOL project(CTQ2017-84006-C3-3-R, Ministry of Economy and Industri, Govt. of Spain), Fundación Cajamar and the Spanish Ministry of Education through the National FPU Programme (grant number FPU16/05996).

¹ Li X, Li W, Zhai J, Wei H, Wang Q. (2019). Effect of ammonium nitrogen on microalgal growth, biochemical composition and photosynthetic performance in mixotrophic cultivation. *Biosource technology*, 273:368-376. DOI: 10.1016/j.biortech.2018.11.042.

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

³ Zambrano, J., Krustok, I., Nehrenheim, E., & Carlsson, B. (2016). A simple model for algae-bacteria interaction in photo-bioreactors. *Algal Research*, 19, 155-161. <https://doi.org/10.1016/j.algal.2016.07.022>

BIODEGRADABILIDAD Y HUMIFICACIÓN COMO INDICADORES EN EL PROCESO DE COMPOSTAJE INDUSTRIAL DEL ALPEORUJO

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

*Área de Microbiología, Dpto. Biología y Geología, CITE II-B, Universidad de Almería,
Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, CIAMBITAL, 4120, Almería,
asc426@ual.es*

El alpeorajo es un residuo generado durante el proceso de extracción del aceite de oliva, que es considerado altamente contaminante y presenta inconvenientes para su adecuada gestión debido, entre otros, a su elevada concentración en compuestos fenólicos, que lo convierten en un material recalcitrante, fitotóxico y antimicrobiano¹. Actualmente, una de las principales tecnologías aplicadas para su recuperación es el compostaje. Para realizar un seguimiento del proceso de compostaje y evaluar la calidad del compost final se emplean diversos parámetros, entre los que destacan la medida de la estabilidad biológica y del grado de humificación, ambos relacionados con el grado de descomposición de la materia orgánica por la acción de los microorganismos.

El objetivo de este trabajo fue la determinación del grado de estabilidad y madurez del compost producido a partir de alpeorajo en plantas de compostaje industrial mediante el seguimiento de ambos parámetros durante todo el proceso de compostaje.

Para la realización de este trabajo se emplearon muestras procedentes de tres plantas de compostaje industrial destinadas a la gestión de los residuos generados durante la extracción del aceite de oliva. Se realizaron seis muestreos en las fases críticas del proceso de compostaje: materia prima, mesófila, termófila, enfriamiento, maduración y producto final. El grado de estabilidad se evaluó mediante respirometría según el método descrito por Ponsá². La humificación se determinó mediante el cálculo del grado de humificación en base a la proporción de ácidos húmicos respecto al carbono extraíble total, según el método descrito por Ciavatta³.

Los valores de los índices respirométricos, en las plantas estudiadas, fueron disminuyendo hacia la etapa final del proceso de compostaje, lo que indica que la máxima actividad biológica ocurre al inicio del proceso. En cuanto a la humificación se observó una tendencia creciente hacia el final del proceso de compostaje, alcanzando el valor máximo en la fase de maduración del proceso.

Los resultados obtenidos en este trabajo muestran que el seguimiento del proceso de compostaje de alpeorajo mediante la determinación de las fracciones húmicas y de los índices respirométricos, sirven como indicadores para evaluar el correcto desarrollo del proceso y la calidad del compost final en el proceso industrial.

Agradecimientos. Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Economía y Competitividad mediante el proyecto AGL2015-64512-R.

¹ J. Sierra, E. Martí, G. Montserrat, R. Cruañas, M. Garau, Aprovechamiento del alpechín a través del suelo. Estimación del posible impacto sobre las aguas de infiltración. *Edafología*. **2010**,7 (2), 91-102.

² S. Ponsá, T. Gea, A. Sánchez, Different indices to express biodegradability in organic solid wastes. *J. Environ. Qual.* **2010**, 39, 706–712

³ C. Ciavatta, M. Govi, L. V. Antisari, P. Sequi, Characterization of humified compounds by extraction and fractionation on solid polyvinylpyrrolidone. *J. Chromatogr.* **509**, 141–146.

ANTIBIOFOULING SURFACES CHARACTERIZATION AND METHOD VALIDATION ALLOWING A RAPID SELECTION OF THE MOST SUITABLE SURFACE TO BUILT EFFICIENT CLOSED-PBRs

Y. Soriano-Jerez, O. Zeriouh³, L. López-Rosales^{1,2}, M. C. Cerón-García^{1,2}, F. García-Camacho^{1,2}, C. Bressy³ and E. Molina-Grima^{1,2}

¹Chemical Engineering Department, University of Almería, Almería 04120 (Spain)

²Research Center in Agrifood Biotechnology (CIAMBITAL) University of Almería

³MAPIEM Laboratory, University of Toulon, Toulon, France

ysj372@inlumine.ual.es

Microalgae are a very diverse group of photosynthetic micro-organisms used in the production of a wide variety of products and services. The economic feasibility of a microalgae-based process requires, amongst other factors, an efficient, long-lasting culture system. In current ready-to-use fully-closed photobioreactors (PBRs) biofouling has become an important obstacle. Biofouling consists of the cells adhesion on the surface of the photobioreactor (PBR) and, when it appears, the possibilities of eliminating it are practically nil. This phenomenon decreases the penetration of solar radiation into closed PBRs, and negatively affects the culture quality, production and process cost¹. In previous research, fouling release coatings (FRCs) based on a hydrogel silicone approach showed excellent antibiofouling properties in the culture of the microalga *Nannochloropsis gaditana*². Although they are excellent candidates for coatings, they were opaque, and therefore, unsuitable for the manufacture of closed PBRs.

The objective of this work was to assess antibiofouling properties of six new non-toxic transparent FRCs prepared *via* hydrogel technology. Protein adsorption capacity and cell adhesion intensity to these FRCs were also investigated. Their initial water contact angle, measured by the sessile drop method, ranged from 104° to 117°, and their low surface free energy (media value of 22 mJm⁻²) are in favour of reducing hydrodynamic drag. Firstly, protein adsorption capacity was evaluated as a proxy to predict the adhesion intensity³. After, the coatings were introduced in a 35 L indoor raceway PBR to be exposed to a culture of the marine microalgae *Nannochloropsis gaditana* for 4 months. The raceway PBR was operated in continuous mode at a dilution rate of 0.125 day⁻¹. Cell adhesion at the end of the culture was quantified by chlorophyll *a* fluorescence measurement⁴. The FRC selected for a potential manufacture of closed-PBRs showed the lowest adhesion intensity (257.47 cells/mm²). This value was above that measured for *Hempasil X₃*[®] (55.08 cells/mm²). Although *Hempasil X₃*[®] is an opaque commercial FRC, it was used in this study as reference FRC by its excellent antibiofouling properties reported. A linear relationship between cell adhesion intensity and protein adsorption capacity was found. As a result, the protein adsorption assay may be useful as proxy for quick prediction of biofouling in massive testing of coatings.

Acknowledgements. This research was funded by the Spanish Ministry of Economy and Competitiveness (Project RTI2018-101891-B-100), and the European Regional Development Fund Program.

¹ O. Zeriouh, J.V. Reinoso-Moreno, L. López-Rosales, M.C. Cerón-García, A. Sánchez-Mirón, F. Camacho-García, E. Molina-Grima, *Algal. Res.* **2019**, *37*, 277-287.

² O. Zeriouh, A.R. Marco, J.V. Reinoso-Moreno, L. López-Rosales, F. Camacho-García, E. Molina-Grima, *Biotechnol. Bioeng.* **2019**.

³ D. Wang, X. Wu, L. Long, X. Yuan, Q. Zhang, S. Xue, S. Wen, C. Yan, J. Wang, W. *Cong. Biofouling.* **2017**, *33*, 970-979.

⁴ O. Zeriouh, J.V. Reinoso-Moreno, L. López-Rosales, B. Sierra-Martín, M.C. Cerón-García, A. Sánchez-Mirón, A. Fernández-Barbero, F. Camacho-García, E. Molina-Grima, *Algal. Res.* **2017**, *23*, 240-254.

AISLAMIENTO Y CARACTERIZACIÓN DE CIANOBACTERIAS Y MICROALGAS CON CARÁCTER BIOPESTICIDA A PARTIR DE JARDINES URBANOS

A. J. Toribio, J. Lalchandani, I. L. Campaña, F. Suárez-Estrella, M. J. López, M. M. Jurado, J. A. López-González y J. Moreno

Área de Microbiología. Dpto. Biología y Geología. Universidad de Almería, ceia3. La Cañada de San Urbano s/n, 04120, Almería; atoribio@ual.es

Las microalgas y cianobacterias son organismos fotosintéticos con una amplia distribución en diferentes ambientes. Su presencia en suelos determina la composición y fertilidad de éstos, y la liberación de ciertas sustancias, promotoras del crecimiento vegetal o inhibidoras de patógenos, haciendo que su utilización sea beneficiosa en agricultura. Además, la producción de compuestos bioactivos con diferentes aplicaciones, incrementa el interés por el aislamiento e identificación de estas especies.

El objetivo principal del presente trabajo fue la caracterización de cepas de microalgas y cianobacterias aisladas a partir de suelos de jardines localizados en la Universidad de Almería (1), la zona del levante almeriense (2) y Almería capital (3), que mostraran capacidad para mejorar el desarrollo vegetal y la protección de los cultivos frente al ataque de agentes fitopatógenos. Con el objetivo de evaluar la diversidad microalgal en dicho suelo, se procedió a la identificación morfológica y molecular de las especies más destacables.

Para ello, se llevó a cabo la caracterización macro y microscópica de los aislados. Posteriormente, se determinó el potencial de la colección para controlar el crecimiento *in vitro* de 4 agentes fitopatógenos fúngicos. Adicionalmente, se evaluó el carácter fitoestimulante o fitotóxico de dichas cepas en semillas de berro y, finalmente se realizó la identificación molecular de las cepas más eficaces por su carácter biopesticida.

Los resultados mostraron, en cuanto al efecto biopesticida, que las cepas de cianobacterias y microalgas pueden inhibir, en mayor o menor grado, el crecimiento de los patógenos ensayados. Por otro lado, con algunos de los extractos analizados se detectó un marcado efecto fitoestimulante. En cuanto a la caracterización molecular y morfológica de las cepas aisladas, éstas se clasificaron en 3 géneros distintos de microalgas (*Nannochloris*, *Eudorina*, *Coccomyxa*), mientras que en el caso de las cianobacterias aisladas, no fue posible garantizar unos posibles candidatos a nivel de género mediante la herramienta bioinformática NCBI-BLAST, debido posiblemente al reducido número de secuencias de cianobacterias que se incluyen en la base de datos de referencia.

Por tanto, cianobacterias y microalgas procedentes de suelos de jardines son una fuente potencial de nuevas sustancias bioactivas de carácter biopesticida y fitoestimulante, lo que justifica la relevancia de tales microorganismos desde un punto de vista agro-sanitario.

Agradecimientos. Este trabajo ha sido financiado por el Proyecto RETOS-Colaboración titulado “Producción de bioplaguicidas a partir de cianobacterias para su uso en agricultura (Alga4control)”, subvencionado por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (RTC20RTC2017-6444-2).

ESTUDIO DEL CONOCIMIENTO, UTILIZACIÓN Y SATISFACCIÓN DEL USO DE TERAPIAS PSEUDOCIENTÍFICAS EN LA POBLACIÓN

F. Pérez, D. López, J. Ocaña, M. Ortiz, C. Ruiz, P. Sánchez, A. Mendoza y J. Mota

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

El trabajo de investigación que se expone en este resumen tiene como objetivo evaluar la incidencia de las terapias pseudocientíficas que envuelven a la sociedad actual. Para ello, preguntas relacionadas con los medios a través de los cuales es recibida la información que los usuarios utilizan, así como la edad, cultura y conocimientos generales sobre la ciencia u otras ramas de interés, toman relevancia en las encuestas realizadas. Obteniendo los resultados de 314 personas entrevistadas, diferentes conclusiones pueden ser elaboradas, correlacionando el ámbito personal en el que, de forma personalizada, se desenvuelve cada individuo con los temas tratados en este sondeo.

Así pues, los datos evidencian una clara repercusión de las nuevas tecnologías en las generaciones más jóvenes, siendo estos los medios principales a los que acudir en la búsqueda de nueva información, mientras que la relación interpersonal pasa a un segundo plano. Además, la distinción histórica que ha perseguido al ser humano según el sexo al que pertenece contiene un potencial interesante en el que poder indagar. La resolución de todas estas cuestiones junto con otras más, son recogidas en la investigación realizada, concluyendo en que las cifras representadas revelan la necesidad de potenciar la divulgación científica entre la ciudadanía con el fin de evitar posibles engaños que lleven a tratar de solventar los problemas con terapias que sustituyan las realmente eficaces.

Agradecimientos. Este trabajo ha sido realizado por el Grupo docente de innovación “Biología de la Conservación” liderado por Juan Francisco Mota Poveda. Este grupo de investigación quiere agradecer especialmente la colaboración de Fabián Martínez Hernández, cuya participación en el trabajo fue decisiva hasta el último momento.

PERCEPCIÓN SOBRE LAS NUEVAS TECNOLOGÍAS ENTRE UNIVERSITARIOS CIENTÍFICOS

A. Valido-Peña, A. Tagliaferro-Quionero, E. Salmerón-Sánchez, M. E. Merlo, M. Segado-Pérez, R. Salazar-Vergara, F. Martínez-Hernández

*Departamento de Biología y Geología, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Almería, 04120 La Cañada de San Urbano, Almería (España)
biogeo@ual.es*

En esta investigación el objetivo es determinar el nivel de conocimiento científico que estudiantes universitarios de carreras científicas presentan. Para ello, se divulgó una encuesta elaborada con preguntas que tratan de valorar dicho nivel científico sobre cuestiones de interés actual. Posteriormente, mediante análisis estadísticos se obtuvieron conclusiones que serán expuestas. Dicho análisis permite dar a conocer la percepción de los universitarios en función de parámetros tales como la rama científica de estudio, la religión practicada y la edad, arrojando así las conclusiones esperadas. De esta manera, se pretende demostrar la importancia de una correcta educación científica básica recibida por igual entre los estudiantes.

Para sustentar las conclusiones y suposiciones también se presentan una serie de figuras que incluyen gráficas de diversos tipos que relacionan las respuestas de los encuestados.

Agradecimientos: La realización de esta investigación, tanto la difusión de la encuesta como su posterior análisis y desarrollo ha sido posible gracias al trabajo del Grupo Docente de Innovación. Este grupo, liderado por el docente Juan Francisco Mota Poveda busca fomentar el interés científico entre sus alumnos para que adquieran una mayor capacidad crítica y conozcan diferentes ramas de la disciplina científica, como es la correcta divulgación y análisis de datos. También, es destacable la actuación de Fabián Martínez Hernández requerida para el completo desarrollo de esta investigación.

RELACIÓN ENTRE INDICADORES DE BIODIVERSIDAD Y PARÁMETROS DE MADURACIÓN A PARTIR DE MUESTRAS DE COMPOST PROCEDENTES DE ALPEORUJO

**M. J. Estrella-González¹, F. Suárez-Estrella¹, M. J. López¹, M. Jurado¹,
J. A. López-González¹, A. Muñoz-Mérida² y J. Moreno¹**

¹Área de Microbiología, Departamento e Biología y Geología, Facultad de Ciencias Experimentales. Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3 E04120 Almería (España),

²CIBIO-InBIO, Universidade do Porto, Campus de Vairão, Rua Padre Armando Quintas, 4485-661 Vairão (Portugal),
meg274@ual.es

El compostaje es un proceso de biotransformación aerobia de la materia orgánica bajo condiciones controladas de humedad y temperatura¹. El objetivo principal de este trabajo fue el estudio de los parámetros básicos, de madurez y de toxicidad, así como de la biodiversidad de los productos obtenidos durante procesos de compostaje industrial a partir de alpeorujos.

Para ello se tomaron muestras procedentes de 3 empresas dedicadas al compostaje de alpeorujos a escala industrial (ALP1, ALP2 y ALP3), a partir de las cuales se llevó a cabo el estudio de diferentes parámetros físico-químicos y metagenómicos. Los parámetros básicos estudiados se correspondieron con aquellos indicados en legislación (BOE 999/17): Materia orgánica, relación C/N y humedad. Otros parámetros relacionados con la madurez y toxicidad de las muestras fueron Tasa de Humificación (HR), Tasa de Nitrificación (Amonio/Nitrato), Índice de Germinación (IG) o Índice respirométrico tras 4 días (AT4). Por otro lado, se estimaron los índices de biodiversidad bacteriana más representativos: Shannon y Simpson.

Durante la fase termófila del proceso se alcanzaron temperaturas superiores a 50 °C durante más de 3 días, tal como exige la EPA (2003)². Sólo las muestras procedentes de ALP3 no cumplieron con los valores mínimos de humedad requeridos por legislación³. En cuanto al resto de parámetros físico-químicos, mediante un análisis discriminante se pudo comprobar que las muestras de compost analizadas se agrupaban en función de la empresa de procedencia, y por tanto, en función de los materiales de partida y de las condiciones operacionales. En relación al análisis metagenómico, se pudo observar que las muestras ALP1 presentaron el mayor número de OTUs, coincidiendo con el mayor índice de biodiversidad de Shannon, así como los mayores datos de Índice de Germinación, la mayor tasa de humificación HR y el valor de AT4 más bajo (Índice respirométrico).

En definitiva, el compostaje de alpeorujos a escala industrial, se considera una alternativa económica, eficiente y respetuosa con el medio ambiente, muy útil para la gestión de residuos de origen antropogénico. No obstante, a pesar del empleo de materias primas que pueden ser muy similares *a priori*, se pueden obtener productos que, aunque pueden catalogarse como compost, son muy diferentes respecto a su biodiversidad y calidad agronómica.

Agradecimientos. Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Economía y Competitividad a través del proyecto AGL2015-64512-R

¹ Jurado, M. M., Suárez-Estrella, F., Vargas-García, M. C., López, M. J., López-González, J. A., & Moreno, J. (2014). Increasing native microbiota in lignocellulosic waste composting: Effects on process efficiency and final product maturity. *Process biochemistry*, 49(11), 1958-1969

² EPA (Environmental Protection Agency, USA), 2003. Environmental regulations and technology. Control of pathogens and vector attraction in sewage sludge. EPA625-R-92-013

³ BOE-A-2017-14332, 2017. Real Decreto 999/2017: Spanish Regulation on fertilizers products.

CARACTERIZACIÓN DE UN MUTANTE INSERCIONAL DE *SOLANUM LYCOPERSICUM*

**J. D. López-Fábregas¹, R. Micol-Ponce¹, F. J. Yuste-Lisbona¹, B. Pineda²,
T. Angosto¹, V. Moreno², J. Capel¹, R. Lozano¹**

¹*Centro de Investigación en Biotecnología Agroalimentaria (CIAIMBITAL), Universidad de Almería. 04120 Almería, España.*

²*Instituto de Biología Molecular y Celular de Plantas (UPV-CSIC), Universidad Politécnica de Valencia. 46022, Valencia España E04120 Almería (Spain)
jlf266@ual.es*

El genoma del tomate (*Solanum lycopersicum*) fue uno de los primeros genomas en ser secuenciados al completo. No obstante, la mayoría de los genes que contiene tienen una función predicha o hipotética en base a criterios bioinformáticos. Por ello, tanto la existencia como la función de dichos genes han de ser comprobadas experimentalmente. La rama de la genética que se dedica a este campo se conoce como genética reversa, que consiste en generar mutaciones en individuos silvestres con el fin de caracterizar los genes o regiones afectadas por estas mutaciones para asignar funciones a dichas regiones o genes. En este trabajo se ha caracterizado un mutante insercional de tomate generado mediante transgénesis con un T-DNA que contiene una trampa de intensificadores en plantas del cv. Moneymaker (MM). El objetivo de este trabajo ha sido definir el fenotipo de la mutación, localizar la mutación en el genoma y analizar la cosegregación entre el fenotipo mutante y la mutación.

EVALUANDO EL IMPACTO DE LA RESTAURACIÓN CON ALMENDRO ECOLÓGICO EN LOS SERVICIOS ECOSISTÉMICOS Y EL BIENESTAR HUMANO: CASO DE ESTUDIO SIERRA MARÍA-LOS VÉLEZ

D. Alba-Patiño, I. Gutiérrez-Briceño, M. García-Llorente, M. Expósito-Granados, B. Murillo, L. Vásquez, H. Castro, V. Carabasa; A.J. Castro.

*Centro Andaluz de Evaluación y Seguimiento al Cambio Global
Departamento de Biología y Geología, Facultad de Ciencias Experimentales,
Universidad de Almería,
E04120 Almería (España); fdaniela_alba@hotmail.com*

Los ecosistemas Mediterráneos presentan una alta susceptibilidad a los eventos climáticos generados por el cambio global, esto los hace vulnerables y propensos a la pérdida de servicios ecosistémicos. La restauración ecológica se posiciona como una herramienta de vital importancia para reducir la vulnerabilidad de estos ecosistemas y que de esta forma puedan seguir sustentando el bienestar de las comunidades locales¹. El proyecto LIFE Greenlink, financiado por la Unión Europea, además de contribuir al desarrollo de estrategias eficaces de adaptación al cambio global, mediante el empleo de un método innovador de plantación para restaurar zonas desertificadas, persigue la implementación del marco de servicios de los ecosistemas (i.e., beneficios que los humanos obtienen de la naturaleza²) para cuantificar y valorar los servicios asociados a dichos procesos de restauración ecológica y su impacto en términos de bienestar humano. Para ello se ha utilizado como caso de estudio la finca El Ciruelo situada en los alrededores del Parque Natural Sierra María-Los Vélez (SE de España). Con el objetivo de estimar la contribución al bienestar local de un proceso de restauración con almendro ecológico, se realizó un muestreo social con 250 residentes, donde se evaluó la importancia y vulnerabilidad de los servicios ecosistémicos que provee la zona^{3,4}, durante el proceso de restauración. Los resultados preliminares muestran que los servicios percibidos con mayor importancia son la producción de alimento, el control de la erosión y la producción de agua dulce, que al mismo tiempo es el servicio más vulnerable en los últimos 10 años, seguido por la polinización. Los componentes del bienestar humanos más positivamente reforzados son los relativos a la seguridad, como el tener un acceso seguro a los recursos, seguidos por los materiales básicos para la vida, y la salud. El almendro es el cultivo que ha sido identificado como más beneficioso e importante en la zona. Además, sus variedades ecológicas presentan una amplia aceptación por parte de las comunidades locales, influyendo en la identidad local, el empleo y el acceso a bienes. Concluimos sobre la necesidad de integrar estudios de percepción social, que incluyan el enfoque de servicios ecosistémicos y los componentes del bienestar humano, como elemento clave para evaluar procesos de restauración ecológica en zonas que se enfrentan cada vez más a eventos climáticos extremos, como lo son los ecosistemas Mediterráneos.

¹ W. V. Reid et al., "Ecosystems and Human Well-Being," in Millennium Ecosystem Assessment, Island Pre., Washington, DC., 2005.

² Díaz S et al. "An inclusive approach to assess nature's contributions to people" *Science*, vol 359, 270-272, 2018.

³ A. J. Castro, C. C. Vaughn, J. P. Julian, and M. García-Llorente, "Social Demand for Ecosystem Services and Implications for Watershed Management" *J. Am. WATER Resour. Assoc.*, pp. 1-13, 2015.

⁴ C. Quintas-Soriano, A. J. Castro, M. García-Llorente, J. Cabello, and H. Castro, "From supply to social demand: a landscape- scale analysis of the water regulation service," *Landsc. Ecol.*, vol. 29, 2014.

EFECTO DEL TIPO DE CONTENEDOR EN EL DESARROLLO VEGETATIVO EN PLANTAS DE TOMATE INJERTADO EN CULTIVO SIN SUELO

J. Gallegos-Cedillo, C. Nájera, V. M. Gallegos-Cedillo y M. Urrestarazu

Departamento de Producción Vegetal, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Almería, E04120 Almería (España); jgc641@inlumine.ual.es

El crecimiento de las plantas y la calidad de su sistema radical se ve fuertemente afectados por la morfología y características de los contenedores¹. El objetivo de este trabajo fue comparar dos formas de contenedor, cuadrados y circulares, y evaluar el efecto sobre los parámetros de crecimiento vegetativos y desarrollo de raíz de plantas de tomate injertado. El material vegetal utilizado fue plantas de tomate (*Solanum lycopersicum* L.), trasplantado en un estado de cuatro hojas verdaderas en sustrato fibra de coco en dos formas de contenedor, cuadrados y circulares. A los treinta días después del trasplante se realizó la medición de los parámetros vegetativos; altura, número de hojas, diámetro de tallo, longitud de raíz, área foliar, biomasa fresca y seca (hoja, brotes, tallo, raíz y total)^{1,2}. El diseño experimental fue en bloques completamente al azar, con cuatro repeticiones y diez plantas por repetición. Los resultados de las variables agronómicas se analizaron con Tukey a un $P \leq 0,05$. En nueve de los dieciséis parámetros de crecimiento vegetativo analizados, los contenedores cuadrados incrementaron significativamente en promedio entre un 10 y 30% el diámetro de tallo, volumen radical, área foliar, así como en la biomasa fresca y seca (Figura 1) de brotes, raíz y total con respecto a los contenedores circulares. En conclusión, los contenedores cuadrados favorecen la producción de biomasa en plantas de tomate injertado e incrementan sustancialmente el volumen y el peso total de raíz que permite una importante capacidad de desarrollo en campo con respecto a los contenedores circulares.

