

The background of the central section is a close-up, perspective view of a metallic lattice structure. The atoms are represented as dark spheres connected by thin, reflective rods, creating a complex, three-dimensional grid. The lighting is dramatic, with strong highlights and deep shadows, giving it a futuristic and scientific appearance.

V Congreso sobre Materiales Multifuncionales

20 y 21 de mayo de 2024

Almuñécar, Granada



**UNIVERSIDAD
DE GRANADA**

M

MultiMat

Patrocinadores



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

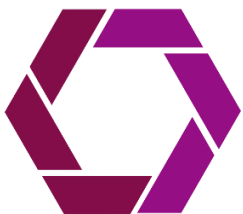
Vicerrectorado de Investigación y
Transferencia



sical
Material para laboratorio
958 582 453 - info@sical2000.es



JÓVENES INVESTIGADORES
QUÍMICOS



GRUPO
ESPECIALIZADO
NANOCIENCIA Y
MATERIALES
MOLECULARES



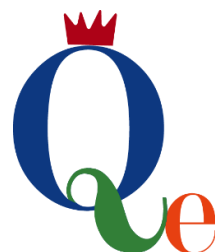
Real Sociedad Española de Química



Sección Territorial de Andalucía Oriental



Facultad de Ciencias





*Sara Rojas Macías
Iñigo Vitorica Yrezabal
Alfonso Salinas Castillo
Antonio Rodríguez Diéguez
Pablo Salcedo Fernández
Víctor Karim Abdelkader Fernández
Juan Ramón Jiménez Gallego
Jonathan Machí Hernández
Samuel Morales Cámara
María del Carmen Contreras Morales*
Editores

© LOS AUTORES: COMITÉ ORGANIZADOR Y COMITÉ CIENTÍFICO

V Congreso sobre Materiales Multifuncionales “MultiMat”





COMITÉ CIENTÍFICO

Guillermo Mínguez Espallargas (ICMOL, Universidad de Valencia)
Diego Pedro Morales (UGR)
Patricia Horcajada Cortés (Instituto IMDEA Energía)

COMITÉ ORGANIZADOR

Sara Rojas Macías (Secretaria, Universidad de Granada)
Íñigo Vitorica Yrezabal (Presidente, Universidad de Granada)
Antonio Rodríguez Diéguez (Coordinador, Universidad de Granada)
Alfonso Salinas Castillo (Universidad de Granada)
Pablo Salcedo Fernández (Universidad de Granada)
Víctor Karim Abdelkader Fernández (Universidad de Granada)
Juan Ramón Jiménez Gallego (Universidad de Granada)
Jonathan Machí Hernández (Universidad de Granada)
Samuel Morales Cámara (Universidad de Granada)
Maria del Carmen Contreras Morales (Universidad de Granada)



MultiMat

Programa

	Lunes	Martes
9:00-9:20	Inauguración	Oral Plenaria 3 Óscar López López
9:20-9:40	Oral Plenaria 1 Sonia Pérez Yáñez	
9:40-10:00		O13 Enrique Rodríguez
10:00-10:20	O1 Sergio Carrasco	O14 Javier Ferrando
10:20-10:40	O2 Manuel Sánchez	O15 Estevan Zingales
10:40-11:00	O3 Ruperto Bermejo	O16 Irene Sevilla
11:00-11:30	Coffee break	
11:30-12:00	Oral invitada 1 Natalia Rey	Oral invitada 2 Raquel Utrera
12:00-12:20	O4 Amparo Navarro	O17 Pablo Cristobal
12:20-12:40	O5 Andoni Zabala	O18 Eva M. García
12:40-13:00	O6 Esther Resines	O19 Víctor K. Abdelkader
13:00-13:20	O7 Carmen Moya	O20 Estefanía Fernández
13:20-13:40	O8 Eider San Sebastian	O21 German Pislinger
13:40-14:00	O9 Jonathan Machí	
14:00-14:20	Almuerzo	
14:20-16:00		
16:00-16:40	Oral Plenaria 2 José M. Delgado López	
16:40-17:00	O10 Laura Razquin	
17:00-17:20	O11 Catalina Biglione	
17:20-17:50	Coffee break	
17:50-18:10	O12 Marta Navarro	
Presentaciones Flash 18:10-18:40	Rebeka Reszegi María Devesa Pablo Salcedo Hanae Boulehjour Laura Mazzei Jesús A. Díaz	

A 3D rendering of a molecular structure, likely a crystal lattice or a network of atoms, with a blue and grey color scheme. The structure is composed of spheres representing atoms, connected by rods representing bonds. The perspective is from an angle, showing the depth of the structure.