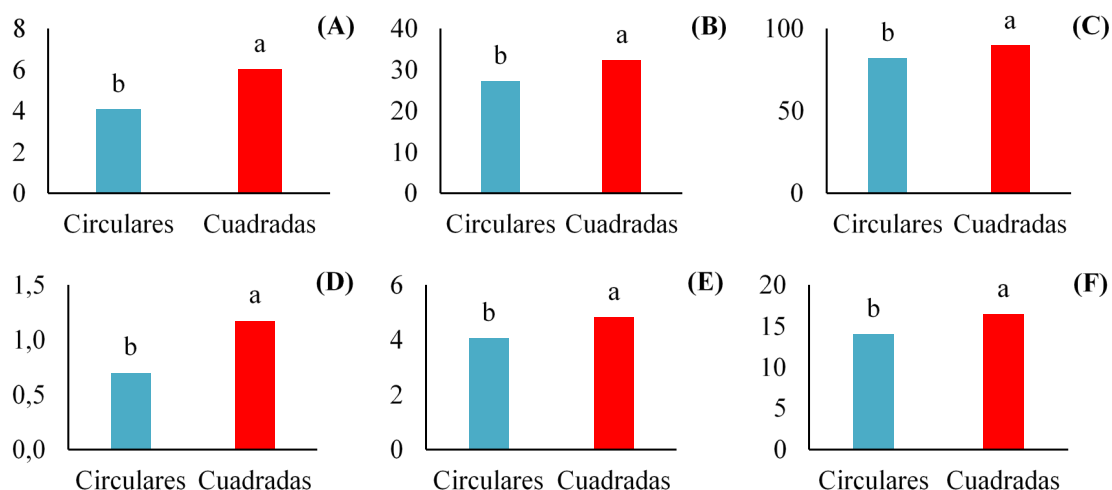


Figura 1. Peso fresco y seco (g planta^{-1}) de brotes (A, D), raíz (B, E) y total (C, F) en contenedores cuadrados y circulares en tomate injertado en sustrato fibra de coco. Letras minúsculas distintas indican diferencias significativas entre el tipo de contenedor, a una prueba de Tukey al 95%, $n=10$.

Agradecimientos. Los autores agradecen el apoyo del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología de México (CONACYT) por su apoyo financiero a este trabajo.

¹ M. Urrestarazu, *Manual práctico del cultivo sin suelo e hidroponía*. Mundi-Prensa, Madrid (España). 2015. pp, 239.

² C. Sonneveld and N. Straver, *Nutrient solutions for vegetables and flowergrown in water or substrates*. 10th ed (NL), 1994.

BENEFICIO DEL SILICIO EN EL DESARROLLO VEGETATIVO Y PRODUCCIÓN DEL CULTIVO DE TOMATE EN FIBRA DE COCO

V. M. Gallegos-Cedillo, C. Nájera, J. Gallegos-Cedillo y M. Urrestarazu

*Departamento de Agronomía, Producción vegetal,
Universidad de Almería,
E04120 Almería (España); vgc253@inlumine.ual.es*

En la actualidad, la agricultura requiere de técnicas de cultivo sostenibles, así como la incorporación de nutrientes como el Silicio (Si) en la solución nutritiva de los cultivos y que mejoraran su productividad. Sin embargo, la esencialidad del Si en el cultivo de plantas superiores aún no está determinado^{1,2}. Se conocen los efectos benéficos del Si frente a diferentes condiciones de estrés como salinidad y sequía, además de incrementar la protección frente a patógenos y en las cualidades de fruto en beneficio de la salud humana³. A pesar del efecto potencial del Si, existen pocos estudios que incorporen Si en la solución de fertirrigación en los cultivos. El objetivo fue ver el efecto de la incorporación de Si en la solución nutritiva mediante fertirrigación sobre el desarrollo vegetativo y producción en plantas de tomate en cultivo sin suelo.

El experimento se llevó a cabo en un invernadero multitúnel en la Universidad de Almería, España. Plantas de tomate (*Solanum lycopersicum* L.) con cuatro hojas verdaderas fueron trasplantadas en sustrato fibra de coco. A los 30 días después de trasplante se midieron los principales parámetros de crecimiento, la biomasa fresca y seca de tallo, hoja y raíz. La producción fue clasificada por calibre y rendimiento total. Se utilizó una solución nutritiva estándar recomendada para tomate basado en Sonneveld y Straver⁴. Los tratamientos evaluados fueron: Solución nutritiva sin Silicio (-Si) y Solución nutritiva con 0.65 mM de Silicio (+Si).

La adición de Si a través de la solución nutritiva en plantas de tomate mostró un efecto significativo en la longitud de raíz, área foliar, peso seco de raíz y en la biomasa seca de hoja con un incremento promedio de un 12%, respecto al tratamiento control. No se mostraron diferencias significativas en la producción de frutos para ninguna de las clasificaciones de fruto realizadas, ni para el rendimiento total, sin embargo, se muestra una mejora significativa en la producción de frutos de tomates en calibre 80-120. Las propiedades organolépticas de fruto no presentaron un efecto significativo, tan solo, los sólidos solubles totales de fruto incrementaron un 5% con la aplicación de silicio.

En conclusión, la incorporación de Si en la solución nutritiva mediante el fertirriego beneficia y potencia el crecimiento vegetativo de las plantas de tomate. La aplicación de silicio tiene un efecto positivo en la calidad organoléptica en el fruto de tomate expresada en los °Brix.

Agradecimientos. Los autores agradecen el apoyo del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología de México (CONACYT) por su apoyo financiero a este trabajo.

¹ J.T. Woolley, *Plant Physiol.* **1957**, 32(4), 317-321.

² P. Marschner, *Academic Press, Waltham, M.A.* **2011**, pp. 249-261

³ E. Heuvelink, W. Voogt, *In: Greenhouses: the international magazine for greenhouse growers.* **2019**, 8(1), 16-17.

⁴ C. Sonneveld, N.B. Straver, *Voedingsoplossingen glastijnbouw.* **1994**, 8, 1-33.

ANÁLISIS DE LAS AMENAZAS QUE AFECTAN A LA FLORA AMENAZADA ESPAÑOLA

**C. Hernández-Ruiz, M. Cueto-Romero, J. L. Molina-Pardo, S. López-Martínez,
M. A. Montes, A. Laguía-Allué, M. Sánchez-Robles, C. Pesci-Moyano y
E. Giménez-Luque**

*Centro de Colecciones Científicas de la UAL, CECOUAL
Edificio CITE V, Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)
carmenhruez6@gmail.com*

Desde hace años, España ha sido citada como uno de los países de mayor diversidad vegetal del entorno Mediterráneo en Europa¹. La preocupación por el estado de esta biodiversidad dio lugar a la publicación de varios trabajos, entre otros, al Atlas de la Flora Amenazada de España (AFA)². La información contenida en este libro fue reunida por investigadores de todo el territorio español con ayuda del Manual de Metodología AFA³ con el fin de estandarizar los protocolos de trabajo y los resultados. Uno de los problemas de este manual es la ausencia de información descriptiva de los tipos de amenazas posibles, dando lugar a que los investigadores indicaran en cada caso una versión propia de las alternativas incluidas. Así se obtuvieron unos resultados ligados a un alto grado de subjetividad, poco unificados y representativos de los problemas reales a los que se enfrenta la flora amenazada.

El objetivo de este trabajo es analizar estas amenazas, proponiendo una nueva versión de las mismas para una mejor gestión y conocimiento del estado de las especies amenazadas. Este análisis de amenazas se lleva a cabo mediante la creación de una base de datos que servirá para un posterior análisis estadístico, con el que se espera relacionar grupos y amenazas. Se confirma la relación entre las presiones, siendo algunos taxones más afectados por actividades humanas, otros por el cambio climático y su propia biología, aunque estas afecciones no son excluyentes de otras. Esto será útil para la asignación de amenazas de forma objetiva.

Agradecimientos. A todo CECOUAL, por enseñarme que un equipo unido y con ganas puede con todo y más.

¹ Médail, F., & Quèzel, P. (1997). *Hot-spots analysis for conservation of plant biodiversity in the Mediterranean Basin*. Annals of the Missouri Botanical Garden, 112-127.

² Bañares Á., Blanca G., Güemes J., Moreno J.C. & Ortiz S., eds. 2004. *Atlas y Libro Rojo de la Flora Vasculare Amenazada de España*. Dirección General de Conservación de la Naturaleza. Madrid, 1.069 pp.

³ Iriondo, J. M. (2003). *Manual de metodología de trabajo corológico y demográfico*. Proyecto Atlas de la Flora Amenazada. Versión, 4, 51.

MUTACIÓN FRENTE A TRANSFERENCIA HORIZONTAL DE GENES. DISEÑO EXPERIMENTAL PARA EL ESTUDIO DE LA EVOLUCIÓN DE RESISTENCIA A Cu^{2+} EN *PSEUDOMONAS SYRINGAE*

A. López-Martín, A. de Vicente-Moreno, E. Arrebola-Díez

*Departamento de Microbiología, Facultad de Ciencias
Universidad de Málaga; alexlopezmartin@gmail.com*

En este trabajo teórico se sientan las bases de un diseño experimental que pretende entender con mayor profundidad los mecanismos implicados en la transferencia horizontal de genes y la posible relación con las tasas de mutación, que también están influidas por el entorno. Para ello el trabajo se apoya en las investigaciones realizadas con *Pseudomonas syringae* pv *syringae* en la Universidad de Málaga, lo que permite realizar algunas pruebas iniciales que invitan a discutir posibles inconvenientes y/o retos en la ejecución del diseño experimental.

La investigación y el diseño del experimento se ha realizado sobre poblaciones bacterianas ya que son un buen modelo para estudiar procesos evolutivos, como las mutaciones y la selección natural debido a su gran tamaño poblacional y los tiempos de generación cortos^{1,2,3}. Para poder llevar a cabo el experimento propuesto es necesario valorar la competencia por transformación de las cepas de estudio y bloquear de forma efectiva el proceso de conjugación. Esto permitiría en el primer caso simplificar el experimento, y en el segundo poder realizar de forma fiable la segunda parte del mismo.

Las limitaciones impuestas por las características de un Trabajo Fin de Máster, dejan en el tintero planteamientos que podrían desarrollarse de forma paralela a la ejecución del experimento diseñado. En la bibliografía existen propuestas de modelado matemático enfocado a la evolución de la transferencia horizontal de genes en comunidades bacterianas⁴, dinámicas poblacionales que incorporan las tasas de transformación genética⁵, estudios sobre la robustez – concepto utilizado en el estudio de sistemas complejos- de la transferencia horizontal de elementos conjugables⁶, o de relación entre la exposición ambiental y la selección de genes transferidos horizontalmente⁷ entre otros artículos, dando lugar a un contexto idóneo para aplicar estos modelos para observar el carácter predictivo que reflejan respecto a los resultados ofrecidos por el experimento.

Esta propuesta pretende reflexionar sobre la importancia del diseño experimental en el proceso de investigación, fundamental para un enfoque adecuado de los problemas que pretendemos resolver y el análisis de los resultados que obtenemos.

¹ Luria, S. E. & Delbrück, M. Mutations of Bacteria from Virus Sensitivity to Virus Resistance. *Genetics*, 28, 491–511 (1943).

² Tenaillon, O. et al. Tempo and mode of genome evolution in a 50,000-generation experiment. *Nature*, 536, 165–170 (2016).

³ Baym, M. et al. Spatiotemporal microbial evolution on antibiotic landscapes. *Science*, 353, 1147–1151 (2016).

⁴ Novozhilov, A. S., Karev, G. P. & Koonin, E. V. Mathematical Modeling of Evolution of Horizontally Transferred Genes. *Mol. Biol. Evol.* 22, 1721–1732 (2005).

⁵ Mao, J. & Lu, T. Population-Dynamic Modeling of Bacterial Horizontal Gene Transfer by Natural Transformation. *Biophys. J.* 110, 258–268 (2016).

⁶ Delavat, F., Mitri, S., Pelet, S. & van der Meer, J. R. Highly variable individual donor cell fates characterize robust horizontal gene transfer of an integrative and conjugative element. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 113, E3375–3383 (2016).

⁷ Nielsen, K. M. & Townsend, J. P. Environmental Exposure, Horizontal Transfer and Selection of Transgenes in Bacterial Populations. ResearchGate (2001).

ANALYSIS OF THE BALTIC SEA FOOD WEB USING DYNAMIC BAYESIAN NETWORKS WITH HIDDEN VARIABLES

A. D. Maldonado¹, L. Uusitalo², A. Tucker³, T. Blenckner⁴, P. A. Aguilera⁵ and A. Salmerón⁶

¹ Data analysis research group, University of Almería, Almería (Spain); ² Marine Research Centre, Finnish Environment Institute, Helsinki (Finland); ³ Department of Computer Science, Brunel University London, Uxbridge (United Kingdom); ⁴ Stockholm Resilience Centre, Stockholm University, Stockholm (Sweden); ⁵ Department of Biology and Geology, University of Almería, Almería (Spain); ⁶ Department of Mathematics, University of Almería, E04120 Almería (Spain); ana.d.maldonado@ual.es

A major challenge in environmental modeling is to identify structural changes in the ecosystem across time, i.e., changes in the underlying process that generates the data. The Central Baltic Sea has undergone at least two regime shifts: 1) in the 1960s, induced by nutrient loading from land, which led to a eutrophic state; and 2) in the 1980s, induced by overfishing of cod and climate, causing a shift toward a sprat dominated state. Such non-stationary changes in ecosystem dynamics pose a challenge to ecosystem modelers and data analysts, since it may be that the functional forms describing the relationships between the variables change.

Bayesian networks (BNs) are compact representations of the joint probability distribution over a set of variables whose independence relations are encoded by the structure of an underlying directed acyclic graph (DAG). Since BNs do not explicitly model changes over time, a dynamic approach could represent more realistic modeling. Dynamic Bayesian networks (DBNs) extend the concept of BN by allowing the representation of the relationship between variables at successive time steps¹. It is normally assumed that the model structure is the same in each time step and the parameters over time do not change, i.e., the model is assumed to be time-invariant. However, it is possible to add hidden nodes to represent non-stationary processes². Hidden variables (HVs) are unobserved variables that might represent relevant processes in the system and can help explain some observed variables of interest. The value of the HVs can be inferred from the observed variables linked to them in the DAG so that a change in the HV pattern reflects a change in the system. Therefore, DBNs with HVs can help finding the signal of change amongst the multiple ecosystem variables and their interactions³.

In this work⁴, we analyze the Baltic Sea food web in order to 1) examine potential unobserved processes that could affect the ecosystem and 2) make predictions on some variables of interest. To do so, DBNs with different setups of HVs were built and validated with rolling-origin and moving windows. Our results confirm that, from the predictive accuracy point of view, more data help to improve the predictions whereas the different setups of HVs did not make a critical difference in the predictions. Finally, the different HVs picked up patterns in the data, which revealed changes in different parts of the ecosystem.

Acknowledgements. This work has been partly supported by the Spanish Ministry of Economy and Competitiveness, through project TIN2016-77902-C3-3-P.

¹ K. B. Korb, A.E. Nicholson, *Bayesian Artificial Intelligence*. CRC Press/Chapman & Hall Book (2011)

² K. Murphy, *Machine Learning: A Probabilistic Perspective*, MIT Press (2012)

³ L. Uusitalo, M.T. Tomczak, B. Müller-Karulis, I. Putnis, N. Trifonova, A. Tucker, *Hidden variables in a Dynamic Bayesian Network identify ecosystem level change*. *Ecological Informatics* 45 (2018) 9–15

⁴ A.D. Maldonado, L. Uusitalo, A. Tucker, T. Blenckner, P.A. Aguilera, A. Salmerón, *Prediction of a complex system with few data: Evaluation of the effect of model structure and amount of data with dynamic bayesian network models*, *Environmental Modelling and Software* 118 (2019) 281–297

USO DE VEHÍCULOS AÉREOS NO TRIPULADOS PARA VALIDAR LA REGENERACIÓN DE BOSQUES BOREALES

P. Martínez-Carricondo¹, H. Kathrine-Sjølie ², V. Naumov ², F. Carvajal-Ramírez¹ y F. Agüera-Vega¹

¹*Servicio Periférico de Investigación y Desarrollo basado en Drones
Universidad de Almería,*

E04120 Almería (España); drones@ual.es

²*Department of Ecology and Natural Resource Management, Inland Norway University of Applied Sciences, Evenstad, Norway*

La información sobre la regeneración de bosques es muy importante para la gestión forestal. Los profesionales validan el éxito de la regeneración de las áreas forestales replantadas evaluando la adecuación del espaciamiento, la supervivencia, el crecimiento y la composición por especies. Estos estudios tradicionalmente se han realizado mediante recuento manual en parcelas de muestreo¹.

Si la condición, la altura mínima y la especie de plántula dentro de la zona de estudio pudiera derivarse de imágenes procedentes de UAVs (vehículos aéreos no tripulados), entonces se reduciría notablemente la necesidad de recuentos manuales, resultando en un importante ahorro de coste. Sin embargo, es necesario demostrar que las plántulas pueden ser detectadas automática o semiautomáticamente por teledetección, para lo cual se requieren imágenes de muy alta resolución espacial.

Recientemente, los UAVs han permitido el uso de una gran variedad de sensores con capacidad de detección a corta distancia y se aplican en la ingeniería ambiental en general. Las cámaras digitales que funcionan en el espectro visible se utilizan para proyectos de fotogrametría UAV, produciendo ortoimágenes de muy alta resolución, Modelos Digitales de Elevación (MDE) y nubes de puntos muy densas del terreno². Además, cuando el sensor del UAV incluye imágenes multiespectrales, todos los índices diseñados para imágenes de satélite pueden aplicarse o adaptarse a las aplicaciones del UAV.

El objetivo de este trabajo es probar el uso de los UAVs para validar el éxito de la regeneración de bosques jóvenes en Noruega. Para ello, se ha realizado un recuento automático de árboles, clasificados como *Picea Abies*, *Pinus Sylvestris* y *No-Coníferas*, a partir de las imágenes adquiridas por el UAV y se han comparado con los datos del inventario forestal de campo. El logro de este flujo de trabajo completo reduce la necesidad de evaluaciones in situ de plántulas y proporciona una nueva y poderosa herramienta para la gestión forestal.



Figura 1. Especies arbóreas identificadas en este trabajo. (a) *Picea Abies*; (b) *Pinus Sylvestris*; (c) Non-Conifers (Birch)

¹ Feduck, McDermid, and Castilla, 'Detection of Coniferous Seedlings in UAV Imagery', *Forests*, 2018 <<https://doi.org/10.3390/f9070432>>.

² Martínez-Carricondo and others, 'Assessment of UAV-Photogrammetric Mapping Accuracy Based on Variation of Ground Control Points', *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 72, February (2018), 1–10 <<https://doi.org/10.1016/j.jag.2018.05.015>>.

EVALUACIÓN DE LA INFILTRACIÓN MEDIANTE EL USO DE UN MODELO UNIDIMENSIONAL DE TEMPERATURA EN EL TRAMO MEDIO DEL RÍO ANDARAX

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

*G.I. Recursos Hidricos y Geología Ambiental. Dpto. de Biología y Geología.
Universidad de Almería,
04120 Almería (España); fnm206@ual.es*

Los pronósticos de un aumento de los fenómenos hidrológicos extremos en la zona mediterránea hacen que sea esencial establecer mecanismos para identificar su influencia sobre la relación entre las aguas superficiales-subterráneas. Para ello se realiza el estudio de la interacción en un río temporal situado en un área semiárida, analizando las series temporales de precipitación y temperatura de agua superficial y subterránea para dos años hidrometeorológicos distintos: el año 2015/16 con bajas precipitaciones (90-148 mm), caudal uniforme (0.44 m³/s de media) y con la mayor avenida de 3.96 m³/s; mientras que el año 2016/17 tiene una precipitación más elevada (294-296 mm), como consecuencia de fuertes tormentas que generan grandes avenidas el río alcanza caudales máximos de 12.24 m³/s y el caudal promedio es menor (0.25 m³/s).

La temperatura del agua superficial oscila entre los 8.8-24.6 °C, produciéndose grandes descensos asociados a episodios tormentosos. La temperatura del agua subterránea es más estable (18.5-19.0 °C), apareciendo oscilaciones durante los periodos en los que el río lleva agua y estabilizándose cuando el caudal se anula.

Para la evaluación de la variabilidad interanual de la infiltración se utiliza un modelo unidimensional de temperatura (1D TempPro) que permite mostrar el diferente comportamiento del sistema. Los valores de la descarga específica (m/d) obtenidos para el 2015/16 muestran un comportamiento similar para las entradas y salidas de agua en el acuífero. En 2016/17 la infiltración empieza con un incremento muy pequeño y constante, aparece un gran salto durante diciembre de 2016, cuando la pendiente se estabiliza. Los valores negativos son similares en ambos años, salvo a finales de 2016/17, cuando se produce una mayor salida de agua desde el acuífero. En términos generales, el balance es prácticamente 0 para ambos años, aunque la infiltración durante el segundo año es un 60% mayor.

Los resultados muestran la forma en la el agua superficial se infiltra y afecta al acuífero aluvial que está directamente conectado con el río, siendo altamente variable en función de las condiciones climáticas. En el año 2015/2016 la infiltración sobre el acuífero se mantiene con valores constantes y en el año 2016/2017 hay episodios con una infiltración intensa, asociados a fuertes avenidas derivadas de los distintos episodios tormentosos.

Conocer este comportamiento es esencial para una correcta gestión, más teniendo en cuenta que se trata de una zona con un potencial riesgo de aparición de vertidos, que podrían afectar a la disolución, precipitación y movilización de sustancias, y donde la estabilización del nivel freático en época estival, en ausencia de extracciones subterráneas, evidencia la salida de agua desde el acuífero hacia otro acuífero donde podrían verse reflejados estos impactos.

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).

HIDROGEOLOGÍA KÁRSTICA DE LA MINA DE UCHUCCHACUA

D. Apaza-Idme¹, A. Pulido-Bosch², F. Sánchez-Martos² y F. Navarro-Martínez²

¹Hidroandes Consultores S.A.C.

*²G.I. Recursos Hídricos y Geología Ambiental. Dpto. de Biología y Geología.
Universidad de Almería, E04120 Almería (España); fnm206@ual.es*

La mina Uchucchacua se sitúa en la sierra Central, provincia Oyón del distrito de Lima (Perú) entre 4.500 y 5.000 m s.n.m., próximo a la divisoria de la cuenca Huaura. Las precipitaciones se producen entre diciembre y marzo, con una media anual de 1160 mm. Su temperatura media anual es 4 °C. En el entorno de la mina Uchucchacua se desarrollan numerosas morfologías kársticas, que favorecen la infiltración y flujo rápido del agua hasta alcanzar las labores más profundas de la mina. La piezometría indica un flujo regional hacia el Sur-Oeste coincidente con el drenaje superficial.

Las labores mineras han modificado el flujo natural, creando conos de depresión y el drenaje regional converge hacia el Túnel Patón, que actúa como conducto de desagüe de mina. Los caudales de bombeo en mina oscilan entre 687 l/s en los meses húmedos y 173 l/s para los meses secos. El drenaje de mina comprende dos sistemas de descarga a superficie (túnel Patón y Huantajalla) que descargan 326 l/s en los meses húmedos, y 146 /s en los meses secos. Las aguas de drenaje más salinas poseen en su mayoría facies sulfatada cálcica y las aguas con facies bicarbonatada cálcica poseen contenidos salinos muy bajos.

La interconexión aguas superficiales-subterráneas se identifica claramente e influye sobre los caudales de descarga hacia la mina profunda, especialmente en la cota 3.780 msnm. La infiltración directa se produce en las dolinas, sumideros, fallas abiertas interconectadas y vetas principales, favoreciendo que se alcancen altas tasas de recarga, estimadas mediante el balance hídrico de mina, en un 60% de las precipitaciones.

El presente trabajo pretende evaluar la incidencia de las aguas meteóricas sobre las labores subterráneas, provocando bombeos altos en los meses húmedos y drásticas reducciones en los meses secos, los cuales se descargan mediante el túnel Patón.

PREPROCESADO DE IMÁGENES MULTIESPECTRALES APLICADO AL CAMPO DE LA AGRICULTURA

**L. O. López¹, G. Ortega¹, F. Agüera², F. Carvajal², P. Carricondo³ y
E. M. Garzón¹**

¹ *Departamento de Informática, Universidad de Almería, Almería, España*

² *Departamento de Ingeniería, Universidad de Almería, Almería, España*

³ *Servicio Periférico de Investigación y Desarrollo basado en Drones, Universidad de Almería, Almería, España.*

lol.teleco@gmail.com

Este trabajo se ha realizado con el objetivo de analizar imágenes multiespectrales y hacer un preprocesado que facilite posteriores tareas de reconocimiento automático, segmentación y clasificación de las plantas de las imágenes. La automatización de los procesos de cultivo es un campo de alto interés, y la aplicación de nuevas tecnologías y procesos al reconocimiento de plantas es un área que presenta grandes oportunidades de mejora. Para conseguir imágenes que posteriormente puedan ser analizadas con menos error, es necesario estudiar y corregir las imágenes en bruto que devuelven las diferentes lentes de la cámara multiespectral.

Las imágenes que devuelven los cinco sensores de la cámara utilizada (Parrot Sequoia) deben ser procesadas por separado y posteriormente integradas en una única imagen multiespectral. Se ha realizado una calibración de las lentes para cada uno de los cinco sensores espectrales, en vista a reducir las distorsiones ópticas y geométricas que presenta cada espectro. El proceso empleado ha sido el de calibración de las lentes, corrección de las distorsiones ópticas de las imágenes de campo, corrección de la perspectiva y finalmente un corregistro manual de las diferentes imágenes en una única imagen hiperespectral. Puede observarse una imagen multiespectral de ejemplo en la figura 1, obtenida tras el preprocesado.

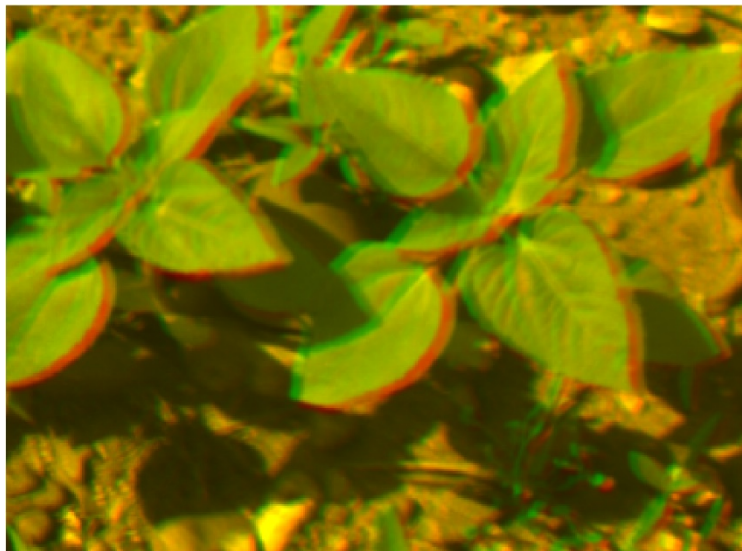


Figura 1. Ejemplo de imagen multiespectral preprocesada.

Los resultados del proceso son prometedores y permiten la posibilidad de realizar sobre las imágenes estudios posteriores de la firma espectral de las diferentes plantas para su clasificación, así como también el análisis de otros elementos de interés como el suelo o las diversas enfermedades que afectan a las plantas.

BUILDING BLOCKS FOR QUANTUM CIRCUITS

F. Orts, G. Ortega and E. M. Garzón

*Informatic Department,
University of Almería,
E04120 Almería (Spain); francisco.orts@ual.es*

Quantum computers work with a special kind of circuits: quantum circuits. These circuits are based on basic operations with quantum gates, and they are in consonance with the quantum features like the superposition. Therefore, the use of optimized basic operations is important to design circuits which have a suitable exploitation of the available resources. In the literature, there are several papers about quantum addition and quantum subtraction of two positive integers, which are the most important basic operations. All these works are focused on getting faster circuits to be used as part of greater circuits, such as a module in Shor's algorithm, a polynomial-time quantum algorithm for the factoring problem. Since Shor's discovery, lots of works have investigated ways of building quantum circuits for this algorithm.

The main contribution of our work is the description of several novel and optimized circuits^{1,2}, which improve the delay of the other state-of-the-arts circuits, being faster than them. For instance, our half subtractor circuit² is a 25% faster than other state-of-the-arts half subtractor circuits. Its depth is only 3, and it does not have any garbage output. Moreover, it has been analyzed and compared with other state-of-the-art approaches using a fair metric. However, the optimization of arithmetic gates is not the only way to improve these circuits. Sometimes, it can be done with new high-level approaches, like using different formats to represent the information. Following this idea, we have designed a circuit to convert from signed binary numbers to two's complement¹ which outperforms the existing ones in terms of delay. Tables 1 and 2 show the result of our converter and half subtractor respectively.

Table 1. A comparison of the different designs of converter circuits.

<i>Circuit</i>	<i>Delay</i>	<i>Normal Inputs</i>	<i>Ancilla Inputs</i>	<i>Garbage Outputs</i>
[Draper et al.]	$\log N + \log N/3 + 9$	$2N$	$5N/4$	0
[Thapliyal et al.]	$\log N + \log N/3 + 4$	$2N$	$5N/4$	0
[1]	$\log N + \log N/3 + 1$	N	$5N/4 - 9$	0

Table 2. A comparison of the different designs of half subtractor circuits.

<i>Circuit</i>	<i>Delay</i>	<i>Quantum Cost</i>	<i>Ancilla Inputs</i>	<i>Garbage Outputs</i>
[Das et al.]	6	5	1	0
[Sarma et al.]	5	5	1	0
[Thapliyal]	4	4	1	0
[2]	3	6	2	0

In our work, once the best circuits have been identified, we have used them to design our proposals and, later, to compare the obtained results by all the studied circuits. Their number of normal input qubits has been reduced since the operations have been simplified. An additional advantage of our proposals is that they do not contain any garbage output; therefore, the circuits could be entangled with any other reversible circuit.

¹ F. Orts, G. Ortega, and E. M. Garzón, *An optimized quantum circuit for converting from sign-magnitude to two's complement*, Quantum Information Processing, vol. 18, no. 11, p. 332, Sep 2019.

² F. Orts, G. Ortega, and E. M. Garzón, *A faster half subtractor circuit using reversible quantum gates*, Baltic Journal of Modern Computing, vol. 7, no. 1, pp. 99–111, 2019.

ESTUDIO DE LA CORRELACIÓN EN LA ESTRATEGIA DE PAIRS TRADING

J. P. Ramos-Requena, M. N. López-García, J. E. Trinidad-Segovia

*Departamento de Economía y Empresa,
Universidad de Almería,
E04120 Almería (España); jpramosre@ual.es*

En este trabajo vamos realizar un estudio de la estrategia de arbitraje estadístico denominada Pairs Trading. Esta estrategia nace en los años 80, con el objetivo de encontrar nuevos modelos de arbitraje utilizando modelos de estadísticos, en un banco de inversión americano.

Pairs Trading consistente en buscar dos acciones cuyos precios históricos se han movido de una manera paralela y proceder a arbitrarlos en el momento que se produzca una desviación. Desde su creación, este tema ha interesado al mundo científicos, publicándose multitud de investigaciones sobre este tema, principalmente enfocadas en mejorar la selección de pares.

En este trabajo vamos a abordar un nuevo enfoque para la selección de pares basado en la correlación. Para ello, estudiamos la correlación a través del exponente de Hurst. En primer lugar, calcularemos el exponente de Hurst de una serie, como la suma acumulada del producto de la rentabilidad (logarítmica) de dos acciones. Si las acciones están altamente correlacionadas, el producto tenderá a ser más positivo que negativo, por lo que la serie tenderá a moverse en la misma dirección, y por tanto, el valor del exponente de Hurst de la serie será cercano a 1. Si las acciones son independientes, el producto será aleatoriamente positivo o negativo, en una proporción aproximadamente igual, por lo que la serie se moverá aleatoriamente hacia arriba y hacia abajo, lo que dará un valor del exponente de Hurst de la serie cercano a 0,5. De esta manera, proporcionamos una forma alternativa para medir el grado de co-movimiento entre dos acciones, que llamamos HP.

Este nuevo método lo planteamos como alternativa al método de la correlación calculado a través del coeficiente de Spearman. Para mostrar el funcionamiento de nuestro método, emplearemos los valores correspondientes al mercado estadounidense a través del índice Dow Jones durante el periodo comprendido entre el 01 de enero de 2000 hasta el 31 de diciembre de 2018, comparando los resultados obtenidos mediante el método de correlación de Spearman y el método HP, mostrando que el nuevo modelo que planteamos es superior.

MODULATION OF OBESITY-ASSOCIATED INFLAMMATION BY DIETARY VEGETABLE FATS IN A MURINE MODEL

C. Rodríguez-García^{1,2}, C. Sánchez-Quesada^{1,2,3}, I. Algarra-López¹, J. J. Gaforio^{1,2,3,4}

¹ *Department of Health Sciences, Area of Immunology, University of Jaén, Campus las Lagunillas s/n, 23071, Jaén, Spain.*

² *Center for Advanced Studies in Olive Grove and Olive Oils, University of Jaen.*

³ *Agri-food Campus of International Excellence (ceiA3), 14005, Córdoba, Spain.*

⁴ *CIBER Epidemiología y Salud Pública (CIBER-ESP), Instituto de Salud Carlos III, 28029, Madrid (Spain); crgarcia@ujaen.es*

Obesity has been defined as an excessive accumulation of body fat, usually accompanied by a low grade of chronic inflammation. This pathology has seen its prevalence increase in recent years in both adult and child populations. This increase is mainly due to the adoption of inappropriate nutritional behaviors by the population. This malnutrition is essentially characterized by having a high-calorie diet, high in sugars and high in saturated fats. People who are overweight, obese, and even those worried about weight gain, are now adopting eating behaviors aimed at both quick weight loss and weight control without considerable dietary changes. Among these behaviors, several non-scientific blogs encourage the consumption of products such as coconut oil, which currently do not present enough scientific evidence on its effect on human health. On the contrary, we can find extra virgin olive oil, the main fat of the Mediterranean Diet, whose consumption has been correlated with a healthy weight control. The aim of this study was to analyze the effects of extra virgin olive oil and coconut oil in a high fat diet high on inflammation using an experimental murine model. Methodology carried out consisted of performing a dietary intervention with a high fat diet in extra virgin olive oil or coconut oil in a murine model. During the intervention period, weekly weighing and analysis of inflammatory markers in serum at endpoint were performed (IL-6, TNF- α and TGF- β). The results showed that, despite a statistically significant increase in weight with respect to control group, in group fed a high fat diet in extra virgin olive oil, the inflammatory process associated with this situation was self-regulating. In contrast, the mice fed a diet high in fat in coconut oil gained weight in a similar way to the control group, but suffered deregulation in the inflammatory process. In conclusion, our results show that a high fat diet high in extra virgin olive oil promotes a regulation of inflammatory markers that could be close to homeostasis, in contrast to coconut oil that promotes a pro-inflammatory status.

KEY SPECIES HAVE A HIGHER EFFECT ON LEAF LITTER DECOMPOSITION AND NUTRIENT CYCLING THAN FUNCTIONAL DIVERSITY

J. Rubio-Ríos¹, N. López-Rojo², J. Pérez², L. Boyero² and J. J. Casas¹

¹*Department of Biology and Geology, Faculty of Experimental Sciences,
Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)*

²*Department of Plant Biology and Ecology, Faculty of Science and Technology,
University of the Basque Country (UPV/EHU), Leioa, E48940 (Spain);
jrr812@ual.es*

Freshwater ecosystems are undergoing long-term anthropogenic impacts worldwide. Human activities —land use changes, agriculture, deforestation or afforestation with non-native species— have a significant impact on biological communities and are causing an unprecedented loss of biodiversity. Although this situation is known to impair ecosystems functioning, how it affects some key components of global biochemical cycles, such as decomposition and nutrient cycling, is not totally understood. Streams flowing through forested areas are fundamentally subsidized by organic detritus, particularly from riparian plants. Thus, biodiversity loss in riparian forests —affecting the quality and/or quantity of leaf litter inputs to streams— has the potential to alter rates of leaf litter decomposition and the associated nutrient cycling in stream ecosystems.

Using a microcosm experiment we examined how loss of plant diversity alters the rates of leaf litter decomposition and nutrient cycling in streams. To do so, rather than focusing on species richness, which has been widely explored, we investigated functional diversity —i.e. the diversity of functional traits. We tested how plant assemblages with high (vs. low) functional diversity and including (vs. lacking) key species, affect to litter decomposition rates, animal and fungi biomass production, and nutrient cycling in streams. We hypothesized that (i) functional diversity (FD) would have a positive effect on fungal biomass and detritivores growth; and consequently (ii) would enhance litter decomposition and nutrient cycling; and that (iii) the presence of a key plant species would be critical for litter decomposition and nutrient cycling and its disappearance can cause large negative effects on rates of these processes.

Our findings partly supported our second hypothesis. Although no FD effects were evidenced on detritivore growth or fungal biomass, our results showed that high FD increased leaf litter decomposition when compared with the deciduous mixture —but not when compared with the evergreen assemblage. No differences on nutrient losses were evidenced among treatments. Furthermore, our third hypothesis was fulfilled since the mixture including a key species exhibited the highest leaf litter decomposition, C, N and P losses, and detritivores growth, as well as, a positive net diversity effect on leaf mass loss and detritivores growth.

Acknowledgements. Rubio-Ríos was supported by FPU grant of the Spanish Ministry of Education, Culture and Sports (reference FPU16/03734).

BIORREMEDIACIÓN DE SUELOS CONTAMINADOS POR ALPECHÍN MEDIANTE LANDFARMING Y COMPOSTAJE: EFECTO DE LA BIOAUMENTACIÓN

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

Área de Microbiología, Dpto. Biología y Geología, CITE II-B, Universidad de Almería, Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3, CIAMBITAL, E04120, Almería, España; jesus_s94k@hotmail.com

El alpechín es el residuo líquido resultante de la extracción del aceite de oliva, cuyo método de gestión desde los años 80 ha sido su acúmulo en balsas de evaporación, muchas de las cuales están mal dimensionadas o presentan una impermeabilización insuficiente, provocando la contaminación de suelos y acuíferos, ocasionada por el carácter fitotóxico y antimicrobiano de dicho residuo. Actualmente estas balsas están en desuso, debido a que la mayoría de las almazaras no generan alpechín al emplear nuevos sistemas de extracción del aceite de oliva. Sin embargo, el impacto de las balsas en los suelos persiste y se requiere de la implantación de tratamientos que conduzcan a la descontaminación de los mismos y su recuperación.

El principal objetivo de este trabajo fue determinar la eficacia de las técnicas de compostaje y landfarming mejoradas mediante bioaumentación para la biorremediación de balsas de evaporación de alpechín. Para la consecución de este objetivo se plantearon como objetivos específicos determinar la extensión de la contaminación de una balsa de evaporación de alpechín, comprobar la eficacia de las técnicas de compostaje y landfarming para el tratamiento de suelos contaminados por alpechines y comprobar el efecto de la bioaumentación con el consorcio microbiano compuesto por *Aspergillus ochraceus* H2 y *Scedosporium apiospermum* H16 en la eficacia de las dos técnicas de biorremediación.

El trabajo se desarrolló en una balsa de evaporación de alpechín con una superficie de 2.400 m² situada en Mora (Toledo). Para determinar el estado inicial de los sedimentos contenidos en la balsa y la extensión de la contaminación provocada por los mismos en el suelo, se tomó una muestra compuesta recogida de 18 puntos de la balsa a dos profundidades, superficie (0 – 45 cm) y profundidad (45 – 90 cm). Los sedimentos de alpechín recogidos de la parte superficial de la balsa fueron mezclados con residuos orgánicos agrícolas y ganaderos y la mezcla se dispuso en cuatro subparcelas (7,5 m x 7,5 m) en las que se aplicaron las estrategias de landfarming y compostaje (dos parcelas para cada tratamiento), con y sin incorporación del consorcio de hongos aislados de los sedimentos de alpechín. Se tomaron muestras al inicio de los tratamientos y con una periodicidad de dos meses durante un total de 9 meses para el análisis de la fitotoxicidad y la ecotoxicidad como parámetros indicadores de contaminación.

En general, en todas las estrategias se constató una reducción de los efectos contaminantes, constatada por la eliminación de la fitotoxicidad y ecotoxicidad, siendo mayor en el compostaje. Además, la eficacia de las estrategias de landfarming y compostaje fue mejorada por efecto de la bioaumentación, especialmente en lo relativo a la eliminación de la fitotoxicidad. Estos procedimientos, por su sencillez y bajo coste, constituyen unas estrategias de elevado potencial para la descontaminación *in situ* de suelos contaminados con alpechín.

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

ESTUDIO IONÓMICO COMPARATIVO DE LA ESPECIE *Jurinea pinnata* SOBRE SUSTRATOS GIPSÓFILOS Y DOLOMÍTICOS

**I. Trujillo-Artero, E. Salmerón-Sánchez, F. Martínez-Hernández,
A. J. Mendoza-Fernández, E. Merlo-Calvente y J. F. Mota-Poveda**

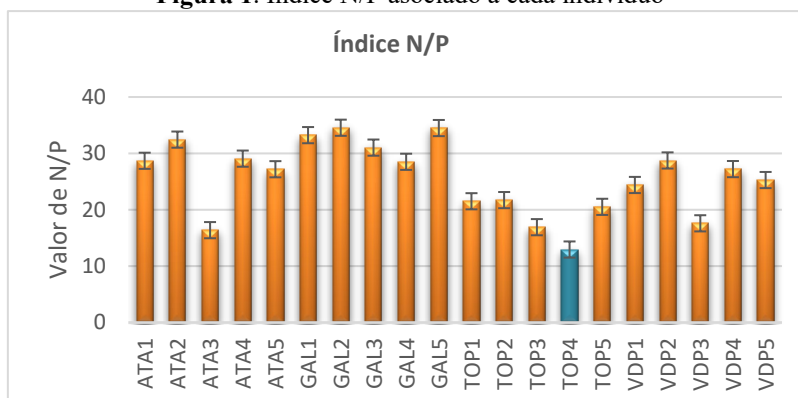
*Departamento de Biología y Geología, Facultad de Ciencias Experimentales,
Universidad de Almería,
E04120 Almería (España); jmota@ual.es*

La especie *Jurinea pinnata* es una de las tres especies pertenecientes al género *Jurinea* que habitan la península ibérica. Este endemismo posee la peculiar capacidad de habitar sustratos gipsófilos¹ y dolomíticos, es decir, posee un carácter bidadárfico. Esta característica hace que esta especie sea una herramienta perfecta para el estudio comparativo de la adaptación de las plantas a estos dos sustratos tan divergentes.

En cuanto a la metodología empleada, se recolectaron cinco individuos de cuatro localizaciones diferentes (dos dolomías y dos suelos gipsófilos) y una muestra de suelo asociada a cada individuo. En relación con los individuos, se discriminaron en tres partes: hojas, raíces gruesas y raíces finas, se molieron y se mandaron a analizar al Servicio de Ionómica del Centro de Edafología y Biología Aplicada del Segura (CEBAS), perteneciente al CSIC. En lo que concierne a las muestras de suelo, fueron tamizadas y enviadas siguiendo el mismo procedimiento que para las plantas. En total, se analizaron las concentraciones de 31 elementos tanto para las muestras de individuos como para las de suelos.

Una vez obtenidos los resultados, se procedió a realizar un análisis estadístico mediante la prueba "t de student" para hallar qué elementos aparecen en unas concentraciones significativamente diferentes, a través de enfrentamientos por pares de las cuatro localidades (dolomía vs. yeso). Se demostró que estas diferencias existen entre elementos como el cadmio y el azufre entre otros. Además, se calculó el índice N/P, para el cual un valor entre 7 y 15 significa un déficit en nitrógeno y mayor de 15, un déficit en fósforo. Este hecho se muestra en la figura 1, en la cual, 19 de los 20 individuos presentan limitación por fósforo, independientemente de si su naturaleza es dolomítica o gipsófila.

Figura 1. Índice N/P asociado a cada individuo



Gracias a los parámetros estudiados, podemos concluir que existen diferencias significativas en los perfiles mineralógicos de ambos sustratos, y por lo tanto, *Jurinea pinnata* ha sido capaz de adaptarse de dos formas diferentes a dos sustratos muy opuestos.

¹ Poveda, Juan Francisco Mota. "Aproximación a la checklist de los gipsófitos ibéricos." *Anales de biología*. No. 31. Facultad de Biología, 2009

TIPOS EMOCIONALES DE ECOSISTEMAS (TEEs): UNA APROXIMACIÓN PARA EVALUAR LAS CONEXIONES HUMANO-NATURALEZA

L. M. Vásquez, M. Expósito-Granados, A. J. Castro, E. Rodríguez-Caballero, M. García-Llorente, D. Alba-Patiño, B. E. Murillo-López, B. Pérez-Cazorla, E. Guirado, G. Castelli, L. Céspedes, B. Martín-López

*Departamento de Biología y Geología, Facultad de Ciencias Experimentales, CAESCG
Universidad de Almería,
E04120 Almería (España); linamariavasquez7@gmail.com*

Una conclusión clave del informe de evaluación global de IPBES es la urgente necesidad de incorporar el papel crítico de la cultura y la identidad en la comprensión de las conexiones humano-naturaleza^{1, 2}. Las conexiones humano-naturaleza pueden ser beneficiosas^{2, 3}, conduciendo a mejoras en el estilo de vida y bienestar humano, y/o perjudiciales, evocando actitudes y/o comportamientos hacia tipos específicos de ecosistemas. Sin embargo, aún no está claro qué factores impulsan y explican la diversidad de estas conexiones beneficiosas y/o perjudiciales. Este estudio se basó en el concepto de emodiversidad⁴ (variedad y abundancia relativa de las emociones que experimentan los seres humanos), se introdujo el concepto de Tipos Emocionales de los Ecosistemas (TEEs) como un enfoque interdisciplinario para identificar y caracterizar la diversidad de emociones y conexiones hacia los ecosistemas. Utilizando un caso de estudio en el Sudeste de España, se realizó un muestreo con más de 250 residentes y turistas en la provincia de Almería, mediante entrevistas se midió la propensión de las personas a experimentar emociones positivas y/o negativas hacia 10 ecosistemas representativos de la región (alta montaña, rambla, humedal, bosque mediterráneo, matorral mediterráneo, litoral protegido y no protegido, desierto, agricultura tradicional e invernaderos). Los resultados mostraron que el grado de conexión, el tiempo que se pasa en la naturaleza y el género pueden conducir a emociones diferentes hacia los ecosistemas. El concepto de TEEs puede servir como una herramienta práctica no identificada previamente para evaluar las conexiones emocionales que las personas tienen con la naturaleza. Este enfoque puede guiar hacia el éxito de los nuevos esfuerzos de conservación y gestión, así como proporcionar nuevo conocimiento complementario a las investigaciones en curso sobre las conexiones humano-naturaleza.

¹ Folke C et al., "Reconnecting to the biosphere" *AMBIO J Hum Environ.* 40 719–738, 2011.

² Ives C D et al., "Reconnecting with nature for sustainability" *Sustain. Sci.* 13 10.1007/s11625-018-0542-9, 2018.

³ Ives C D et al., "Human-nature connection: a multidisciplinary review" *Curr. Opin. Environ. Sustain.* 26-27 106–113, 2017.

⁴ Quoidbach J et al., "Emodiversity and the emotional ecosystem" *J. Exp. Psychol. Gen.* 143(6):2066, 2014.

FINITE MARKOV CHAINS IN PREDICTIVE STUDY OF SPANISH TELEPHONY MARKET

E. Caballero-Ontiveros, J. F. Gálvez-Rodríguez and A. M. Juan-González

*Department of Mathematics, Faculty of Experimental Sciences,
Universidad de Almería,
E04120 Almería (Spain); eco870@inlumine.ual.es*

We analyse market share evolution in relation to the five biggest Spanish telephony companies, using methodology based on Markov chains, which are stochastic processes that obey the principle that, once known the present state of any random phenomenon, its future state does not depend of its past^{2,3}.

Using real data to perform this study obtained from the Spanish CMNC⁴, we predict changes in the following six months, using three markovian models: homogeneous, non-homogeneous and a last model, which considers new registers and drop outs¹.