Conferencias Plenarias

P1 - TITANIUM(IV) BASED METAL-ORGANIC GELS AND AEROGELS FOR THE PHOTOCATALYTIC CONVERSION OF CO₂ AND HYDROGEN PRODUCTION

Sonia Pérez-Yáñez^{1,2}, Adrián Angulo-Ibáñez¹, Garikoitz Beobide^{1,2}, Oscar Castillo^{1,2}, Ane Ciruela-Zunzunegui¹, Naia Luengo¹, Antonio Luque^{1,2}, Maite Perfecto-Irigaray¹

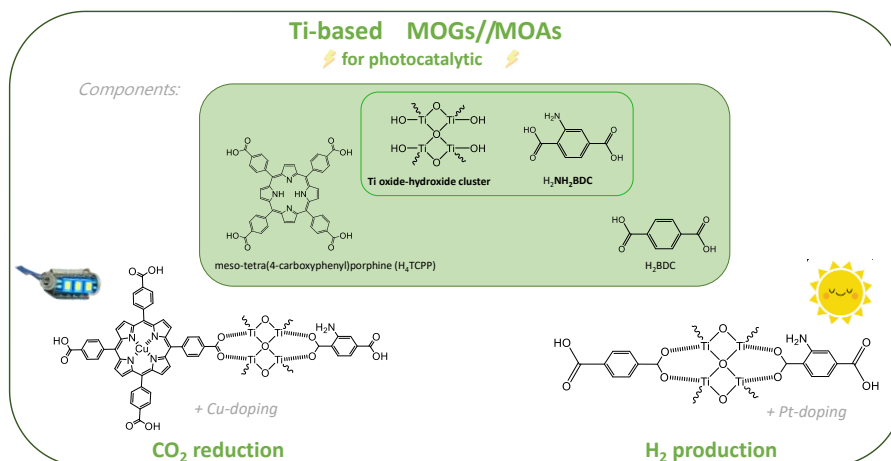
¹Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco (UPV/EHU), 48940 Leioa, Spain

²BCMaterials, Basque Center for Materials, Applications and Nanostructures, UPV/ EHU Science Park, 48940 Leioa, Spain

sonia.perez@ehu.eus

The present communication reports the development of a series of Ti(IV)-based metal-organic gels (MOGs) and aerogels (MOAs) that have been employed for the continuous visible-light driven conversion of CO₂ into alcohols (*i.e.* methanol and ethanol) and photocatalytic hydrogen evolution reaction (HER). The materials were chemically, microstructurally, and optically characterized, with the aim of getting an insight into the structure-activity relationship.

More concisely, herein reported Ti(IV)-based materials are comprised by octanuclear Ti(IV) oxo-clusters which are crosslinked by different polycarboxylic ligands such as benzene-1,4-dicarboxylato (BDC), 2-aminobenzene-1,4-dicarboxylato (NH₂BDC), and meso-tetra(4-carboxyphenyl)porphine (TCPP) depending on the final application. The CO₂ photoreduction experiments performed in an optofluidic microreactor illuminated with visible LED light exhibited performances comparable to those reported for the best-performing MOFs and common inorganic photocatalysts.[1] The post-synthetic Cu(II) metalation of the TCPP containing MOGs inverted the selectivity towards more demanding ethanol production.[2] In the case of hydrogen production, when platinum is included as co-catalyst in the reaction media or anchored in the MOG structure, the HER performance is markedly increased.[3]



Referencias

- [1] A. Angulo-Ibáñez, M. Perfecto-Irigaray, I. Merino-García, N. Luengo, A.M. Goitandia, J. Albo, E. Aranzabe, G. Beobide, O. Castillo, S. Pérez-Yáñez, *Mater. Today Energy*, **2022**, 30, 101178(1-11).
- [2] M. Perfecto-Irigaray, I. Merino-García, J. Albo, G. Beobide, O. Castillo, A. Luque, S. Pérez-Yáñez, *Mater. Today Energy*, **2023**, 36, 101346(1-14).
- [3] M. Perfecto-Irigaray, G. Beobide, O. Castillo, M.G. Allan, M.F. Kühnel, A. Luque, H. Singh, A.K. Yadav, S. Pérez-Yáñez, *Dalton Trans*, **2024**, in revision.

Agradecimientos

The authors gratefully acknowledge the financial support from the Basque Government (IT1722-22), University of the Basque Country (EHU-N23/51) and the Spanish Ministry of Science and Innovation (TED2021-129810B-C22 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and by European Union NextGenerationEU/PRTR, and PID2022-138968NB-C22 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033).