Our forecast shows market shares from August 2019 to January 2020, starting from real data from July. This data compared to the changes predicted in January 2020 can be seen in the table below:

Table 1. Data from July 2019 and January 2020 predictions using each model

	<i>Movistar</i>	<i>Orange</i>	<i>Vodafone</i>	<i>MasMovil</i>	<i>OMV</i>
<i>June 2019 data</i>	0.3018	0.2540	0.2285	0.1313	0.0844
<i>Homogeneous</i>	0.2997	0.2510	0.2239	0.1352	0.0902
<i>Non- Homogeneous</i>	0.2970	0.2657	0.2138	0.1355	0.0880
<i>Ext. Changes model</i>	0.2916	0.2600	0.2130	0.1399	0.0955

We conclude with an analysis about the changes between the predictions of each of the three models about these telephony companies.

¹ K.C. Chan, *Market share modelling and forecasting using Markov chains and alternative models*, *International Journal of Innovative Computing, Information and Control*, 11 (2015), 1205-1218.

² A.M. Juan-González, *Cadenas de Markov*, Curso de Modelos estocásticos, 2010-2011.

³ A.M. Juan-González, *Probabilidad*, Editorial Universidad de Almería, 2016.

⁴ Website of the Spanish national commission on the markets and the competition (CMNC), <https://data.cmnc.es>

LIPSCHITZ OPERATOR IDEALS AND THEIR RELATIONS WITH TENSOR NORMS

M. G. Cabrera-Padilla

*Department of Mathematics, Faculty of Experimental Sciences,
Universidad de Almería,
E04120 Almería (Spain); m_gador@hotmail.com*

The works carried out by R. Schatten and J. von Neumann, gathered in the famous book by the first author *A Theory of Cross-Spaces*, and the results included in A. Grothendieck's thesis *Produits tensoriels topologiques et espaces nucléaires* and his well-known São Paulo's *Résumé*, which set the beginning of the theory relating a space of bounded linear operators having the ideal structure with a certain tensor norm, made us wonder if a similar theory could be developed in the case of dealing with spaces of Lipschitz operators defined from a pointed metric space to a Banach space, since several classes of ideals consisting of these nonlinear operators have been appearing along the recent years. We answer this question affirmatively by firstly introducing the notion of Lipschitz tensor product of a pointed metric space and a Banach space. On this new space, we define the Lipschitz version of the cross-norms and, after that, we establish the connections between the topological dual of the completion of the Lipschitz tensor product, equipped with a certain Lipschitz cross-norm, with a space of Lipschitz operators and study in which cases such space has the desired structure. Finally, inspired by Grothendieck's "local theory", we take our results to more general contexts.

This is a joint work with Javier Alejandro Chávez Domínguez (University of Oklahoma, U.S.A), Antonio Jiménez Vargas (University of Almería, Spain) and Moisés Villegas Vallecillos (University of Cádiz, Spain).

EXTENSION OF ISOMETRIES ON THE UNIT SPHERE OF $C(K,H)$ **M. Cueto-Avellaneda¹ and A. M. Peralta²**¹*Universidad de Almería, Almería (Spain); emecueto@gmail.com*²*Universidad de Granada, Granada (Spain)*

Inspired by the Mazur-Ulam theorem and following the arguments of P. Mankiewicz ([3]), D. Tingley asked in [4] if every surjective isometry between the unit spheres of two Banach spaces X and Y is necessarily the restriction to the unit spheres of a surjective real linear isometry between the whole spaces. The positive answers obtained to Tingley's problem in a wide range of concrete spaces encouraged L. Cheng and Y. Dong to introduce in [1] the Mazur-Ulam property. A Banach space X satisfies the Mazur-Ulam property if for any Banach space Y , every surjective isometry $\Delta : S(X) \rightarrow S(Y)$ admits an extension to a surjective real linear isometry from X onto Y , where $S(X)$ and $S(Y)$ denote the unit spheres of X and Y , respectively.

Behind their simple statements, Tingley's problem and the Mazur-Ulam property are hard questions which remain unsolved even in the two-dimensional case. We present the recent achievements in [2] related to the quoted extension problems. More concretely, given a compact Hausdorff space K and a real or complex Hilbert space H (with real dimension bigger than or equal to 2), we prove that the space $C(K,H)$ of all H -valued continuous functions on K , equipped with the supremum norm, satisfies the Mazur-Ulam property.

Acknowledgements. Results achieved when the first author was supported by Universidad de Granada, Junta de Andalucía and Fondo Social Europeo de la Unión Europea (Iniciativa de Empleo Juvenil), grant number 6087.

¹ L. Cheng, Y. Dong, On a generalized Mazur-Ulam question: extension of isometries between unit spheres of Banach spaces, *J. Math. Anal. Appl.* **2011**, 377, 464-470.

² M. Cueto-Avellaneda, A.M. Peralta, On the Mazur-Ulam property for the space of Hilbert-space-valued continuous functions, *J. Math. Anal. Appl.* **2019**, 479, 875-902.

³ P. Mankiewicz, On extension of isometries in normed linear spaces, *Bull. Acad. Pol. Sci., Ser. Sci. Math. Astron. Phys.* **1972**, 20, 367-371.

⁴ D. Tingley, Isometries of the unit sphere, *Geom. Dedicata* **1987**, 22, 371-378.

A NEW ESTIMATION METHOD BASED ON FRACTAL STRUCTURES

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

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

Fractal structures were introduced in¹ to characterize non-archimedean quasi-metrization and they are used to study self-similar sets and fractals in general. Moreover, they let us generate probability measures on a space where they are defined (see² and³). Once we know how to construct a probability measure from a fractal structure, by taking advantage of its recursive nature, it does make sense to look for a new way to estimate parameters of a distribution that can be obeyed by some data generated on a space with a fractal structure. That is the main goal of this work. Moreover, we compare this method with the maximum likelihood one.

Let Γ be a finite fractal structure defined on a space and generate a sample of length m from a certain probability distribution, X , on this space. Our goal is to estimate the value of a certain parameter of the distribution. For that purpose, the estimation will try to maximize the probability that, in each element of the fractal structure, there are as much data of the sample as there are actually.

Since Γ is finite, we can denote the number of elements in the level n by l_n , for each $n \in \mathbb{N}$. Note that the random variable that gives us the probability that r of these data belong to a certain element in Γ_n , A_i , is a binomial, $\mathcal{B}(m, p(A_i))$, where $p(A_i) = p([a_i, b_i]) = F_X(b_i) - F_X(a_i)$, for each $i \in \{1, \dots, l_n\}$ and each $n \in \mathbb{N}$ and F_X is the cumulative distribution function of the random variable X . Now, for each level $n \in \{1, \dots, n_M\}$ (where n_M is the maximum level considered in the estimation), we define $h_n(x) = \prod_{i=1}^{l_n} P[X = r_i | X \sim \mathcal{B}(m, p(A_i))]$, where r_i is the number of elements in the sample which belong to A_i . The estimated parameter is the one that maximizes $h(x) = \prod_{n=1}^{n_M} h_n(x)$.

After proving this method for a data sample generated from a normal standard distribution and trying to estimate its typical deviation, if we compare the obtained results with those got by using the maximum likelihood method, we conclude that:

- Finite fractal structures let us give a new estimation method whose results are very similar to those we can get by using maximum likelihood method.
- The higher the maximum level of the fractal structure we consider and the larger the sample length, the better the estimate.
- In the presence of outliers, the new estimation method remains more stable than the maximum likelihood one.

¹ F. G. Arenas, M. A. Sánchez-Granero, *A characterization of non-archimedeanly quasimetrizable spaces*, Rend. Istit. Mat. Univ. Trieste XXX (1999), 21-30.

² J. F. Gálvez-Rodríguez, M. A. Sánchez-Granero, *Generating a probability measure from a fractal structure*, preprint

³ J. F. Gálvez-Rodríguez, M. A. Sánchez-Granero, *Generating a probability measure on the completion of a fractal structure*, Results in Mathematics, 74(3) (2019), 112.

INTERCAMBIO DE CLAVE MULTIUSUARIO EN EL CONTEXTO IOT

M. D. Gómez-Olvera, J.A. López-Ramos y B. Torrecillas-Jover

*Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias Experimentales
Universidad de Almería,
E04120 Almería (España); gomezolvera@ual.es*

El problema del intercambio de clave es central en el ámbito de la Seguridad de la Información. Los protocolos que se usan actualmente podrían no ser seguros en un tiempo¹, debido a los avances que se están realizando en computación, y especialmente ante la posible aparición de la computación cuántica, que podría hacer viable el uso de técnicas de criptoanálisis como el algoritmo de Shor². Por ello, es necesario que se investiguen nuevos ambientes para realizar comunicaciones seguras.

Recientemente propusimos³ una estructura, el anillo de grupo torcido, como alternativa para realizar protocolos criptográficos. En este trabajo, nos centramos en el intercambio de clave en un grupo de usuarios, punto clave en la seguridad de las comunicaciones en IoT (Internet de las Cosas). Proponemos un intercambio de clave entre los mismos, y discutimos el proceso de renovación de clave en este contexto.

¹ Chen, L.; Jordan, S.; Liu, J.-K.; Moody, D.; Peralta, R.; Perlner, R.; SmithTone, D., *Report on Post-Quantum Cryptography*, Vol 8150, US Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, USA, **2016**.

² Gómez Olvera, M.D.; López Ramos, J.A.; Torrecillas Jover, B., *Public Key Protocols over Dihedral Group Rings, Symmetry*, **2019**, Vol 11, 1019.

³ Shor, P.W., *Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer*, *SIAM J. Comput.*, **1997**, Vol. 26, 1484-1509-

INCORPORACIÓN DEL EXPONENTE DE HURST EN EL MODELO FACTORIAL DE FAMA Y FRENCH

M. N. López-García, J. P. Ramos-Requena y M. A. Sánchez-Granero

*Departamento de Economía y Empresa, Facultad de Ciencias Económicas y Empresariales,
Universidad de Almería,
E04120 Almería (España); mlg252@inlumine.ual.es*

El origen del exponente de Hurst se remonta al año 1951 cuando el hidrólogo Harold Edwin Hurst¹ creó un modelo para optimizar la capacidad de almacenamiento de un embalse. Su metodología se basa en la idea de que muchos fenómenos naturales exhiben un comportamiento que pueden ser caracterizado por un proceso aleatorio sesgado, en el cual existe memoria entre las observaciones, es decir, que los eventos de un periodo influyen en todos los siguientes. En la geometría fractal, el exponente de Hurst ha sido definido por H o por H_q . Cuantifica la tendencia relativa de una serie temporal a regresar fuertemente a la media o agruparse en una dirección².

Incorporamos el exponente de Hurst al modelo de 4 factores de Fama y French³ y estudiamos el porcentaje de aparición de cada factor dentro de un mercado americano compuesto por 1500 empresas. Con este estudio queremos, por un lado, comprobar si el exponente de Hurst aporta información significativa para el estudio de la rentabilidad del Mercado y, por otro lado, compara los resultados de los factores Momentum (MOM) y Hurst para asegurarnos que no ofrecen la misma información en el estudio.

$$r_{it} - R_f = \alpha_i + \beta_i(R_{mt} - R_f) + \beta_sSMB + \beta_hHML + \beta_mMOM + \beta_{ht}H + \epsilon_i$$

Table 1. Presencia de cada uno de los factores en el modelo

Factores	2012	2013	2014	2015	2016
HML	44%	43%	79%	77%	69%
SMB	91%	69%	62%	87%	92%
H	83%	86%	83%	88%	74%
MOM	31%	60%	22%	17%	39%
MARKET	2%	3%	3%	4%	1%

Table 2. Presencia de los factores H y MOM en el modelo

	Ninguno	H pero no MOM	MOM pero no H	H y MOM
2012	12%	57%	5%	27%
2013	8%	32%	5%	55%
2014	14%	64%	3%	19%
2015	8%	74%	3%	14%
2016	20%	41%	7%	33%

Como conclusiones, demostramos que el factor H es un factor significativo en el modelo y que la información que aporta al modelo no es la misma que el factor MOM. De hecho, su nivel de significación es similar al de los factores de capitalización (SMB) y al de book-to-market (HML) e incluso mayor que el factor de impulso (MOM).

¹ Hurst H.E. (1951) Long-term storage capacity of reservoirs, Trans. Amer.Soc. Civil Eng., 116, 770-808.

² T. Kleinow. Testing continuous time models in financial markets (2002). Tesis Doctoral. Humboldt-Universität zu Berlin, Wirtschaftswissenschaftliche Fakultät.

³ Fama E.F. and French K.R. (2012) Size, value, and momentum in international stock returns, Journal of Financial Economics, 105, 457-472.

EIGENVALUES OF A DIFFERENTIAL OPERATOR RELATED TO CLASSICAL DISCRETE SOBOLEV ORTHONORMAL POLYNOMIALS

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

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

The classical continuous hypergeometric polynomials (CCHP) have been well known since the nineteenth century. CCHP can be defined as the polynomial solutions to the **hypergeometric differential equation**

$$\sigma(x)y''(x) + \tau(x)y'(x) = \lambda_n y(x), \quad (1)$$

where σ and τ are polynomials with $\deg(\sigma) \leq 2$, $\deg(\tau) = 1$, and $\lambda_n = n(\tau'(x) + \frac{n-1}{2}\sigma''(x))$.

The equation (1) can be rewritten as $\mathbf{B}[y(x)] = \lambda_n y(x)$, where \mathbf{B} is a differential operator. In this way, the CCHP are the eigenvalues of the operator \mathbf{B} and λ_n are the corresponding eigenvalues.

We consider the Sobolev orthogonal polynomials with respect to the inner product

$$(f, g)_S = \int f(x)g(x)d\mu + Mf^{(j)}(c)g^{(j)}(c), \quad j \in \mathbb{N} \cup \{0\}, \quad (2)$$

with $c \in \mathbb{R}$, $M > 0$ and μ is a classical continuous measure with support on the real line (Jacobi, Laguerre or Hermite). It is obvious that the orthogonal polynomials with respect to (2) do not satisfy the hypergeometric equation (1). However, in³ the authors impose conditions so that the polynomials $q_n(x)$, orthonormal with respect to (2), satisfy a (possibly infinite order) differential equation. Later, in¹ and² the differential operator is explicitly built.

Our aim: The orthonormal polynomials with respect to the Sobolev inner product (2) are eigenfunctions of a differential operator and obtaining the asymptotic behavior of the corresponding eigenvalues is the principal goal of this poster. **The results have been published recently in⁵.** We have proved that this behavior is different from the one of λ_n . A first approach of this problem was done in⁴.

Acknowledgements. The authors JFMM and JJMB are partially supported by the Ministry of Science, Innovation and Universities of Spain and the European Regional Development Fund (ERDF), grant MTM2017-89941-P and by Research Group FQM-0229 (belonging to Campus of International Excellence CEIMAR). The author JJMB is also partially supported by the research centre CDTIME of Universidad de Almería and by Junta de Andalucía and ERDF, ref. SOMM17/6105/UGR.

¹ H. Bavinck, in "Differential and difference operators having orthogonal polynomials with two linear perturbations as eigenfunctions", J. Comput. App. Math. **1998**, 92, 85-95.

² H. Bavinck, J. Koekoek, in "Differential operators having symmetric orthogonal polynomials as eigenfunctions", J. Comput. App. Math. **1999**, 106, 369-393.

³ I. H. Jung, K. H. Kwon, G. J. Yoon, in "Differential equations of infinite order for Sobolev-type orthogonal polynomials", J. Comput. App. Math. **1997**, 78, 277-293.

⁴ L. L. Littlejohn, J. F. Mañas-Mañas, J. J. Moreno-Balcázar, R. Wellman, in "Differential operator for discrete Gegenbauer-Sobolev orthogonal polynomials: Eigenvalues and asymptotics", J. Approx. Theory, **2018**, 230, 32-49.

⁵ J. F. Mañas-Mañas, J. J. Moreno-Balcázar, in "Classical Sobolev Orthogonal Polynomials: Eigenvalue Problem", Results Math. **2019**, 74 (4), Art. 144, 12pp.

CAMBIOS CONFORMACIONALES EN EL SITIO ACTIVO DE LA LISOZIMA EN UNA ESTRUCTURA CRISTALINA CON UNA HIDRATACIÓN BAJA

D. Alba-Elena, M. Plaza-Garrido, M. C. Salinas-García y A. Cámara-Artigas

*Departamento de química y física. Universidad de Almería, Agrifood Campus of International Excellence (ceiA3), Carretera de Sacramento s/n, Almería, 04120, España
d.alba.elena@gmail.com*

En estudios anteriores, nuestro grupo de investigación de Estructura de proteínas ha determinado un procedimiento bastante simple para obtener cristales ortorrómbicos de lisozima de alta calidad. Éstos se obtienen a temperatura ambiente y a pH 4.5 mediante la adición de iones de sulfato o fosfato a la disolución de cristalización.¹ A pH 5.5, además de los cristales previamente descritos por nuestro grupo, hemos obtenido un nuevo cristal con una cantidad de solvente muy baja (26.35 %). Este cristal no presenta el plegamiento clásico de la lisozima por lo que la hemos denominado AF-lisozima (alternated folded lysozyme) y pertenece al grupo espacial $P2_12_12_1$ con constantes de la celda $a=30.041$, $b=51.678$, $c=61.528$. Lo más característico de esta estructura es que el núcleo hidrofóbico de la enzima muestra cambios bastante importantes. La cadena lateral del Trp108 se encuentra rotada 90° con respecto a la estructura original, por lo que los residuos vecinos muestran un reordenamiento muy significativo para mantener el empaquetamiento del núcleo hidrofóbico de la proteína. Además de estos cambios conformacionales, se observa también la pérdida del enlace de hidrógeno entre la cadena lateral del Glu35 y la Val109, lo que resulta en un cambio drástico en el extremo carboxilo terminal de la hélice α central ($\alpha 2$). Además, la exposición del Glu35 al solvente incrementa la distancia entre las cadenas laterales de los residuos Glu35 y Asp52 hasta 10 \AA . Estos dos residuos son clave en la actividad de la enzima ya que intervienen en el proceso de hidrólisis de los polisacáridos. Por este motivo, el desplazamiento de dichos residuos tiene como resultado una proteína inactiva. De hecho, el valor de pKa calculado del Glu35 en la AF-lisozima es 4.63, que es inferior al valor medido para el Glu35 (pKa=6.1). Existen numerosos estudios que proponen que el mecanismo de plegamiento de la lisozima no es simple y no tiene lugar a través de un modelo clásico de dos estados.² De hecho, los experimentos de plegamiento realizados a distintas temperaturas con la lisozima sugieren la presencia de dos vías de plegamiento, una rápida y otra lenta, prevaleciendo la vía lenta ($\sim 75\%$).³ En esta vía lenta, las interacciones no nativas permiten la formación de intermedios donde la mayoría de los contactos nativos ya están formados. La AF-lisozima comparte características de este intermedio de plegamiento, y esta singular estructura cristalina podría ayudar a descifrar la formación de los intermedios de plegamiento de la ruta alternativa y más lenta en el plegamiento de la lisozima.

Agradecimientos. Esta investigación ha sido financiada por el Ministerio de Economía y Competitividad y FEDER (EU) [BIO2016-78020-R] y el grupo PAIDI BIO328 Estructura de proteínas. Agradecemos al personal del ESRF (Grenoble, Francia) por su ayuda y colaboración utilizando la línea ID30B [MX2064].

¹ Plaza-Garrido, M., Salinas-García, M. C. & Cámara-Artigas, A. (2018). Acta crystallographica. Section D, Structural biology 74, 480-489.

² Dobson, C. M., Evans, P. A. & Radford, S. E. (1994). Trends in biochemical sciences 19, 31-37.

³ Matagne, A., Jamin, M., Chung, E. W., Robinson, C. V., Radford, S. E. & Dobson, C. M. (2000). Journal of molecular biology 297, 193-210.

POST-SYNTHETIC FUNCTIONALIZATION OF MIL-100(Fe) METAL-ORGANIC FRAMEWORK NANOPARTICLES WITH PHOSPHORYLATED CYCLODEXTRIN DERIVATIVES

G. Cutrone, J. M. Casas-Solvas, L. García-Fuentes, R. Téllez-Sanz and A. Vargas-Berenguel

*Department of Chemistry and Physics, Faculty of Experimental Sciences,
Universidad de Almería,
E-04120 Almería (Spain); jmcasas@ual.es*

Nanosized MIL-100(Fe) metal-organic frameworks (nanoMOFs) are nanocrystals composed by iron(III) and 1,3,5-benzene tricarboxylate ions that are gaining an increasing interest for biomedical applications. They are easy to prepare, biocompatible, *in vivo* well-tolerated in rats, and present a zeotype architecture that defines an inner network of mesoporous accessible by openings of two different sizes. As a result, these nanoparticles can act as “molecular sponges” with an unprecedentedly high loading ability towards drug molecules of different nature (both polar and apolar), within the range of 20-70 wt% depending on the case.¹ However, they have a number of drawbacks that must be addressed in order to turn them into potential drug delivery systems. They are not biorecognizable, show fast drug release kinetics, and present a natural tendency to aggregate in water solutions. Furthermore, they undergo opsonization when injected into the blood stream, a process in which a series of blood proteins (such as albumin, fibrinogen or vitronectin, among others) adsorbs on their surfaces giving a “protein-corona” complex that induces macrophages to eliminate them from the blood circulation.

We present here a post-synthetic protocol for coating MIL-100(Fe) nanoMOFs with engineered cyclodextrin derivatives dually appended with phosphate groups and different functionalities, namely tetraethylene glycol (TEG), polyethylene glycol (PEG) and mannose residues. Phosphate groups act as anchoring moieties as they can firmly interact with the iron sites on the nanoMOFs surface. Polyethylene glycol chains are well-known to change the composition of the protein-corona of different nanomaterials, which is then composed mainly by protein clusterin. This protein does not trigger the immune response of the macrophages, and thus increases the blood circulation time of the nanoparticles in the so-called “stealth effect”.² In addition, mannose appendages are expected to provide the nanoMOFs with biorecognition abilities towards cells presenting mannose-binding lectins (MBLs) on their surface, such as cancer cells.³ Coating of the nanoMOFs, loaded or not with anticancer drug doxorubicin, with these cyclodextrin derivatives was easily achieved in one step in water. The binding affinities of the mannosylated nanoMOFs towards the model lectin Concanavalin A, as well as the internalization extension of all coated nanoparticles by human macrophages, were studied and compared with uncoated MIL-100(Fe) nanoMOFs.

Acknowledgements. Financial support for this work was provided by the European Union through FP7-PEOPLE-2013-ITN project (Grant Agreement no. 608407), and the Spanish Ministry of Economy and Competitiveness (Grant CTQ2017-90050-R).

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

² R. Gref, Y. Minamitake, M. T. Peracchia, V. Trubetsky, V. Torchilin, R. Langer, *Science* **1994**, *263*, 1600-1603.

³ B. Kang, P. Okwieka, S. Schöttler, S. Winzen, J. Langhanki, K. Mohr, T. Opatz, V. Mailänder, K. Landfester, F. R. Wurm, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 7436-7440.

AN APPROACH TO THE TOTAL SYNTHESIS OF OMEGA-3 FATTY ACIDS

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

Department of Chemistry and Physics, Faculty of Experimental Sciences, University of Almería, E04120 Almería (Spain); len622inlumine.ual.es

Polyunsaturated fatty acids (PUFAs)¹ are natural compounds of huge biochemical importance which are also highly demanded by food and pharmacology industries. They occur mainly in plants and microorganisms as mixtures. For this reason, the production of pure samples of these acids is of great concern in biotechnology. A total synthetic route has been designed to prepare omega-3 fatty acids having, at least, four double bonds.² This method is based on Wittig reactions between unstabilized phosphorus ylides and aldehydes. The main challenge to address in this synthesis is the formation of not conjugated *cis* double bonds with intermediate methylene units (**Figure 1**).

The phosphonium salt **3** was chosen as precursor of the chain tail of the ω -3 fatty acids. **A** was easily prepared from commercial alcohol **1**, via the iodide **2** (60%, two steps). On the other hand, acetal-aldehyde **7** was prepared from methoxycyclohexadiene **4**, which was epoxidized in the presence of methanol to give the cyclic hydroxyacetal **5** that was opened using periodic acid, and subsequently treated with methyl orthoformate leading to the acetal ester **6**, as major product. Reduction of **5** with DIBAL-H at -90°C yielded **7** (40% yield for three steps). Finally, Wittig's³ reaction between **3** and **7** was carried out in the presence of KHMDS as base, leading to a twelve-carbon fragment **8** with unconjugated double bonds in the corresponding positions of natural products such as stearidonic (SDA), eicosatetraenoic (ETA), eicosapentaenoic (EPA), docosapentaenoic (DPA) and docosahexaenoic (DHA) acids.

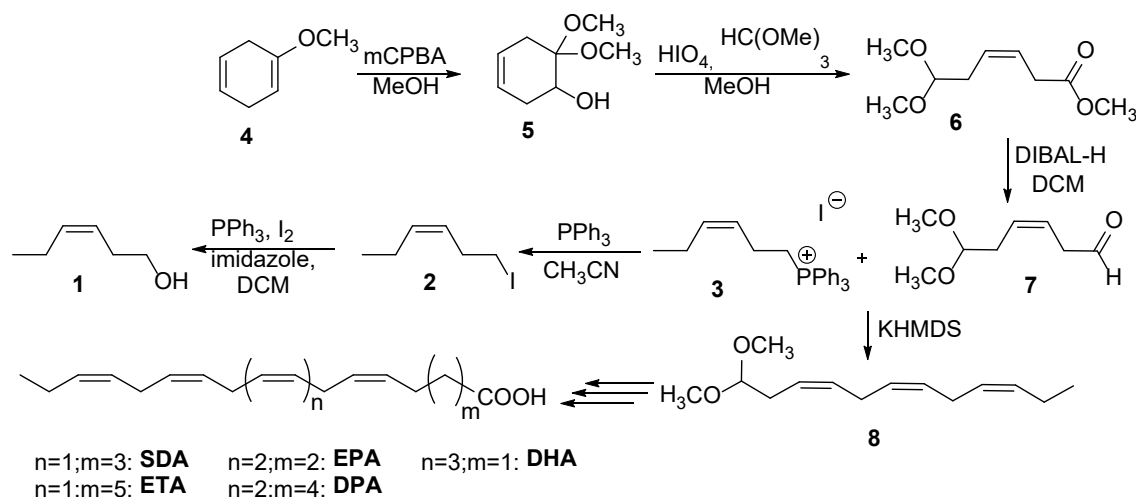


Figure 1. Total synthesis of twelve carbon fragments of omega-3 fatty acids.

¹ Dewick, P. M.: "Medicinal Natural Products: A Biosynthetic Approach"; Third edition ed.; Wiley, 2009.

² Golovanov, A.; Ivanov, I.; V. Groza, N.; I. Myagkova, G. "Synthesis of Rare Polyunsaturated Fatty Acids: Stearidonic and ω -3 Arachidonic" *Chemistry of Natural Compounds* **2015**, 51.

³ Datrika, R.; Kallam, S. R.; Khobare, S. R.; Gajare, V.S.; Kommi, M.; Mohan Branch, H.; Siddaiah, V.; Pratap, T. V. "Stereo selective synthesis of (R)-(-) and (S)-(+)-phoracantholide I from (R)-(+)- γ -valerolactone" *Tetrahedron: Asymmetry* **2016**, 27, 603-607.

NUEVOS MOFs 2D Y 3D BASADOS EN UN LIGANDO TRICARBOXÍLICO

A. García-García¹, Helena Montes² and A. Rodríguez-Diéguez¹

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

²Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, ESCET, Universidad Rey Juan Carlos, 28933 Móstoles, Madrid (España)

Las Redes Metal-Orgánicas o Metal-Organic Frameworks (MOFs) son materiales sintéticos híbridos formados por la unión de iones metálicos y ligandos orgánicos que actúan como espaciadores, creando así estructuras muy diversas bi- y tridimensionales.¹

La importancia de esta clase de materiales ha ido aumentando en las últimas décadas debido a sus propiedades estructurales entre las que destacan gran superficie, alta porosidad y baja densidad cristalina.² Gracias a estas propiedades, estos compuestos son aptos para una gran variedad de aplicaciones como almacén de compuestos gaseosos, separación, catálisis, reconocimiento molecular, magnetismo, sensores químicos, etc.³

En este trabajo se destaca la gran versatilidad de estos compuestos de coordinación, ya que a partir de un mismo ligando se han logrado obtener cuatro estructuras 2D y 3D diferentes al modificar los centros metálicos.

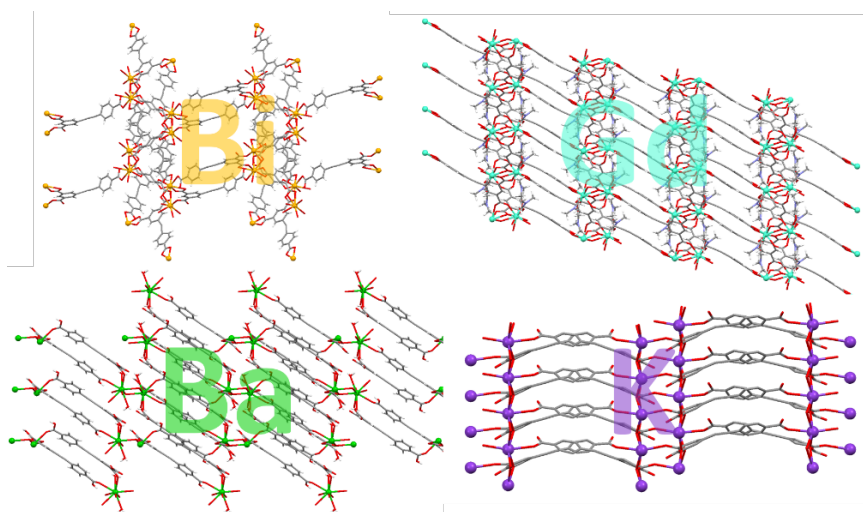


Figura 1. El ligando orgánico H₃CPEIP puede coordinarse de diferentes formas gracias a los tres grupos carboxilato que presenta en su estructura. Gracias a su versatilidad, se han obtenido cuatro MOFs con estructuras diferentes vistas a lo largo del eje *b* cristalográfico.

El ligando orgánico usado, 5-((4-carboxyphenyl)ethynyl)isophthalic acid (H₃CPEIP) presenta tres grupos carboxilato en su estructura, lo que le permite exhibir varios modos de coordinación diferentes. La versatilidad de este ligando junto con los diferentes índices de coordinación de los iones metálicos ha dado lugar a cuatro MOFs 2D y 3D diferentes.

¹ L. Sun, H. Xing, J. Xu, Z. Liang, J. Yu and R. Xu, *Dalton Trans.* **2013**, 42, 5508.

² Z. Liang, J. Du, L. Sun, J. Xu, Y. Mu, Y. Li, J. Yu and R. Xu, *Inorg. Chem.* **2013**, 52, 10720.

³ J. Xu, L. Sun, H. Xing, Z. Liang, J. Yu and R. Xu, *Inorg. Chem. Commun.* **2011**, 14, 978.

COMPUESTOS DE COORDINACIÓN MULTIFUNCIONALES BASADOS EN LIGANDOS AROMÁTICOS NITROGENADOS CON GRUPOS CARBOXILATO

A. A. García-Valdivia,¹ B. Fernández,² A. Rodríguez-Diéguez.¹

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

²Instituto de Parasitología y Biomedicina "López-Neyra" (CSIC). Avd. del Conocimiento, s/n, 18100, Armilla, Granada, España.
antonioandresgarval@correo.ugr.es

En las últimas décadas la Química de la Coordinación se ha convertido en uno de los campos más importantes de la Química Inorgánica. Esta área tiene como objetivo estudiar los compuestos de coordinación en los que un grupo de moléculas, átomos o iones denominados ligandos forman una unión con un ión o átomo central. La importancia de estos compuestos se encuentra en su capacidad de presentar una amplia gama de propiedades (adsorción, catálisis, biomedicina, magnetismo y/o luminiscencia entre otras)¹, las cuales, en la mayoría de los casos, coexisten complementándose, mostrando así un fuerte potencial a la hora de buscar aplicaciones a estos materiales multifuncionales.

En base a lo dicho se han sintetizado una gran variedad de compuestos de coordinación basados en un gran abanico de ligandos (Tabla 1), demostrándose la gran capacidad para obtener materiales con unas excelentes propiedades.

Tabla 1. Diversidad de ligandos utilizados y el número de compuestos de la misma familia.

Nombre del Ligando	Núm. de compuestos	Propiedades relacionadas
Ácido 1-metilimidazol-5-carboxílico	4	Magnetismo y Luminiscencia
Ácido 5-Bromonicotínico	4	Magnetismo y Luminiscencia
Ácido 1H-indazol-4-carboxílico	5	Magnetismo y Prop. Biológicas
Ácido 1H-indazol-5-carboxílico y ligandos nitrogenados	2	Adsorción y Luminiscencia
Ácido 1H-indazol-5-carboxílico	2	Magnetismo y Prop. Biológicas

Agradecimientos. A la Junta de Andalucía por el Proyecto (FQM-1484)

¹ (a) Calahorro, A. J.; López-Viseras M.; Salinas-Castillo, A.; Fairen-Jimenez, D.; Colacio, E.; Cano, J.; Rodríguez-Diéguez A. *CrystEngComm*, **2012**, 14, 6390-6393. (b) Zheng, J.; Cui, X.; Yang, Q.; Ren, Q.; Yang, Y.; Xing, H. *Chem. Eng. J.*, **2018**, 354, 1075-1082. (c) Parmar, B.; Patel, P.; Kureshy, R.I.; Khan, N. H. *Chem. Eur. J.*, **2018**, 24, 15831-15839. (d) Oliveri V, Puglisi A, Vecchio G. *Dalton Trans.*, **2011**, 40(12), 2913-2919.

PROPAGATION OF PESTICIDES FROM REGENERATED WATER TO THE CROPS BY IRRIGATION

**M. García-Valverde, M. J. Martínez-Bueno, F. J. Díaz-Galiano,
M. M. Gómez-Ramos, A. Goday, A. R. Fernández-Alba**

Department of Chemistry and Physics, Pesticide Residues Research Group, University of Almería, S/N 04120 Almería (Spain); mgv644@ual.es

Water scarcity will increase in the future because of climate change. In this way, water resources will decrease, so we will need to find new water sources. It is known that agriculture is the biggest consumer water, and nowadays treated wastewater is being an alternative to fight and to avert water scarcity¹. However, this treated wastewater can incorporate many emerging contaminants (ECs)², like pesticides or drugs, so that, it is very important to evaluate the propagation and absorption of these in crops and the foods produced with their use.

Thus, the overall objective of this work was to estimate the potential use or limitations of the reuse of reclaimed water in the production of vegetable foods (cabbage, carrot and lettuce). For that, this study assesses the propagation and the accumulation of pesticides in soils and several crops irrigated with reclaimed water doped at concentrations similar than those expected in agricultural irrigation systems. To achieve these objectives, a multiresidue method based on QuEChERS (Quick, Easy, Cheap, Effective and Rugged) extraction was optimized and validated to extract plant materials and soil. A solid-phase extraction method was also validated to analyse reclaimed water samples. The determination of pesticides was carried out using an ultra-high-performance liquid chromatography system coupled to triple quadrupole tandem mass spectrometry (UHPLC-QqQ-MS/MS).

Finally, this methodology was applied to evaluate the presence and the absorption of pesticides in a crop irrigated with two types of regenerated wastewater (secondary and tertiary treatment), by two types of different irrigation (drip and sprinkler), and cultivated in two types of soil (with and without clay content).

Acknowledgement. To the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities for the Project ROUSSEAU (CTM2017-89767-C3-3-R). M. García-Valverde acknowledges the pre-doctoral fellowship from Spanish Ministry of Science, Innovation and University (MICINN) (PRE2018-087072).

¹ Picó, Y.; Alvarez-Ruiz, R.; Alfarhan, A. H.; El-Sheikh, M. A.; Alobaid, S. M.; Barceló, D., Uptake and accumulation of emerging contaminants in soil and plant treated with wastewater under real-world environmental conditions in the Al Hayer area (Saudi Arabia). *Science of The Total Environment* **2019**, 652, 562-572.

² Martínez-Piernas, A. B.; Polo-López, M. I.; Fernández-Ibáñez, P.; Agüera, A., Validation and application of a multiresidue method based on liquid chromatography-tandem mass spectrometry for evaluating the plant uptake of 74 microcontaminants in crops irrigated with treated municipal wastewater. *Journal of Chromatography A* **2018**, 1534, 10-21.

INTERACCIÓN DE COMPLEJOS DE Ru(II) FRENTE A ADN PLASMÍDICO (pKSII) BAJO IRRADIACIÓN UV-VIS

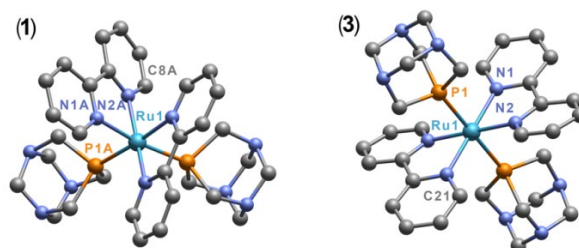
A. Hernández-Zanoletty, A. Romerosa-Nievas, F. Scalambra y F. García-Maroto

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

La búsqueda de nuevos fármacos antitumorales con menor toxicidad y un mayor espectro de actividad ha interesado a muchos investigadores en las últimas décadas hacia el estudio de nuevos complejos metálicos, entre ellos los complejos de rutenio(II).¹ Una posibilidad fascinante que ofrecen los complejos de Ru(II) es la de obtener agentes citotóxicos que sean activos sólo cuando se irradian con luz de longitud de onda específica.

En este trabajo se ha estudiado la interacción de cuatro complejos de Ru(II) frente a ADN plasmídico (pKSII) bajo irradiación UV-Vis. Los compuestos estudiados fueron: *cis*-[Ru(dcbpy)₂(PTA)₂]Cl₂ (**1**), *cis*-[Ru(bpy)₂(PTA)₂]Cl₂ (**2**), *trans*-[Ru(bpy)₂(PTA)₂](CF₃SO₃)₂ (**3**) y *cis*-[Ru(bpy)₂(PTA)(H₂O)](CF₃SO₃)₂ (**4**) (PTA = 1,3,5-triaza-7-fosfaadamantano; bpy = 2,2'-bipiridina; dcbpy = 4,4'-dicarboxy-2,2'-bipiridina) (Figura 1). Los productos de reacción se analizaron mediante electroforesis en geles de agarosa para detectar cambios en la movilidad del plásmido que revelen la interacción [Ru]:ADN.

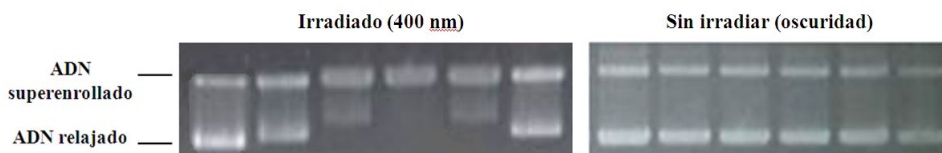
Figura 1. Estructura molecular de los complejos (**1**) y (**3**).



Como resultado, se observa que (**1**) y (**3**) presentan actividad tras ser irradiados, pero no en oscuridad, (**2**) no es activo y (**4**) es activo en ambos casos. También se pudo determinar que ninguno de los complejos puede activarse previamente sólo con luz, es decir, que la reacción requiere la irradiación simultánea en presencia del ADN.

Utilizando el cambio producido en la movilidad electroforética del ADN como medida de la extensión de la reacción que da lugar al producto [Ru]:ADN (Figura 2), los complejos más activos fueron (**3**) y (**4**). Éstos se sometieron a experimentos adicionales, determinándose que ambos complejos necesitan oxígeno para ser activos.

Figura 2. Electroforesis en gel de agarosa del complejo (**3**) con y sin irradiación.



Por último, se comprobó que la actividad de los complejos es creciente con el tiempo de irradiación, y se determinaron los máximos de absorbancia de la reacción [Ru]:ADN mediante espectroscopia UV-Vis.

¹ D.Gopalakrishnan, S.Srinath, B.Baskar, S.Bhuvanesh, M.Ganeshpandian, *Appl. Organometal Chem.* **2018**, *33*, 1-16.

DEVELOPMENT OF A METHOD OF ANALYSIS FOR EVALUATING THE CONTAMINATION OF EDIBLE OILS WITH MINERAL OILS WITH GC-FID

**J. L. Hidalgo-Ruiz¹, M. M. Rovira-Cruz¹, F. J. Arrebola¹, J. L. Martínez-Vidal¹,
A. Garrido-Frenich¹, J. A. Tello²**

¹*Department of Chemistry and Physics, Analytical Chemistry Area, University of Almería, Center for Research in Mediterranean Intensive Agrosystems and Agri-Food Biotechnology (CIAIMBITAL), Agrifood Campus of International Excellence ceiA3, Carretera de Sacramento s/n, E-04120 Almería, Spain.*

²*Laboratorio Tello S.L. C/ La Iruela, 8 E-23009 Jaén.
jhr228@ual.es, Phone: +34-950-214-720, Fax: +34-950-015-008.*

Mineral oils are products obtained from the distillation of petroleum and are mainly composed of hydrocarbons, or synthetically produced from coal, natural gas and biomass. Lubricating oils for food use are a complex mixture of these hydrocarbons (MOH).

Mineral Oils Saturated Hydrocarbons (MOSH) accumulate in tissues, lymph nodes, spleen and liver and can cause microgranulomas,¹ and Mineral Oils Aromatic Hydrocarbons (MOAH), are considered as possible carcinogenic and mutagenic substances. Thus, the contamination of edible oils by MOHs is becoming of great importance.

The European Commission has established a legal limit of the group of MOH, an unresolved chromatographic hump below the natural hydrocarbons of the sample ranging from C10 to C56, of 50 mg/kg in sunflower oils¹. In the present study an analytical method based on an offline solid phase extraction (SPE) has been performed a silver nitrated silica gel for the extraction and separation prior to the chromatographic analysis of MOSH and MOAH from edible oils.

The analysis of the extracts was performed using a large volume injection method (LVI) by gas chromatography with flame ionization detector (GC-FID). The method was fully validated and the detection limit was 1 mg/kg. Suitable recoveries were obtained ranging from 80 to 110%. Intra and inter-day precision were also evaluated and relative standard deviation was lower than 20%. The validated method has been applied to more than 20 samples of different types of edible oils (olive oil, sunflower oil, etc...) detecting MOSH and MOAH in the majority of them.

Acknowledgements. The authors gratefully acknowledge to the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities and FEDER (project ref. RTC-2017-6170-2) for financial support. The authors are also very grateful for the support provided by Laboratorio Tello.

¹ EC, 2009. Commission Regulation (EC) No 1151/2009 of 27 November 2009 imposing special conditions governing the import of sunflower oil originating in or consigned from Ukraine due to contamination risks by mineral oil and repealing Decision 2008/433/EC; L 313. pp 36–40.

ESTUDIO DE LA INTERACCIÓN DE LISOZIMA CON COLORANTES SULFONADOS

C. M. López-Berenguel, M. Andújar-Sánchez y E. Ortiz-Salmerón

*Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales,
Universidad de Almería,
E04120 Almería (Spain); CLB138@inlumine.ual.es*

Una gran variedad de colorantes es utilizada hoy en día en varios sectores de la industria. La elevada toxicidad que presentan muchos de los colorantes utilizados tanto para el medio ambiente como para los seres vivos ha provocado que sea objeto de estudio su interacción con proteínas^{1,2}. En este trabajo se analiza la interacción de los colorantes Azul de Bromofenol, Azul de Bromotimol, Azul de Coomassie, Rojo de Fenol, Rojo Cresol y Naranja de Metilo con la lisozima de clara de huevo (**Figura 1**) mediante la realización de medidas de fluorescencia a diferentes temperaturas. Los resultados obtenidos establecen un quenching estático para todas las uniones de la proteína con los colorantes estudiados.

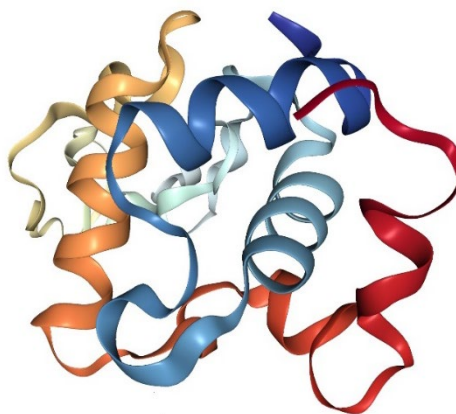


Figura 1. Estructura de la lisozima de clara de huevo obtenida del Protein Data Bank, (código 2vb1).

Además, a partir de las medidas de fluorescencia se calculan los parámetros termodinámicos ΔH , ΔS y ΔG , revelando una elevada afinidad y presencia de un único sitio de unión. A partir de los signos de los parámetros termodinámicos obtenidos se establece la presencia de interacciones electrostáticas específicas para la unión de lisozima con Azul de Bromotimol, Rojo Cresol, Naranja de Metilo y Azul de Coomassie, interacciones hidrofóbicas para Rojo de Fenol y fuerzas de Van der Waals y puentes de hidrógeno para Azul de Bromofenol.

Mediante el complejo formado lisozima-colorante se determina que la eficiencia de transferencia de energía es menor al límite superior de 10 nm, estableciendo una elevada transferencia de energía entre el donante y el aceptor en todos los casos.

¹ Millan, S.; Satish, L.; Kesh, S.; Chaudhary Y. S.; Sahoo, H. *J. Photochem. And Photobiol. B: Biology* **2016**, *162*, 248-257.

² Yue, Q.; Niu, L.; Li X.; Shao, X.; Xie, X. *Song, Z. J. Fluoresc.* **2008**, *18*, 11-15.

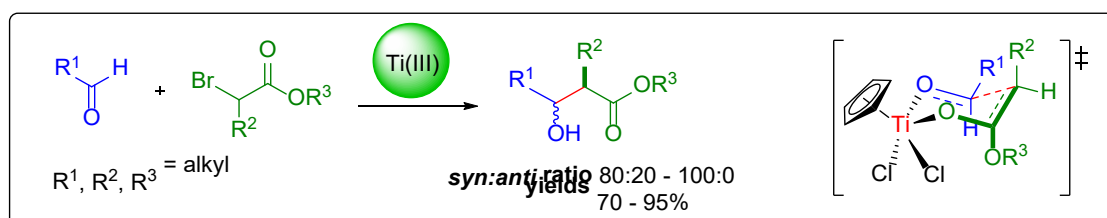
REACCIÓN DE REFORMATSKY DIASTEREOSELECTIVA MEDIADA POR DICLOROCICLOPENTADIENILTITANIO (III)

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

Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales, Ceia3, Universidad de Almería, E04120 Almería (España); pepaloma91@hotmail.com

La reacción de Reformatsky se considera uno de los métodos más útiles y robustos para la formación de enlaces C-C. Se basa en la adición de un intermedio organometálico derivado de un α -haloéster a un aldehído o cetona, para formar un β -hidroxiéster. Aunque la selectividad y los rendimientos pueden ser bajos debido a su naturaleza heterogénea, es una excelente alternativa para las reacciones de condensación aldólica.¹ Por lo tanto, el desarrollo de nuevas versiones diastereoselectivas basadas en complejos organometálicos solubles suscita gran interés, ya que tendría una aplicación inmediata en la síntesis total de productos naturales.

En el presente trabajo, hemos demostrado que el complejo de titanoceno tipo semi-sandwich CpTiCl_2 es un excelente sistema para llevar a cabo reacciones Reformatsky entre aldehídos y α -haloésteres (Esquema 1).



Esquema 1. Esquema de reacción Reformatsky mediada por CpTiCl_2 y posible estado de transición.

De esta manera, siguiendo el procedimiento descrito previamente por nuestro grupo de investigación para las reacciones tipo Barbier,² hemos sintetizado β -hidroxiésteres con altos rendimientos, empleando un amplio rango de aldehídos y α -haloésteres. Inesperadamente, hemos obtenido mayoritaria o exclusivamente el isómero *syn*, en contraste con la baja diastereoselectividad, o preferencia hacia el isómero *anti* previamente descrita cuando este tipo de reacción se realiza con el reactivo de Nugent-Rajanbabu (Cp_2TiCl).³ Este comportamiento sugiere que la pérdida de un Cp podría aumentar la capacidad de coordinación del titanio, dejando sitios de coordinación extra para el sustrato y permitiendo estados de transición más compactos tipo “Zimmerman-Traxler”. Además, el sistema es compatible para otros grupos funcionales, ya que se han realizado exitosamente pruebas con cetonas y α -halonitrilos.

En conclusión, las condiciones suaves y sostenibles de reacción, el fácil manejo de los reactivos, la compatibilidad con un amplio abanico de sustratos y los buenos resultados demuestran el poder de este método y allana el camino para seguir investigando en este nuevo sistema diastereoselectivo para la reacción de Reformatsky.

Agradecimientos. Agradecemos al “Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3” y al “Ministerio de Economía y Competitividad” (Project CTQ2015-70724-R) por el apoyo económico.

¹ Pellissier, H. *Beilstein J. Org. Chem.* **2018**, *14*, 325-344

² López-Martínez, J. L.; Torres-García, I.; Rodríguez-García, I.; Muñoz-Dorado, M.; Álvarez-Corral, M. *J. Org. Chem.* **2019**, *84*, 806-816

³ Parrish, J. D.; Shelton, D. R.; Little D. *Org. Lett.* **2003**, *5*, 3615-3617.

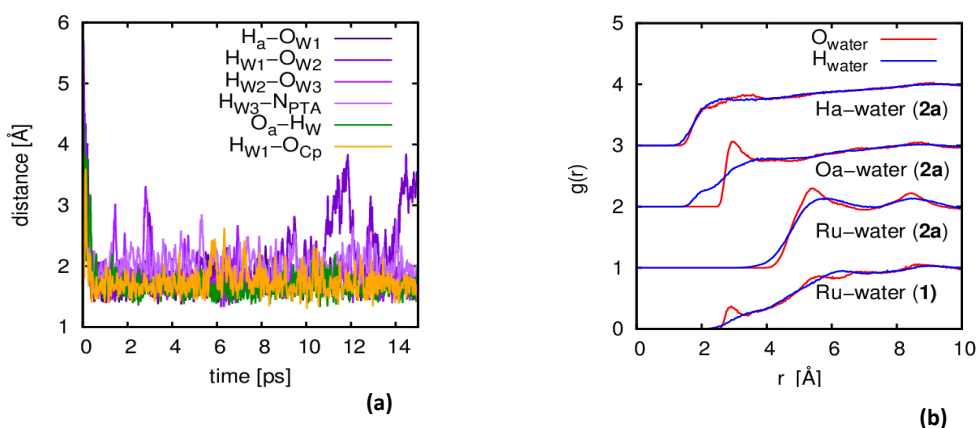
PROCEDURE TO STUDY THE INTERACTION OF WATER MOLECULES WITH CATALYTIC INTERMEDIATES BY AIMD AND NEUTRON SCATTERING

B. López, F. Scalambra, A. Romerosa, N. Holzmann, S. Imberti and L. Bernasconi

*Department of Inorganic Chemistry-CIESOL, Faculty of Experimental Sciences,
Universidad de Almería,
E04120 Almería (Spain); belenlopezs1993z@gmail.com*

Complex $[\text{RuCp}(\text{PTA})_2(\text{H}_2\text{O}-\kappa\text{O})]$ (**1**) (PTA=1,3,5-triaza-7-phosphaadamantane) was found to be a good and versatile catalyst for the isomerization of lineal primary allylic alcohols in water.¹ The made studies showed that water is determinant in the reaction: it plays a role as solvent but also interacting with the intermediates of the reaction, determining the reaction conditions and reaction conversion.² NMR spectroscopy is poor useful for determining the interactions with water when it is the solvent. Additionally, theoretical approaches like DFT calculations are inadequate to obtain a detailed understanding of the catalytic mechanism when solvent is involved by non-covalent or weak-covalent interactions. Neutron Scattering measurement along with the EPSR (Empirical Potential Structure Refinement) provide a convenient method to determine experimentally the water molecule position around the solute and the average positions of the hydrogen atoms in water if the compounds are stable enough to be studied. The obtained results could be contrasted with AIMD (ab initio molecular dynamics) calculations, which provides a detailed picture of how water interact with solute and the evolution of the system in time. The combination of NMR with AIMD and EPSR provided noteworthy information on how water molecules interact with the products obtained by reaction of propanol with intermediate (**2a**) in the catalytic mechanism for the isomerization of allylic alcohols with **1** (**Figure 1**).³

Figure 1. (a) Distance evolution during an AIMD simulation for relevant water molecules forming a water chain (purple) and connection to the Cp water network (orange), as well as the water molecule coordinating to the allylic hydroxyl oxygen O_a (green) for **2a**. (b) Atom-atom radial distribution function (RDF) for water (O_{water} in red, H_{water} in blue) around the ruthenium atom in catalyst **1** and catalyst with substrate in configuration **2a**.



Acknowledgements. Thanks are also given to Junta De Andalucía PAI-research group FQM-317 and COST Action CM1302 (WG1,WG2).

¹ Scalambra, F.; Serrano-Ruiz, M.; Romerosa, A., *Dalton Trans.* **2017**, 46, 5864 - 5871

² Scalambra, F.; Serrano-Ruiz, M.; Romerosa, A., *Dalton Trans.* **2018**, 47, 3588–3595

³ Scalambra, F.; Holzmann, N.; Bernasconi, I.; Imberti, S.; Romerosa, A., *ACS Cat.* **2018**, 8, 3812-3819

CÓMO DETERMINAR PLAGUICIDAS POLARES EN NARANJA Y TOMATE MEDIANTE UHPLC-ORBITRAP-MS

L. Manzano-Sánchez, R. Romero-González, I. Domínguez, J.L. Martínez-Vidal y A. Garrido-Frenich

*Departamento de Química y Física, Área de Química Analítica,
Universidad de Almería,
E04120 Almería (España); lms123@inlumine.ual.es*

Actualmente, el análisis de plaguicidas de alta polaridad no suele incluirse en métodos multiresiduo, debido a las características físico-químicas de estos compuestos, por lo que se requiere un método de análisis específico. Es por ello que los laboratorios tratan de desarrollar y aplicar un método pluriresiduo que englobe el mayor número de plaguicidas polares.

Los analitos objeto de estudio fueron: fosetil-Al, fungicida sistémico efectivo para controlar mildiu en una gran variedad de cultivos¹; etefón, fitorregulador del crecimiento muy usado tanto para promover la maduración de productos vegetales antes de su cosecha como para acelerar su maduración post-cosecha², y su metabolito principal ácido 2-hidroxietilfosfónico (HEPA). Estos compuestos organofosforados son nocivos afectando principalmente al sistema nervioso central mediante la inhibición de la acetilcolinesterasa en las terminaciones nerviosas³, por lo que es necesario su estudio y control analítico.

El objetivo de este trabajo ha sido la determinación de los residuos de plaguicidas, anteriormente citados, en naranja y tomate mediante cromatografía de líquidos de ultra alta eficacia (UHPLC) acoplada a un analizador Orbitrap. En este sentido, la espectrometría de masas de alta resolución ofreció exactitud de masa como ventaja para trabajar a bajo rango de m/z .

Para la separación cromatográfica se han evaluado distintas fases estacionarias: Obelisc N, HILIC-A, HILIC-B, Zorbax HILIC Plus, proporcionando la fase estacionaria Torus DEA la mejor separación de los compuestos.

La extracción de los analitos se basó en el método QuPpe (Quick Polar Pesticides Method)⁴ con ligeras modificaciones, entre las que destacan la adición de 1,5 mL de agua para naranja y el empleo de Polytron.

La determinación y cuantificación de etefón, HEPA y fosetil aluminio fue validada observándose adecuada linealidad en el rango de concentraciones 25-1000 $\mu\text{g/L}$ ($R^2 > 0,99$), efecto matriz para su determinación en naranja y tomate, obteniendo valores de veracidad óptimos (70,0 – 115,4 %), así como precisión intradía e interdía, con valores de desviación estándar relativa inferiores al 20%. Los límites de cuantificación fueron para etefón en naranja de 50 $\mu\text{g/kg}$, mientras que para el resto de matrices y demás analitos objeto de estudio fue 25 $\mu\text{g/kg}$, obteniendo límites inferiores a los valores de límite máximo de residuo (MRL).

Finalmente, el método analítico fue aplicado al análisis de muestras reales (10 naranjas y 10 tomates) pero las concentraciones de los analitos objeto de estudio fueron inferiores al límite de cuantificación.

¹ D.G Ouimette, and M.D. Coffey, *Plant Dis.* **1989**, 73, 212–215.

² A. Bauer, J. Luetjohann, S. Rohn, J. Kuballa, E. Jantzen. *Food Control*. **2018**, 86, 71–76

³ M.A. Karam, G. Ramírez, P. Bustamante-Montes, J.M Galván. *Ciencia Ergo Sum*, **2004**, 1, 246-254.

⁴ QuPpe Method Versión 10.1: [http://www.eurlpesticides.eu/userfiles/file/EurlSRM/meth_QuPpe_PO_V10_1\(1\).pdf](http://www.eurlpesticides.eu/userfiles/file/EurlSRM/meth_QuPpe_PO_V10_1(1).pdf)

USE OF CpTiCl_2 IN THE SYNTHESIS OF MARINE TERPENOIDS ANALOGS

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

*Dept. Chemistry and Physics, CeiA3, Faculty of Experimental Sciences,
University of Almería,
E04120 Almería (Spain); mariaml165@gmail.com*

Endoperoxides are a type of compounds that contain a very reactive 1,2-dioxigenated ring, with a strong propensity to disconnect into free radicals, which initiates a huge range of biological activities, such as the antimalarial activity of artemisinin.

A particular type of cyclic endoperoxides, having a terpenic structure and interesting properties such as cytotoxicity against carcinomas or lymphomas and activity against some parasites has been isolated from some marine sources. Some of these compounds are (+)-muqubilone, aikupikoxide A and aikupikoxide C.¹

The main objective of this project has been the synthesis of several analogs of the endoperoxides with marine origin nuapapuin A, nuapapuin B and *epi*-nuapapuin B. These compounds were isolated from the marine sponge *Negombata corticata*² and have a strong antiparasitic activity and a potent cytotoxic activity.

Using a new *ad-hoc* developed synthetic methodology, as well as some other common reactions, we achieved the first total synthesis of *iso*-negombatolactone, structurally related with those natural peroxides, although lacking cytotoxic activity, possibly due to the absence of the 1,2-dioxane ring.

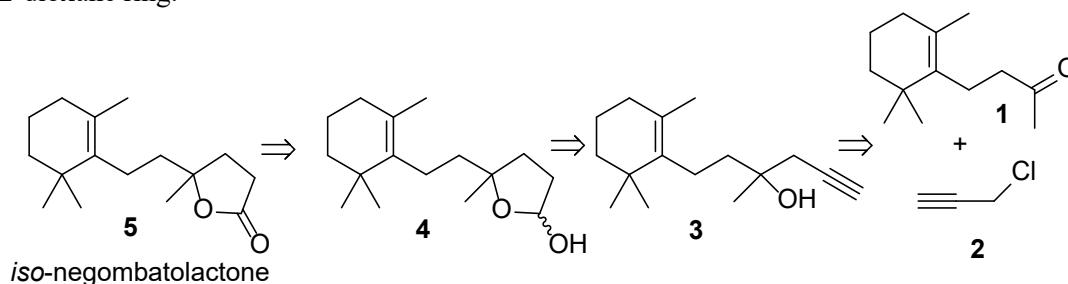


Figure 1. *Iso*-negombatolactone retrosynthesis

In this way, we describe here a straightforward total synthesis of *iso*-negombatolactone by the use of a Barbier³ reaction between dihydro- β -ionone (**1**) and propargyl chloride (**2**) mediated by CpTiCl_2 , prepared *in situ* from the commercial reagent CpTiCl_3 . Hydroboration-oxidation of **3** gave the lactol **4**, which was easily transformed into *iso*-negombatolactone after oxidation with Fetizon's reagent.

¹ Rubio, B. K.; Tenney, K.; Ang, K.-H.; Abdulla, M.; Arkin, M.; McKerrow, J. H.; Crews, P. "The Marine Sponge *Diacarnus bismarckensis* as a Source of Peroxiterpene Inhibitors of *Trypanosoma brucei*, the Causative Agent of Sleeping Sickness" *J. Nat. Prod.* **2009**, *72*, 218.

² Chao, C.-H.; Chou, K.-J.; Wang, G.-H.; Wu, Y.-C.; Wang, L.-H.; Chen, J.-P.; Sheu, J.-H.; Sung, P.-J. "Norterpeneoids and Related Peroxides from the Formosan Marine Sponge *Negombata corticata*" *J. Nat. Prod.* **2010**, *73*, 1538.

³ López-Martínez, J. L.; Torres-García, I.; Rodríguez-García, I.; Muñoz-Dorado, M.; Álvarez-Corral, M. "Stereoselective Barbier-Type Allylations and Propargylations Mediated by CpTiCl_3 " *J. Org. Chem.* **2019**, *84*, 806.

LA IMPORTANCIA DE LOS ARTEFACTOS DE CLONACIÓN EN LAS PROPIEDADES BIOFÍSICAS DE LAS PROTEÍNAS RECOMBINANTES

M. Plaza-Garrido, M. Salinas-García and A. Cámara-Artigas

*Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales, CEIA3, CIAMBITAL, Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
mpg159@inlumine.ual.es*

En los últimos 30 años el número de estructuras en el Protein Data Bank (PDB) ha experimentado un crecimiento exponencial gracias a la facilidad con la que se pueden producir las proteínas a partir de los sistemas de expresión heteróloga y la posibilidad de expresarlas unidas a “etiquetas” que facilitan su purificación. Un ejemplo típico es la expresión de proteínas con una etiqueta de histidinas que se une a una columna de níquel-NTA y que permite la purificación de la proteína desde el extracto a altos niveles de pureza en un solo paso cromatográfico. Esta etiqueta se elimina posteriormente de la proteína de interés mediante corte con una proteasa que actúa sobre una secuencia que es específica para su actuación. En ocasiones esto da lugar a que aparezcan aminoácidos no codificados en la secuencia de interés que se convierten en “artefactos de clonación”. Cómo estos pueden afectar a la caracterización biofísica de la proteína de interés está por determinar. En el presente estudio hemos comparado los resultados obtenidos con el dominio SH3 de la tirosina quinasa c-Src clonada con un sitio de corte de la proteasa trombina y TEV. En el primer caso el sitio de corte origina una secuencia adicional de tres aminoácidos, GSH, que tienen la peculiaridad de unir metales divalentes como níquel y cobre conocido como *ATCUN site*. En el segundo caso obtenemos la secuencia original de la proteína. Hemos cristalizado la proteína obtenida sin el artefacto de clonación a dos condiciones distintas que producen el dímero entrecruzado y el monómero de la proteína. Hemos comparado las estructuras obtenidas con las descritas anteriormente con el artefacto de clonación (códigos PDB 4JZ4, monómero y 3FJ5, dímero entrecruzado). También hemos medido la estabilidad de la proteína frente a la temperatura y en presencia del desnaturizante químico hidrócloruro de guanidinio a pHs donde la proteína se encuentra en su forma monomérica o dimerica. También hemos caracterizado la oligomerización de este dominio SH3 y la formación de fibras amiloides. Nuestros resultados muestran como la proteína expresada con el ATCUN-site un níquel y el complejo resultante es más estable. La proteína sin el artefacto es menos soluble lo que impide que alcance la concentración crítica necesaria (>20 mg/ml) para la formación de fibras amiloides a pH 5.0. Nuestros resultados señalan la importancia de la presencia de ciertos aminoácidos ajenos a la secuencia de la proteína bajo estudio en las propiedades biofísicas de la proteína. Dado el elevado número de proteínas que se expresan con la etiqueta de clonación de histidinas, y el corte con la proteasa trombina para eliminarla, es importante revisar como la presencia fortuita de metales puede afectar a los estudios realizados con estas proteínas.

Agradecimientos. Esta investigación la ha realizado el grupo de investigación PAIDI BIO328 Estructura de Proteínas que cuenta además con financiación del proyecto MINECO y FEDER (EU) [BIO2016-78020-R]. La toma de datos ha sido financiada por una beca BAG de ALBA (Barcelona, España) [BAG-ID 2015071316 y 2016091824] y ESRF (Grenoble, Francia) [BAG MX2064].

PRODUCTION OF AMPHIDINOLS AND OTHER BIOPRODUCTS OF INTEREST BY THE MARINE MICROALGA *AMPHIDIINIUM CARTERAE* UNRAVELED BY NMR METABOLOMICS

**A. C. Abreu¹, A. Molina-Miras², L. M. Aguilera-Sáez¹, A. I. Tristán¹,
L. López-Rosales², M. C. Cerón-García², A. Sánchez-Mirón², F. García-Camacho,²
E. Molina-Grima,² I. Fernández¹**

(1) Department of Chemistry and Physics, Research Centre CIAIMBITAL, Universidad de Almería, Ctra. Sacramento, s/n, E04120 Almería (Spain); acabreu@ual.es

(2) Department of Engineering, Faculty of Experimental Sciences, Universidad de Almería, Ctra. Sacramento, s/n, E04120 Almería (Spain)

Amphidinium carterae is a source of impressive bioactive compounds, including a group of polyketide metabolites, namely amphidinols (APDs), which elicit potent anticancer, antifungal and hemolytic activities. Discriminative metabolomics has recently gained importance in the chemical ecology of marine algae since it allows to explore, in an untargeted way, metabolic variations in response to several environmental conditions and stresses.

This study assessed the feasibility of an NMR metabolomic approach to monitor the naturally present or stresses-elicited metabolites from a long-term (>170 days) culture of the dinoflagellate marine microalgae *A. carterae* grown in a fiberglass paddlewheel-driven raceway photobioreactor. Metabolic contents on compounds of interest (APDs, fatty acids, carotenoids, oxylipins) were evaluated by altering concentration levels of the *f/2* medium nutrients and daily mean irradiance in a total of 5 different experimental sets. *A. carterae* biomass was extracted and measured in a Bruker Avance III 600 spectrometer with a 5 mm QCI quadruple resonance pulse field gradient cryoprobe. Hemolytic activity of *A. carterae* culture was assessed on erythrocytes from defibrinated sheep blood and was expressed as equivalent saponin potency.

This metabolomics approach allowed us to unravel how increased daily irradiance caused a general decrease on pigments (chlorophyll a and peridinin) and an increase on saturated fatty acids (SFAs), monounsaturated fatty acids (MUFAs) and docosahexaenoic acid (DHA), while increased nutrient availability produced an increase of sugars, amino acids, ω -3 polyunsaturated fatty acids (PUFA) and of pigments and a decrease on SFAs and MUFAs. The set operating with 24 h light cycle showed a 3-fold increase on APDs, probably due to a stress-mediated response caused by photoacclimation, and an increased hemolytic activity (Figure 1).

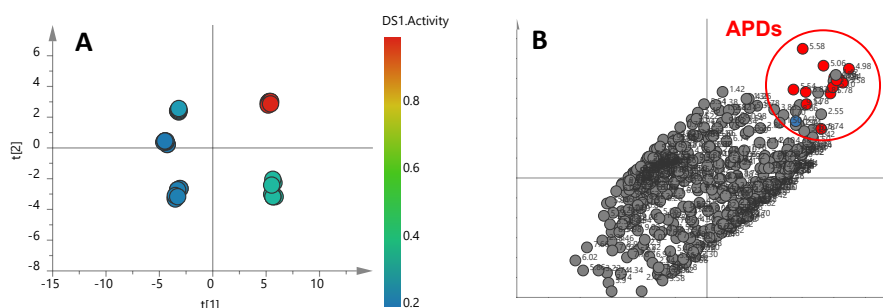


Figure 1. Partial Least Squares (PLS) scores (A) and loadings (B) plots of ¹H NMR spectra of extracts of *A. carterae* biomass for the 5 sets showing correlation between hemolytic activity and APDs production.

Acknowledgements. This research has been funded by the State Research Agency (grants RTC-2016-5239-2, RTC-2017-6405-1, CTQ2017-84334-R and CTQ2014-55888-C3-02) of the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities, the European Regional Development Fund Program, and by the Junta de Andalucía project number P12-FQM-2668.

APLICACIÓN DE UNA TÉCNICA AVANZADA (GC-HRMS-Q-ORBITRAP) PARA LA DETERMINACIÓN DE ALQUENILBENCENOS EN PIMIENTA Y SUS VARIEDADES

A. Rivera-Pérez, R. López-Ruiz, A. Garrido-Frenich

Grupo de Investigación “Química Analítica de Contaminantes (FQM-170)”, Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Almería, E04120 Almería (España); arp800@inlumine.ual.es

Los alquenilbencenos son toxinas naturales presentes de forma endógena en una variedad amplia de especies vegetales y, por tanto, se encuentran en condimentos consumidos habitualmente tales como la albahaca, la nuez moscada o la pimienta negra.¹ Algunos alquenilbencenos (estragol, safrol y metileugenol) están regulados desde el año 2008 por el Reglamento (CE) N° 1334/2008², a través del cual su adición como tales a los productos alimentarios quedó expresamente prohibida. Recientemente (2018) el Sistema Europeo de Alerta Rápida para Alimentos y Piensos (*Rapid Alert System for Food and Feed*, RASFF) señaló otros dos alquenilbencenos (*trans*-anetol y miristicina) como químicos preocupantes debido a su presencia notable en especias y a sus posibles efectos adversos en la salud humana. Además, gran parte de dichas notificaciones reportadas por el sistema RASFF estuvieron referidas a una de las especias más consumidas en la Unión Europea: la pimienta negra.³

Por ello, el objetivo de este trabajo ha sido el desarrollo y validación del primer y único método multianálisis existente para la determinación simultánea de ocho alquenilbencenos (*trans*-anetol, estragol, metileugenol, eugenol, acetileugenol, miristicina, safrol y *trans*-isoeugenol) en distintas variedades de pimienta, mediante cromatografía de gases (GC) acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (HRMS-Q-Orbitrap), empleando un método de extracción sólido-líquido asistido por ultrasonidos (*Ultrasound-Assisted Extraction*, UAE).

El método se validó satisfactoriamente atendiendo a los criterios de la guía SANTE 11813/2017⁴ y posteriormente se aplicó al análisis de once muestras de pimientos diferentes. Por un lado, se analizaron muestras de una única especie vegetal (*Piper nigrum*) cuyos granos presentaban diferentes grados de maduración. Por otro lado, se estudiaron otras variedades vegetales también conocidas como “pimientos” de diferentes orígenes del mundo (procedentes de Asia, África y América). Con ello, se dilucidó la influencia de ciertos factores tales como el estado de maduración de los granos de pimienta y el origen geográfico en el contenido de alquenilbencenos. Según los resultados obtenidos, independientemente del origen geográfico o del grado de maduración de los granos, los componentes mayoritarios fueron eugenol, *trans*-anetol y estragol (destacando sus altos niveles de concentración en el rango 2,2-120 mg/kg), mientras safrol y *trans*-isoeugenol se encontraron minoritariamente (0,20-3,6 mg/kg) en la mayoría de las muestras.

Agradecimientos. ARP agradece la financiación proporcionada por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades de España, a través de la “Ayuda para la Formación de Profesorado Universitario (FPU18/05133)”.

¹ M. Avila, M. Zougag, A. Escarpa, Á. Ríos, *J. Chromatogr. A* **2009**, 1216, 7179–7185.

² European Commission. Regulation (EC) No 1334/2008 of the European Parliament and of the Council. *Off. J. Eur. Union* **2008**

³ E. D. van Asselt, J. L. Banach, H. J. van der Fels-Klerx, *Food Control* **2018**, 83, 7–17.

⁴ European Commission. SANTE/11813/2017. Guidance Document on Analytical Quality Control and Method Validation Procedures for Pesticide Residues and Analysis in Food and Feed. **2018**.

ANÁLISIS Y CLASIFICACIÓN DE DIFERENTES VARIEDADES DE TOMATE EN BASE A SU CONTENIDO EN CALISTEGINAS MEDIANTE GC-Q-ORBITRAP Y ANOVA

A. Romera-Torres, F. J. Arrebola, A. Garrido-Frenich y J. L. Martínez-Vidal

Grupo de investigación "Química Analítica de Contaminantes", Departamento de Química Analítica, CIAIMBITAL, ceiA3, Universidad de Almería, E04120 Almería (España); art291@ual.es

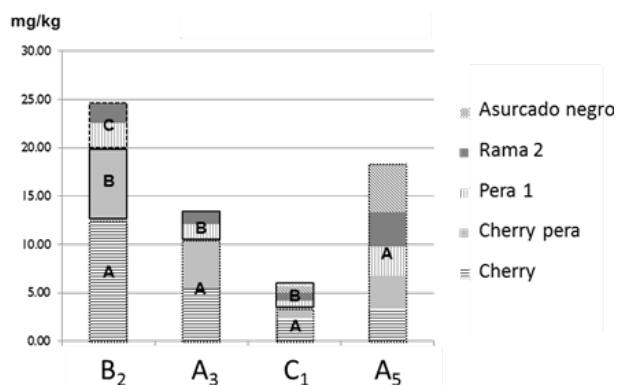
Las calisteginas son un grupo de metabolitos secundarios presentes en numerosas plantas pertenecientes a las familias Solanaceae, Convolvulaceae, Erythroxylaceae, Moraceae y Brassicaceae. A estas familias pertenecen numerosos vegetales altamente consumidos, tales como patata, berenjena o tomate (*Solanum tuberosum*, *S. melongena* y *S. lycopersicum* L),¹ siendo este último uno de los vegetales de consumo más populares, con una producción de 150000 millones de kg en 2017.² Las calisteginas son iminiázúcares y actúan como inhibidores de las glicosidasas, siendo algunas potentes inhibidoras de la α -galactosidasa y β -glucosidasa,¹ por ello han atraído un gran interés.

El objetivo de este estudio fue evaluar la variación del contenido de 7 calisteginas (A₃, A₅, B₁, B₂, B₃, B₄ y C₁) en y entre 9 variedades de tomate (2 pera, 3 rama, cherry, cherry pera, corazón de buey y asurcado negro) cultivadas bajo las mismas condiciones agronómicas.³ Para su estudio, se extrajeron las calisteginas de las muestras con una mezcla metanol/agua (50/50, v/v) y se derivatizaron con agentes silantes. El extracto fue analizado mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas de alta resolución con analizador Q-Orbitrap (GC-Q-Orbitrap) y los resultados fueron sometidos a un análisis de la varianza (ANOVA).

Finalmente, el análisis de las 9 variedades reveló la presencia de las calisteginas A₃, A₅, B₂ y C₁, encontrándose las mayores concentraciones en las 2 variedades cherry, mientras que en 2 variedades rama, 1 variedad pera y corazón de buey, las calisteginas se encontraron por debajo del LOQ. Por otro lado, los resultados del estudio ANOVA (Figura 1), mostraron una discriminación de las variedades en 3 grupos atendiendo a su contenido en calistestina B₂, en dos grupos atendiendo a su contenido en calistestina A₃ y C₁, mientras que el contenido de calistestina A₅ no sirvió para diferenciar entre variedades.

Se ha comprobado que la metodología analítica desarrollada para la determinación de 7 calisteginas en tomate ha demostrado satisfactoriamente su aplicabilidad en términos de sensibilidad y selectividad. Además, el estudio ANOVA de las diversas variedades de tomate cultivadas bajo los mismos patrones y condiciones agronómicas ha demostrado las diferencias significativas que pueden existir entre ellas en términos de presencia de calisteginas.

Figura 1. Agrupamiento de variedades en base al contenido en calisteginas.



¹ S. Biastoff, B. Dräger, Chapter 2 Calystegines, en "The Alkaloids: Chemistry and Biology", Cordell, G, Academic Press, Nueva York (EEUU), 2007; pp. 49-102.

² FAOSTAT, Ranking. Countries by commodity, (2017).

http://www.fao.org/faostat/en/#rankings/countries_by_commodity (accedido 2 de octubre de 2019).

³ A. Romera-Torres, J. Arrebola-Liébanas, J.L. Martínez Vida, A. Garrido Frenich, *J. Agric. Food Chem.* 2019, 67, 1284-1291.

DEAGGREGATION AGENTS: THE KEY TO BOOST THE LITHIUM-CATALYZED HYDROSILYLATION

C. Ruiz,^a A. Raya-Barón,^a M. A. Ortuño^b and I. Fernández^{*a}

^a Department of Chemistry and Physics, Research Centre CIAIMBITAL, University of Almería, Ctra. Sacramento, s/n, 04120 Almería, Spain.

^b Institute of Chemical Research of Catalonia (ICIQ), The Barcelona Institute of Science and Technology (BIST), Av. Països Catalans 16, 43007 Tarragona, Spain.
cruizmar@ual.es

The reduction of carbonyl groups into alcohols mediated by a catalyst, the so-called catalytic hydrosilylation, grants great selectivity and performance while maintaining mild reaction conditions¹. We have recently reported the hydrosilylation of carbonyl compounds catalyzed by lithiated hydrazones², but a better understanding of the mechanism of the process would be needed to optimize the reaction conditions, hence a combined computational and experimental study has been carried out. The reaction between acetophenone and (MeO)₂MeSiH using lithium diisopropylamide (LDA) as catalyst was computed at density functional theory (DFT) level. The results suggested an initial rate-determining pre-activation step to form a monomeric off-cycle species. On this basis, we have proposed a way to further improve the efficiency of basic catalysts by the addition of commercially available deaggregation agents such as HMPA, DMPU or TMEDA. Indeed, these deaggregation agents have demonstrated to efficiently accelerate the hydrosilylation reaction in the presence of readily available lithium amides (Figure 1). Kinetic profiles were monitored by NMR over four different lithium amides, verifying the expected significant increase of the reaction rates when the agent “DA” is present (Figure 1).

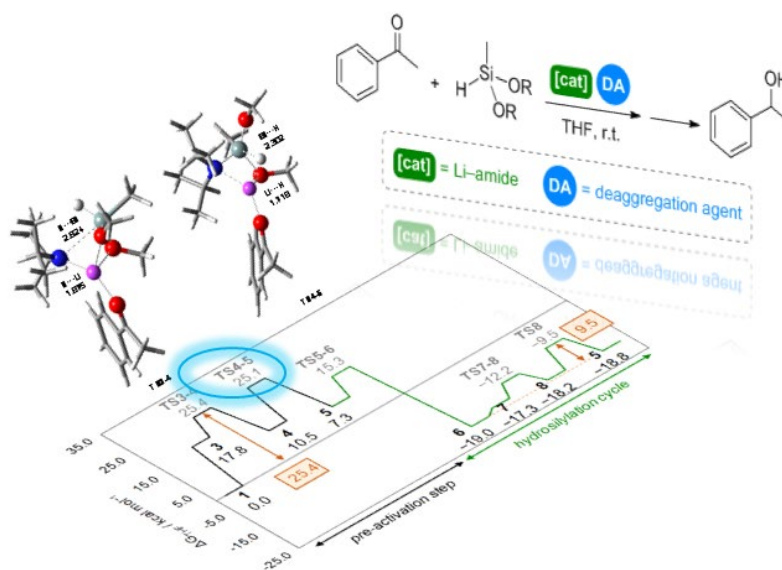


Figure 1. Hydrosilylation of ketones catalyzed by Li-amides and a deaggregation agent: reaction profile and optimised TS structures of the key transition states of the pre-activation step.

Acknowledgements. This research has been funded by the State Research Agency (grants RTC-2016-5239-2 and CTQ2017-84334-R) of the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities, and by the Junta de Andalucía project number P12-FQM-2668.

¹ Raya-Barón, A.; Oña-Burgos, Fernández, I. *ACS Catal.* **2019**, *9*, 5400-5417.

² Raya-Barón, A.; Oña-Burgos, P.; Rodríguez-Diéguez, A.; Fernández, I. *Organometallics*, **2018**, *37*, 2682-2689.

NEW HYBRID MATERIALS BASED ON GOLD NANOTRIANGULAR PRISMS OR NANOSPHERES WITH ANTHRAQUINOID PENDANTS

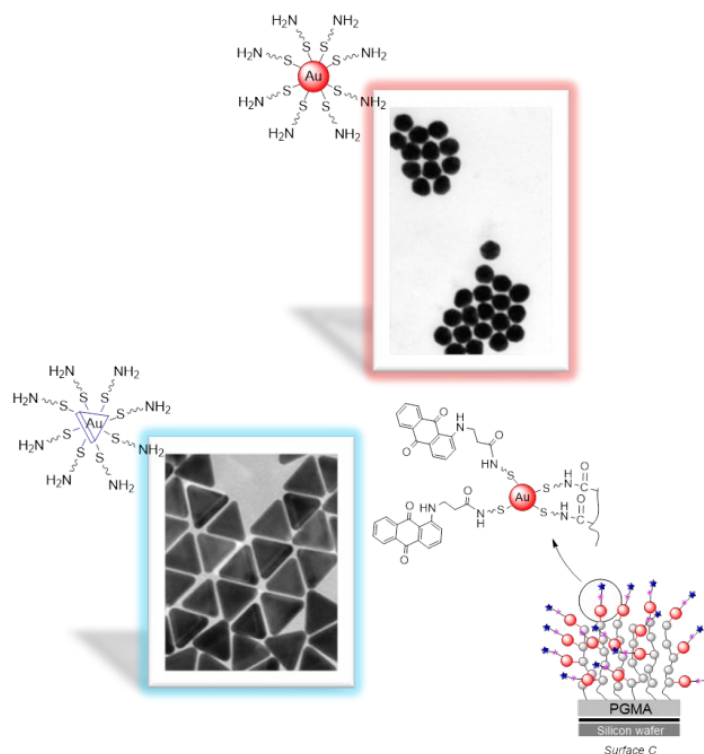
A. B. Ruiz-Muelle,^a C. Kuttner,^b P. Uhlmann,^b R. Contreras-Cáceres^c and I. Fernández.*^a

^a Department of Chemistry and Physics, Research Centre CLAIMBITAL, University of Almería, Ctra. Sacramento s/n, 04120 Almería, Spain. E-mail: arm350@ual.es

^b Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden e.V., Hohe Str. 6, 01069 Dresden, Germany.

^c Department of Chemistry in Pharmaceutical Science, Complutense University of Madrid, Plaza Ramón y Cajal, 28040 Madrid, Spain.

In this communication we describe the synthesis and characterization of new hybrid materials based on polymer brushes, already grafted onto silicon wafers, containing gold nanotriangular prisms or nanospheres with anthraquinoid pendants. Colloidal size and morphology were analyzed by transmission electron microscopy (TEM) and UV-visible spectroscopy. Particle distribution on the silicon wafer was analyzed by field emission scanning electron microscopy (FESEM) and atomic force microscopy (AFM). The presence of bonded cysteamine (Cys) and anthraquinone derivatives on the gold surface was confirmed by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS).¹



Acknowledgements. This research has been funded by the State Research Agency (grants RTC-2016-5239-2 and CTQ2017-84334-R) of the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities, and by the Junta de Andalucía project number P12-FQM-2668.

¹ A. B. Ruiz-Muelle, C. Kuttner, C. Alarcón-Fernández, J. M. López-Romero, P. Uhlmann, R. Contreras-Cáceres, I. Fernández, *Appl. Surf. Sci.* **2019**, *496*, 143598.

UNIÓN DEL COLORANTE AZUL DE BROMOFENOL A LISOZIMA: ¿DÓNDE SE UNE EL COLORANTE?

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

*Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales, CEIA3,
CIAMBITAL, Universidad de Almería, E04120 Almería (España)
msg200@inlumine.ual.es*

Los cristales de proteínas se tiñen fácilmente mediante la adición de determinados colorantes a la gota de cristalización. En general, en un par de horas el colorante difunde en el interior del cristal, de modo que éste se colorea, mientras que el resto de la gota se vuelve más clara¹. Este es un método fácil y rápido para distinguir entre cristales de proteína y cristales de sal. Algunos colorantes se unen a la lisozima y esta unión parece ser específica como demuestra la estequiometría de la unión (1:1). La unión de algunos colorantes a la lisozima ha sido ampliamente estudiada, y el sitio de unión tradicionalmente propuesto ha sido el bolsillo hidrofóbico en el sitio activo cerca de los triptófanos Trp62 y Trp108. A pesar de los muchos estudios en disolución, no existe ninguna estructura del complejo proteína-colorante en el PDB. Nuestro grupo ha estudiado la unión de varios colorantes a la lisozima, cuya unión específica a dicha proteína ha sido descrita previamente. En este trabajo se muestran los resultados obtenidos usando el colorante azul de bromofenol (BPB). La unión del BPB a la lisozima es uno de las mejores caracterizadas. Además, los cristales de este complejo han sido obtenidos previamente², aunque las coordenadas no están disponibles en el PDB. En nuestro trabajo se han obtenido varios cristales del complejo lisozima-BPB en los grupos espaciales $P2_12_12_1$ ($a=30.21$, $b=55.24$, $c=71.58$) y $P4_32_12$ ($a=b=78.50$, $c=37.34$). Los cristales ortorrómbicos fueron obtenidos como se describe en Plaza-Garrido et al.³ y teñidos a diferentes pHs. Estos cristales difractaron a alta resolución, y hasta 4 moléculas de BPB fueron modeladas usando los mapas de diferencia de densidad electrónica 2Fo-Tc y Fo-Fc. Debido a la susceptibilidad al daño por radiación que presentan los átomos de bromo del colorante, la posición de éstos pudo ser fácilmente localizada, y, por consiguiente, la del colorante. En los cristales tetragonales la tinción a diferentes pHs resultó en un aumento del número de moléculas de BPB modeladas. En estos cristales, hasta 8 moléculas del colorante fueron identificadas. Estas moléculas se encuentran en la superficie, donde el grupo sulfónico del colorante interacciona con los residuos positivos de la proteína: arginina, lisina e histidina. Curiosamente, a pH superiores a 6.0, los cristales tetragonales teñidos en disoluciones saturadas de BPB muestran una celdilla distorsionada que indexa en un grupo espacial ortorrómbico $P2_12_12_1$ ($a=37.72$, $b=76.56$, $c=84.08$) con dos moléculas de lisozima en la celda unidad y hasta 8 moléculas de colorante. En todas las estructuras resueltas las moléculas de BPB están situadas en los canales de solvente del cristal. Nuestros resultados muestran que son varios los factores que deben ser considerados con el objetivo de favorecer la difusión y la unión del colorante al cristal de proteína.

Agradecimientos. Esta investigación la ha realizado el grupo de investigación PAIDI BIO328 Estructura de Proteínas que cuenta además con financiación del proyecto MINECO y FEDER (EU) [BIO2016-78020-R]. La toma de datos ha sido financiada por una beca BAG de ALBA (Barcelona, España) [BAG-ID 2015071316 y 2016091824] y ESRF (Grenoble, Francia) [BAG MX2064].

¹ McPherson, A. & Larson, S. B. "Investigation into the binding of dyes within protein crystals". *Acta crystallographica. Section F, Structural Biology Communications*, **2018**, 74, 593-602.

² Madhusudan, M. Vijayan. "Additional binding sites in lysozyme X ray analysis of lysozyme complexes with bromophenol red and bromophenol blue". *PEDS*, **1992**, 5, 399-404.

³ Plaza-Garrido, M., Salinas-García, M. C. & Cámara-Artigas, A. "Orthorhombic lysozyme crystallization at acidic pH values driven by phosphate binding". *Acta Crystallographica. Section D, Structural Biology*, **2018**, 74, 480-489.

UNA CADENA SUPRAMOLECULAR 1D BASADA EN UNIDADES $[\text{H}_2\text{V}_{10}\text{O}_{28}]^{4-}$ DECORADA CON CATIONES ORGÁNICOS: UN ENFOQUE TEÓRICO Y EXPERIMENTAL

**E. Sánchez-Lara¹, B. Martínez-Valencia¹, N. Corona Motolinia¹,
B. Sánchez-Gaytán¹, M. Eugenia Castro¹, S. Bernès¹, M. Méndez-Rojas²,
F. Meléndez-Bustamante¹ y E. González-Vergara¹**

¹Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. 18 Sur y Av. San Claudio, Col. San Manuel, C. P. 72570, Puebla, Pue., México. *esl24@hotmail.com*

²Universidad de las Américas Puebla, Exhacienda Sta. Catarina Mártir, San Andrés Chohula, 72820 Puebla, México

El compuesto $[\text{DMAPH}]_4[\text{H}_2\text{V}_{10}\text{O}_{28}] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, **1**, donde DMAPH= 4-dimetilaminopiridinio $[\text{C}_7\text{H}_{11}\text{N}_2]^+$, cristalizó en una celda monoclinica (grupo espacial $P2_1/n$).¹ Los datos estructurales mostraron que las unidades protonadas $[\text{H}_2\text{V}_{10}\text{O}_{28}]^{4-}$ interactúan entre sí *via* puentes de hidrógeno centrosimétricos formando una estructura supramolecular sobre el eje b cristalográfico, la cual está decorada por cationes DMAPH a través de contactos cortos $\text{N}-\text{H} \cdots \text{O}$ ($d_{\text{NH} \cdots \text{O}}=1.88 \text{ \AA}$). Los espectros IR y Raman experimentales de **1** mostraron bandas intensas y medias en la región de 1000 a 400 cm^{-1} , las cuales corresponden a los modos de vibración *stretching* y *bending* de los enlaces V–O. Con el objetivo de estudiar el efecto de la protonación, se calcularon los espectros IR y Raman a través de cálculos DFT-D3/CPM tanto del anión $[\text{V}_{10}\text{O}_{28}]^{6-}$ como en su estado protonado $[\text{H}_2\text{V}_{10}\text{O}_{28}]^{4-}$ y del compuesto **1**, con lo cual se pudo identificar el acoplamiento entre el modo *stretching* de los enlaces V=O terminales con el modo *bending* o flexión de los enlaces V–O–H. Por otra parte, las interacciones intermoleculares más representativas en el cristal se analizaron a través de la superficie molecular Hirshfeld² y se resumieron a través de gráficos en 2D o *fingerprint plots*³ revelando la naturaleza donadora y aceptora de puentes de hidrógeno del anión $[\text{H}_2\text{V}_{10}\text{O}_{28}]^{4-}$. A través de NMR de ⁵¹V se logró determinar la estabilidad del anión respecto a la formación de especies mononucleares de vanadio lo cual puede deberse a que las interacciones entre los cationes observadas en estado sólido, pueden persistir en solución.

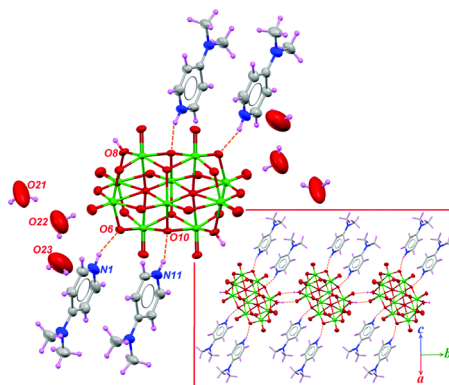


Figura 1. Estructura del compuesto **1**, con elipsoides de desplazamiento al 50% de probabilidad. El recuadro muestra la cadena supramolecular formada por los aniones y su interacción con los cationes orgánicos, DMAPH.

¹ E. Sánchez-Lara, B. Martínez-Valencia, N. Corona-Motolinia, B. L. Sanchez-Gaytan, M.E. Castro, M. E., S. Bernès, M.A. Méndez-Rojas, F. Meléndez-Bustamante, E. González-Vergara, *New Journal of Chemistry*. **2019**

² M.A. Spackman, D. Jayatilaka, *Cryst.Eng.Comm.* **2009**, *11*, 19-32.

³ M. Spackman, J.J. McKinnon, *Cryst.Eng.Comm.* **2002**, *4*, 378-392.

RESOLUCIÓN ESTRUCTURAL DE LA PROTEÍNA CHEY DE *E. Coli* Y BÚSQUEDA DE FRAGMENTOS INHIBIDORES DE SU FUNCIÓN

J. M. Suárez, E. Ortiz-Salmerón and M. Andújar-Sánchez

*Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales,
Universidad de Almería,
E04120 Almería (España); jss193@inlumine.ual.es*

La proteína CheY (Figura 1) está directamente implicada en el movimiento celular de *E. coli* actuando como señalizadora en el control de movimiento del flagelo¹. Esta proteína se activa a través de una cascada de señales dependiente del gradiente de alimento, de modo que en presencia de gradientes positivos pasa de una forma inactiva a la activa. En el presente trabajo se ha encontrado una relación entre el aminoácido Tyr106 de la CheY y su activación.

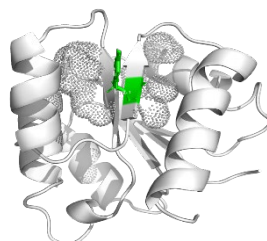


Figura 1. Estructura de CheY .En verde el residuo Tyr106.

Para la búsqueda de posibles inhibidores de la proteína se han escogido 4 bases de datos diferentes y filtrado por diversidad estructural para realizar un mapeado lo más amplio posible del espacio químico. Posteriormente se han realizado 3 experimentos de *docking* para evaluar los compuestos por 3 funciones de *scoring* diferentes y hacer una selección por consenso de los más favorables. Los resultados obtenidos muestran que las estructuras básicas responden a los siguientes criterios: anillo aromático 1,4 sustituido; presencia de grupos hidroxilo en posición para; derivados de benzilo fusionados; enlace amida en posición 1 fenólica y derivados de prolina y triptófano. Partiendo de estas estructuras se han seleccionado las moléculas mostradas en la figura 2 para posteriores ensayos de actividad.

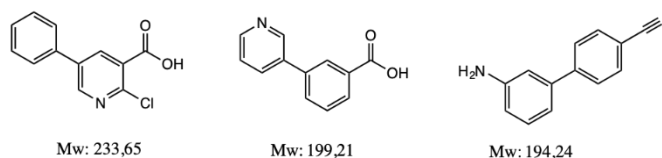


Figura 2. Ligandos seleccionados para estudio de unión a sitio activo.

¹Haiko, J., & Westerlund-Wikström, B. (2013). The role of the bacterial flagellum in adhesion and virulence. *Biology*, 2(4), 1242–1267. doi:10.3390/biology2041242

SÍNTESIS TOTAL DE DIHIDROROSEFURANO, UN PRODUCTO NATURAL MAL ASIGNADO

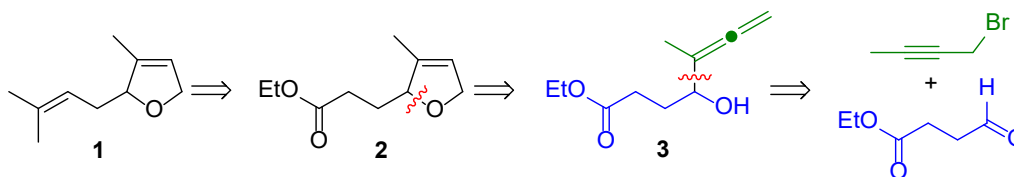
I. Torres-García, J. L. López-Martínez, R. López-Domene, M. Muñoz-Dorado, I. Rodríguez-García, M. Álvarez-Corral

*Departamento de Química y Física, Facultad de Ciencias Experimentales, ceiA3
Universidad de Almería,
E04120 Almería (España); irene.tg.94@gmail.com*

Artemisia pallens es una planta aromática procedente del sur de la India cuyo aceite esencial, conocido como aceite de Davana, ha mostrado un creciente interés debido a su uso como aromatizante en cocina, así como en la industria de la perfumería. Además, la medicina tradicional india (*Ayurveda*) le otorga a este aceite numerosas cualidades medicinales.¹

Dihidrorosefurano (**1**) es un monoterpeno dihidrofuranico, aislado del aceite de Davana y señalado como el componente responsable de su olor fresco y floral.² Dicha estructura también se ha atribuido a una sustancia aislada de una hierba argentina *Tagetes mendocina*,³ cuyas características espectroscópicas no coincidían con las descritas previamente. Esto nos hizo pensar que podría tratarse de un caso de producto natural mal asignado, por lo que decidimos realizar su síntesis total.

Nuestra estrategia sintética se basa principalmente en dos reacciones mediadas por metales de transición (esquema 1). De esta forma, el anillo 2,5-dihidrofuranico presente en la molécula **1** se prepara mediante adición intramolecular inducida por Ag(I), del grupo hidroxilo al doble enlace terminal del aleno presente en el compuesto **3**. El otro paso clave es la síntesis del α -hidroxialeno **3**, lo que se consigue a través de una reacción tipo Barbier, utilizando un compuesto derivado de CpTiCl₃, que permite el acoplamiento entre un aldehído y un haluro propargílico.⁴ Siguiendo esta propuesta sintética, hemos preparado la molécula objetivo a partir de 4-oxobutanoato de etilo, en cuatro pasos: homopropargilación tipo Barbier, ciclación con Ag(I), adición de MeMgBr y deshidratación a pH controlado. Como nos temíamos, los datos espectroscópicos del compuesto **1** no coincidieron ni con los publicados para el presuntamente dihidrorosefurano aislado del *Artemisia pallens* ni con los descritos para el compuesto de *Tagetes mendocina*.



Esquema 1. Análisis retrosintético del compuesto **1**

En este trabajo, también llevamos a cabo una resolución enzimática del α -hidroxialeno **3** (e.e. > 95%), que permite una síntesis total asimétrica altamente enantioselectiva de ambos enantiómeros del compuesto **1**.

Agradecimientos. Agradecemos al "Campus de Excelencia Internacional Agroalimentario, ceiA3" y al "Ministerio de Economía y Competitividad" (Proyecto CTQ2015-70724-R) por su apoyo financiero.

¹ Kulkarni, R. N.: *Artemisia pallens*. In *Artemisia*; Wright, C. W., Ed.; Medicinal and Aromatic Plants - Industrial Profiles; Taylor & Francis: London, **2002**; Vol. 18; pp 119-137.

² Misra, L. N.; Chandra, A.; Thakur, R. S. *Phytochemistry* **1991**, *30*, 549. Erratum: *Phytochemistry* **1991**, *30*, 4212.

³ Lima, B.; Agüero, M. B.; Zygadlo, J.; Tapia, A.; Solis, C.; Rojas De Arias, A.; Yaluff, G.; Zacchino, S.; Feresin, G. E.; Schmeda-Hirschmann, G. *J. Chil. Chem. Soc.* **2009**, *54*, 68.

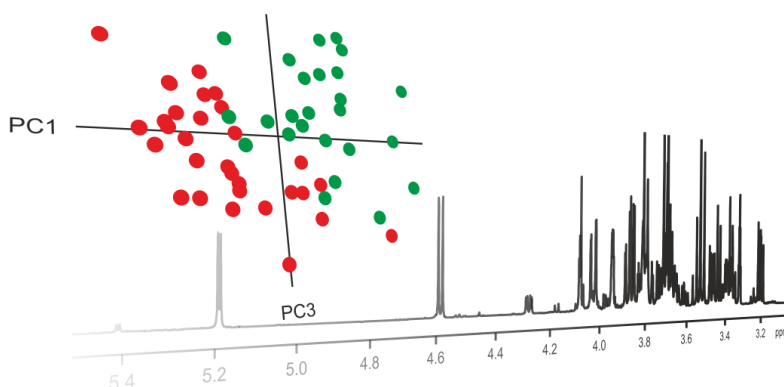
⁴ Torres-García, I.; López-Martínez, J.L.; Martínez-Martínez, R.; Oltra, J.E.; Muñoz-Dorado, M.; Rodríguez-García, I.; Álvarez-Corral, M. *Appl. Organometal. Chem.* **2019**. DOI: 10.1002/aoc.5244.

NMR METABOLOMICS AS AN EFFICIENT APPROACH IN THE AGRI-FOOD SECTOR

A. I. Tristán, A. C. Abreu and I. Fernández*

Department of Chemistry and Physics, Research Centre CIAIMBITAL, University of Almería (Spain); ath582@inlumine.ual.es

Metabolomics is becoming an important tool for food science. This technique allows the analysis of important changes in the metabolome of a certain fruit or plant, due to its ability to screen a large quantity of metabolites and to monitor the change on their levels according to genetic or environmental factors. Thus, it is an important tool to evaluate fruits quality and safety in terms of their metabolic profile. NMR is an excellent analytical platform that combines sensitivity and resolution together with a simple sample preparation. In addition, it does not need extra steps of separation or derivatization to analyse complex mixtures. Chemometric techniques enables the evaluation of big amounts of data to study significant statistical changes related to specific parameters. The aim of this communication is to show the potential of NMR-based metabolomics in the agri-food sector, and how is employed towards metabolic differences and discrimination between different fruit species and/or cultivation strategies. Some of the selected examples are based on tomato (metabolic impact when using a shading mesh), melon (metabolic differences in ripening states and/or varieties), pepper (differentiation between biofertilizer treatments) and zucchini (influence of different conditions of water irrigation).



All these studies were performed on a Bruker Avance III 600 MHz equipped with a quadruple cryorobe and a thermostated autosampler.

For all cultivars, multivariate data analysis models were applied such as Principal Component Analysis (PCA) and Partial Least Squares-Discriminant Analysis (PLS-DA). Significant metabolic differences were found between fruit species (melon and pepper), after application of different agronomic procedures (tomato, pepper and zucchini) and between ripening stages (melon). Between 30 and 50 metabolites were identified for each fruit extract, mainly belonging to the classes of amino acids, organic acids, sugars, nucleosides/nucleotides, phenolic compounds, fatty acids and vitamins, among others.

Acknowledgements. This research has been funded by the State Research Agency (grants RTC-2016-5239-2, RTC-2017-6405-1, CTQ2017-84334-R and CTQ2014-55888-C3-02) of the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities, the European Regional Development Fund Program, and by the Junta de Andalucía project number P12-FQM-2668.

DEMONSTRATION THAT IT IS POSSIBLE TO APPLY GC-HRMS TO PESTICIDE ANALYSIS WITH A ROUTINE METHOD

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

*Research Group “Analytical Chemistry of Contaminants”, Department of Chemistry and Physics, University of Almeria, CIAIMBITAL (Center for Research in Mediterranean Intensive Agrosystems and Agrifood Campus of International Excellence, ceiA3), Ctra. Sacramento s/n, E-04120 Almería, Spain
mvp864@inlumine.ual.es*

High-resolution mass spectrometry (HRMS) is a powerful tool for semi-targeted or non-targeted screening, HRMS strongly competes with classical tandem mass spectrometry in the field of quantitative multiresidue methods (e.g., pesticides residues or veterinary drugs in foodstuffs). It is one of the most promising tools when moving towards non-targeted approaches, which is gaining greater acceptance every year.

The purpose of this study has been to develop a high throughput screening and simultaneously determination of 200 pesticides in various types of seasonal fruits samples (banana, watermelon, pear and strawberry) combining an effective modified QuEChERS method with gas chromatography coupled to high resolution accurate mass spectrometry (GC-Q-Orbitrap-MS). Samples were extracted with acetonitrile, and then magnesium sulphate, sodium chloride, trisodium citrate dehydrate and of sodium hydrogencitrate sesquihydrate were added, stirred and centrifuged, after cleanup with magnesium sulphate and PSA. Internal standard (propoxur-d7) for recovery and injection control was applied. The method was properly validated in all matrices according to SANTE document. Nine compounds showed extraction difficulties (dimethomorph, ethoxyquin, fenamiphos, fenamiphos sulphoxide, fenamiphos sulphone, methamidophos, oxyfluorfen, sulprofos and tetrachlorvinphos). The other 191 compounds were evaluated in the validation tests.

Linearity was obtained from the analysis of spiked blank samples at six concentration levels ranging 1 to 100 $\mu\text{g}/\text{kg}$. All pesticides (191) were detected in three extracts (banana, watermelon and pear) at 1 $\mu\text{g}/\text{kg}$ level, however, in the case of strawberry was detected at 5 $\mu\text{g}/\text{kg}$. Determination coefficients (R^2) were 0.99 and the relative standard deviation of response factor (RSD) for each calibration curve was less than $\pm 20\%$. Finally, the limit of quantification (LOQ) was 5 $\mu\text{g}/\text{kg}$ for all the analytes. Recovery (70-120%) and precision ($\leq 20\%$) were studied at 5 and 10 $\mu\text{g}/\text{kg}$ concentration levels, pesticides showed results as it were expected. The validated method was applied to the analysis of 31 field samples of banana (6), watermelon (5), pear (12) and strawberry (8). Thirteen pesticide residues were identified and quantified below European MRL. Concerning samples, residues were present in a 20% of watermelon samples, 33% of banana, 37% of strawberry and the 67% of pear samples.

In conclusion, the developed and validated method has demonstrated to be robust enough and appropriate for quantification purposes working in full scan mode, which has additional advantages such as its applicability to the analysis of non-target compounds and retrospective evaluation.

THE SPANISH NATIONAL SCIENCE, TECHNOLOGY AND INNOVATION SYSTEM: CURRENT SITUATION, PERFORMANCE INDICATORS AND CHALLENGES

C. Herrero-Sánchez

*Research Centre for Mediterranean Intensive Agrosystems and Agrifood Biotechnology (CIAIMBITAL), Universidad de Almería, E04120 Almería (Spain)
sanchez@ual.es*

The Spanish National Science, Technology and Innovation System is defined as the aggregate of all public and private agents that coordinate, fund and execute any given activity in the Spanish research, development and innovation ecosystem, as well as the related structures, actions and measures within the system. As such, the Spanish National Science, Technology and Innovation system can be conceptualized as the collection of the R&D-performing companies, technology centres and platforms and of the research-performing public bodies, including universities and research centres, as well as those public agents responsible for the definition, execution and monitoring of R&D policies.

As such, the long-term strategic planning and orientation of the system is provided by the Spanish National Science and Technology Strategy, which serves as the main guidance document of both public and private agents in the national system.

The Spanish National Science, Technology and Innovation System shows a variety of distinctive features that distinguish it from other similar national systems. Traditionally, the Spanish Science, Technology and Innovation System has shown strengths, most notably in the fields of scientific production and the performance of individual research centres in the international context, whereas a number of shortcomings have traditionally characterized the system. Among them, a weak public investment in terms of R&D expenditure in the GDP, a very weak private orientation towards development and innovation activities and a below-average performance of the Spanish scientific production in terms of impact publications have been characteristic weaknesses of the system.

An analysis of these strong and weak points reveals that most of them are structural in nature, although a general positive trend in many of the mentioned indicators has been observed in the last decades. Some of the performance indicators have shown a strong correlation with general, international trends, such as the predominance in the last decades of international and transinstitutional research collaborations and a greater involvement in R&D activities both from public and private actors.

The structural nature of these features can only lead to the conclusion that only long-term measures in public R&D investment, the promotion of scientific production in which impact rather than quantity is taken into account, and the investment in public-private R&D initiatives can provide long-term real improvements in the national system.

EL VALOR DE LO INTANGIBLE: CONCEPTOS BÁSICOS DE PATENTABILIDAD

B. Pérez-Esteban

*Oficina Española de Patentes y Marcas, Departamento de Patentes e Información Tecnológica,
Servicio de Patentes Químicas II (Biotecnología y Alimentación)
Paseo de la Castellana, 75, 28071 Madrid (España)
beatriz.perez@oepm.es*

Los **títulos de propiedad industrial e intelectual**, como los demás activos intangibles, tienen un importante valor económico y competitivo en el mundo empresarial.

Los **derechos de propiedad intelectual e intelectual** son derechos exclusivos otorgados por el Estado sobre las creaciones de la mente humana, en particular, invenciones, obras literarias y artísticas, signos distintivos y diseños utilizados en el comercio. Se dividen en dos categorías principales: **derechos de propiedad industrial**, que incluyen (entre otros) patentes, modelos de utilidad, marcas registradas, diseños industriales; y **derechos de propiedad intelectual (derechos de autor)**, que se relacionan con obras literarias y artísticas.

Gracias a la **propiedad industrial** se obtienen unos derechos de exclusiva sobre determinadas creaciones inmateriales que se protegen como verdaderos derechos de propiedad.

En España hay varios tipos de derechos de propiedad industrial:

- Diseños industriales: protegen la apariencia externa de los productos.
- Marcas y nombres comerciales (signos distintivos): protegen combinaciones gráficas y/o denominativas que ayudan a distinguir en el mercado unos productos o servicios de otros similares ofertados por otros agentes económicos.
- Patentes y modelos de utilidad: protegen invenciones consistentes en productos y procedimientos susceptibles de reproducción y reiteración con fines industriales.
- Topografías de semiconductores: protegen el (esquema de) trazado de las distintas capas y elementos que componen un circuito integrado, su disposición tridimensional y sus interconexiones, es decir, lo que en definitiva constituye su "topografía".

Los **derechos de propiedad industrial** permiten a quien los ostenta decidir quién puede usarlos y cómo puede usarlos.

Dichos derechos se otorgan mediante un procedimiento por el organismo competente (en España, la **Oficina Española de Patentes y Marcas**) y la protección que dispensan se extiende a todo el territorio nacional.

El papel de las patentes como instrumento de protección de las innovaciones es altamente relevante a la hora de proteger la propiedad de las invenciones. Pero, además, juegan un papel fundamental como elementos de divulgación del conocimiento científico y técnico.

EXTRACCIÓN A ALTA PRESIÓN DE COMPUESTOS BIOACTIVOS A PARTIR DE MICROALGAS

M. D. Macías-Sánchez

*Departamento de Ingeniería Química y Tecnología de Alimentos,
Universidad de Cádiz, Avda. República Saharaui nº 9, 11510, Puerto Real (Cádiz)
dolores.macias@uca.es*

Los compuestos bioactivos se pueden describir como metabolitos primarios o secundarios, producidos naturalmente por un organismo, que muestran una actividad biológica dada, la cual ejerce un efecto positivo en la salud del receptor¹.

Como eucariotas unicelulares, las microalgas muestran un conjunto de características que combinan la eficiencia fotosintética y las necesidades nutricionales simples de las plantas superiores, así como la rápida tasa de crecimiento y la capacidad de acumular metabolitos bioactivos de las células microbianas². Debido a su alta diversidad y estrategias de adaptación, las microalgas resultan ser una fuente viable de estas biomoléculas que pueden actuar dentro del cuerpo humano para contrarrestar las causas de ciertas enfermedades³.

Varios factores, como el tipo de molécula, el uso final del extracto y su termolabilidad, afectan en la selección de un proceso de extracción adecuado. Las técnicas de extracción convencionales a menudo tienen varios problemas relacionados con la degradación térmica, que se debe a su alta temperatura de extracción; Los residuos de disolvente en los extractos también pueden comprometer sus usos finales. En las últimas décadas, la comunidad científica ha propuesto técnicas avanzadas de extracción como las de alta presión que incluyen la extracción con fluidos supercríticos (SFE), con líquidos presurizados (PLE) así como la extracción con gases-líquidos expandidos (GXL) para reducir estos problemas y minimizar los costos de energía y el impacto ambiental. Además, estas técnicas representan una alternativa válida a las técnicas convencionales cuando es necesario garantizar la estabilidad térmica y productos de alta calidad (términos de pureza y rendimiento sin trazas de solventes)^{4,5,6}

De entre las distintas especies de microalgas que actualmente se emplean para la obtención de compuestos bioactivos destaca *Haematococcus pluvialis*; se caracteriza por su capacidad de acumular concentraciones significativas de astaxantina. La astaxantina es un carotenoide muy valioso en el mercado. Sus propiedades lo hacen útil como aditivo alimentario. Gracias a sus propiedades antioxidantes y antienvjecimiento, la astaxantina también se utiliza en el sector cosmético^{7,8}. Hoy en día existen compañías especializadas en la producción de astaxantina que realizan la extracción con dióxido de carbono supercrítico como parte de su proceso de producción⁹.

¹ H.-K. Biesalski, L. O. Dragsted, I. Elmadfa, R. Grossklaus, M. Müller, D. Schrenk, P. Weber, *Nutrition* **2016**, 25(11-12), 1202–1205.

² L. Custódio, T. Justo, L. Silvestre, A. Barradas, C. V. Duarte, H. Pereira, J. Varela, *Food Chemistry* **2012**, 131(1), 134–140.

³ H. Li, K. Cheng, C. Wong, K. Fan, F. Chen, Y. Jiang, *Food Chemistry* **2007**, 102(3), 771–776.

⁴ C. Crampon, O. Boutin, E. Badens, *Industrial & Engineering Chemistry Research* **2011**, 50, 8941–8953.

⁵ F.A. Reyes, J.A. Mendiola, E. Ibañez, J.M. del Valle, (2014). *The Journal of Supercritical Fluids*, **2014**, 92, 75–83.

⁶ A. Molino, J. Rimauro, P. Casella, A. Cerbone, V. Larocca, S. Chianese, D. Karatza, S. Mehariya, A. Ferraro, E. Hristoforou, D. Musmarra, *Journal of Biotechnology* **2018**, 283, 51–61.

⁷ J.-P. Yuan, J. Peng, K. Yin, J.H. Wang, *Molecular Nutrition & Food Research* **2011**, 55, 150–165.

⁸ D. Han, Y. Li, Q. Hu, *Algae* **2013**, 28, 131–147.

⁹ H. Sovová, R. P. Stateva, *The Journal of Supercritical Fluids* **2019**, 148, 93–103.

NÚMEROS METÁLICOS, PROPORCIONES Y OTRAS SORPRESAS

J. A. Rodríguez-Lallena

*Departamento de Matemáticas. Facultad de Ciencias Experimentales.
Universidad de Almería
jarodrig@ual.es*

Los números metálicos, introducidos por Vera de Spinadel en 1997, son proporciones que tienen interés en la arquitectura y en otros ámbitos. Quizá la proporción más famosa en el mundo del arte, y en otros mundos, sea la proporción áurea, que es la razón metálica por excelencia.

Otra proporción que encontramos con frecuencia en nuestro día a día es la proporción DIN. ¿Qué tiene que ver esta proporción con los números metálicos? En principio, nada. Sin embargo, encontraremos proporciones metálicas que pueden ponerse en relación directa con la proporción DIN. En general, todas las razones metálicas se pueden obtener reiterando uno de los procedimientos usados para obtener la razón áurea junto con una extensión del utilizado para la proporción DIN. Esto es una pequeña sorpresa, que no es la única que aparece tras los números metálicos, especialmente si se trata del número de oro.

Es una cuestión simple que los números metálicos están directamente relacionados con ciertas sucesiones de números reales, que extienden la sucesión de Fibonacci. Recordaremos esto y presentaremos algunas extensiones.

Finalmente, comentaremos algunas líneas de trabajo recientes relacionadas con los números metálicos y sus extensiones.

ARSENIC IN THE AIR: ANTHROPOGENIC SOURCES AND CHEMICAL ANALYSIS

D. Sánchez-Rodas

*Centro de Investigación en Química Sostenible-CIQSO,
Universidad de Huelva,
E21071 Huelva (Spain); rodas@uhu.es*

Air pollution is a worldwide issue that affects human health. One aspect under study in relation to air pollution is airborne particulate matter (PM), which represent a health thread due to its inhalation. The concentration and size distribution of PM has been included in legal regulations of several countries, mainly in relation to particles with aerodynamic diameter less than 10 μm (PM10 coarse particles) or 2.5 μm (PM2.5 fine particles). Another important parameter is the chemical composition of PM, which is rather complex. PM may contain inorganic and organic compounds, as well as metals and metalloids of toxicological significance, as arsenic. The presence of arsenic (As) in PM can be due to both anthropogenic and natural sources, being the first ones most important. There anthropogenic sources comprise the combustion of fossil fuels (e.g. coal-fired power station), mining activities (e.g. non-ferrous metals smelting, mineral ore extraction), and wood and waste incineration¹.

From an analytical point of view, the determination of the total As in PM can be performed by inductively coupled plasma-mass spectrometry (ICP-MS) after acid digestion of the samples. These data, in combination with the determination of the overall chemical composition of PM, are used to estimate source apportionment using statistical treatment (e.g. Factor Analysis). Also, a more advance approach based on speciation analysis, can give additional information for the identification and discrimination of emission sources of As. Speciation analysis provides information about the inorganic or methylated species (As(III), As(V), MMA, DMA) in which this element may be distributed in the sample. To perform speciation analysis, a separation technique (e.g. chromatography HPLC) is combined with a suitable atomic spectroscopic detection (e.g. atomic fluorescence spectroscopy AFS). This analytical methodology has been employed to identify arsenic species in particulate matter samples (Fig. 1) that originate from copper smelting².

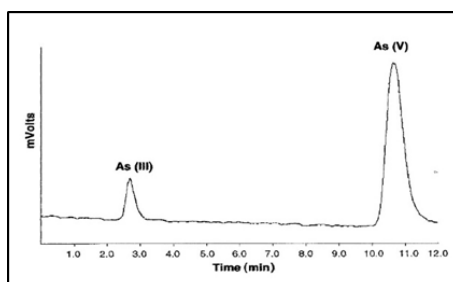


Figure 1. As speciation analysis of a particulate matter samples by HPLC-HG-AFS

¹ K. Wai, S. Wu, X. Li, D. Jaffe, K. Perry, *Environ. Sci. Technol.* **2016**, *50*, 3714-3720

² A. M. Sánchez de la Campa, D. Sánchez-Rodas, L. Alsiofi, A. Alastuey, X. Querol, J.D. de la Rosa, *J. Clean. Prod.* **2018**, *186*, 465-474

COORDINATION CHEMISTRY TO BUILD DREAMS

A. Rodríguez-Diéguez

*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Sciences,
University of Granada,
18071, Granada (Spain); antonio5@ugr.es*

The construction of coordination compounds is a hot topic in crystal engineering that is receiving increased interest from many different areas of science owing to the continuous advances shown by these multifunctional materials.¹ The success of Coordination Polymers (CPs) is mainly due to their intriguing architectures and topologies resulting from the self-assembly of bridging organic ligands with appropriate metal ions or clusters, which offers endless possibilities, given the large list of both components and their combinations obeying the principles of reticular chemistry.² In this regard, an important aspect to exert control toward the desired crystalline frameworks lies in controlling synthetic conditions and the selection of adequate metal ions and organic ligands. Although the particular subclass of metal-organic frameworks (MOFs), enclosing impressive surface areas and versatile pores, occupies an important part of this research area, a wide variety of equally fascinating properties arise from nonporous CPs, among which optical storage, drug delivery, catalysis, magnetism, or luminescence may be highlighted.

In this conference I want to show how, thanks to coordination chemistry, we can design and synthesize any type of material with the aim to work in a wide field of applicability, such as magnetism, luminescence, adsorption, catalysis, spintronics, sensing and biomedicine. Although many authors say that these materials are not the best systems, it is true that coordination chemistry allows us to design all the materials we are able to dream, let our imagination fly and get materials with truly fascinating structures and properties. To show the beauty of design and synthesis, in this conference I will show some examples of different kinds of materials that I have obtained throughout my scientific career, resulting of hard work and illusion of people who have surrounded me in these years.

¹ M.D. Allendorf, V. Stavila, *CrystEngComm*, **2015**, *17*, 229–246.

² E. Colacio, A. Rodríguez-Diéguez, *Polyhedron*, **2014**, *80*, 173–179.

9. Lista de los autores principales

Póster	Autor	Pág.
B-P1	I. M. Agredano	17
B-P2	C. Capel	18
B-P3	J. Cebrián-Carmona	19
B-P4	L. M. Contreras	20
B-P5	R. Fonseca	21
B-P6	A. Galafat	22
B-P7	A. Galafat	23
B-P8	L. García-Abad	24
B-P9	M. J. Jiménez	25
B-P10	M. M. Jurado	26
B-P11	R. Lerma-Moliz	27
B-P12	P. López-García	28
B-P13	J. A. López-González	29
B-P14	M. López-Rodríguez	30
B-P15	J. M. Delgado	31
B-P16	F. P. Martínez	32
B-P17	M.R. Martínez-Gallardo	33
B-P18	A. Morillas	34
B-P19	C. Nájera	35
B-P20	J. V. Reinoso-Moreno	36
B-P21	A. Saborido-Alconchel	37
B-P22	A. Sánchez-Zurano	38
B-P23	A. B. Siles-Castellano	39
B-P24	Y. Soriano-Jerez	40
B-P25	A. J. Toribio	41
B-P26	M. Ortiz	42
B-P-7	R. Salazar-Vergara	43
B-P28	M. J. Estrella-González	44
B-P29	J. D. López-Fábregas	45
CA-P1	D. Alba-Patiño	46
CA-P2	J. Gallegos-Cedillo	47
CA-P3	V. M. Gallegos-Cedillo	48
CA-P4	C. Hernández-Ruíz	49
CA-P5	A. López-Martín	50
CA-P6	A. D. Maldonado	51
CA-P7	P. Martínez-Carricondo	52
CA-P8	F. Navarro-Martínez	53
CA-P9	F. Navarro-Martínez	54
CA-P10	L. O. López	55
CA-P11	F. Orts	56
CA-P12	J. P. Ramos-Requena	57
CA-P13	C. Rodríguez-García	58

Póster	Autor	Pág.
CA-P14	J. Rubio-Ríos	59
CA-P15	J. Salinas-Nieto	60
CA-P16	I. Trujillo-Artero	61
CA-P17	L. M. Vázquez	62
M-P1	E. Caballero-Ontiveros	63
M-P2	M. G. Cabrera-Padilla	64
M-P3	M. Cueto-Avellaneda	65
M-P4	J. F. Gálvez-Rodríguez	66
M-P5	M. D. Gómez-Olvera	67
M-P6	M. N. López-García	68
M-P7	J. F. Mañas-Mañas	69
Q-P1	D. Alba-Elena	70
Q-P2	J. M. Casas-Solvas	71
Q-P3	L. Escot-Navarro	72
Q-P4	A. García-García	73
Q-P5	A. A. García-Valdivia	74
Q-P6	M. García-Valverde	75
Q-P7	A. Hernández-Zanoletty	76
Q-P8	J. L. Hidalgo-Ruiz	77
Q-P9	C. M. López-Berenguel	78
Q-P10	J. L. López-Martínez	79
Q-P11	B. López	80
Q-P12	L. Manzano-Sánchez	81
Q-P13	M. Martínez-López	82
Q-P14	M. Plaza-Garrido	83
Q-P15	A. C. Abreu	84
Q-P16	A. Rivera-Pérez	85
Q-P17	A. Romera-Torres	86
Q-P18	C. Ruiz	87
Q-P19	A. B. Ruiz-Muelle	88
Q-P20	M. Salinas-García	89
Q-P21	E. Sánchez-Lara	90
Q-P22	J. M. Suárez	91
Q-P23	I. Torres-García	92
Q-P24	A. I. Tristán	93
Q-P25	M. Vargas-Pérez	94
CP-1	C. Herrero-Sánchez	95
CP-2	B. Pérez-Esteban	96
CP-3	M.D. Macías-Sánchez	97
CP-4	J. A. Rodríguez-Lallena	98
CP-5	D. Sánchez-Rodas	99
CP-6	A. Rodríguez-Diéguéz	100