P2 - NANOMATERIALES BIOINSPIRADOS MODIFICADOS para una agricultura más sostenible: Del laboratorio al invernadero.

José Manuel Delgado-López

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

jmdl@ugr.es

El uso de agroquímicos es la opción tradicional de los agricultores para garantizar la productividad de los cultivos y/o controlar posibles enfermedades o plagas. Sin embargo, su uso indiscriminado está ocasionando graves problemas medioambientales, asociados principalmente a su baja eficiencia y alta toxicidad. Uno de los ejemplos más llamativo es la situación actual del Mar Menor (Murcia) declarado recientemente como zona vulnerable a la contaminación por nitratos. Por lo tanto, es muy necesario el desarrollo de nuevos productos que garanticen la seguridad alimentaria y, al mismo tiempo, preserven el medio ambiente (o al menos mitiguen los efectos de los tratamientos convencionales) [1].

En los últimos años, nuestro grupo de investigación ha desarrollado nanomateriales bioinspirados en la nanoestructura ósea, *i.e.*, nanopartículas de fosfato de calcio que poseen alta área específica, son inocuas (compuestas de los nutrientes Ca y P), biodegradables y parcialmente solubles en agua (dependiente del pH). Además, mediante rutas sintéticas basadas en la química verde y cumpliendo los principios DNSH (*Do no significant Harm*), y escalables (lo que es necesario para su explotación comercial) hemos modificado la estructura de las nanopartículas para doparlas con especies activas de especial interés en agricultura (nutrientes, bioestimulantes, bactericidas, herbicidas, etc) [2-4].

En esta comunicación, presentaré los resultados obtenidos sobre la síntesis y dopado de estos nano-agroquímicos, su caracterización y los resultados obtenidos en ensayos realizados en plantas, tanto *in vitro* (condiciones controladas) como *in vivo* (ensayos reales en campo) que demuestran la mayor eficiencia de estos nanomateriales en comparación con los tratamientos convencionales. En colaboración con empresas del sector, hemos conseguido producir estos nano-agroquímicos a escala pre-comercial lo que ha permitido acercarlos al mercado como una alternativa más eficiente y sostenible a los tratamientos comercializados actualmente.

Referencias

- [1] DeRosa, M., Monreal, C., Schnitzer, M. *et al.* Nanotechnology in fertilizers. *Nature Nanotech* **5**, 91 (2010).
- [2] Ramírez-Rodríguez, G. B.; Dal Sasso, G.; Carmona, F. J.; Miguel-Rojas, C.; Pérez-De-Luque, A.; Masciocchi, N.; Guagliardi, A.; Delgado-López, J. M. Engineering Biomimetic Calcium Phosphate Nanoparticles: A Green Synthesis of Slow-Release Multinutrient (NPK) Nanofertilizers. *ACS Appl. Bio Mater.* **2020**, *3* (3), 1344– 1353.
- [3] Parra-Torrejón, B.; Ramírez-Rodríguez, G. B.; Giménez-Bañón, M. J.; Moreno-Olivares, J. D.; Paladines-Quezada, D. F.; Gil-Muñoz, R.; Delgado-López, J. M. Nanoelicitors with Prolonged Retention and Sustained Release to Produce Beneficial Compounds in Wines. *Environ. Sci. Nano* **2021**, *8* (12), 3524– 3535.
- [4] Parra-Torrejón, B.; Cáceres, A.; Sánchez, M.; Sainz, L.; Guzmán, M.; Bermúdez-Perez, F.J.; Ramírez-Rodríguez, G.B.; Delgado-López, J.M. Multifunctional Nanomaterials for Biofortification and Protection of Tomato Plants. *Environ. Sci. Technol.* **2023**, *57*, 40, 14950–14960.

Agradecimientos

Investigación financiada con los siguientes proyectos: NanoFerti II (CPP2021-008801), SOPNano (PDC2022-133191-I00) financiados por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y NextGenerationEU/PRTRPDC; ECOFUN financiado por la Agencia Europea de investigación (REA) mediante las acciones MSCA (HORIZON-MSCA-2023-PF-01-01, Grant Agreement number 101150434).

P3 - NUEVOS MATERIALES MOLECULARES DIRIGIDOS AL CÁNCER Y ALZHEIMER

Óscar López¹, Paloma Begines,¹ Verónica Calcatierra,¹ Jesús Roldán-Peña,¹ Adrián Puerta,² Irene Lagunes,² Alma Fuentes-Aguilar,³ Laura L. Romero-Hernández,³ Mónica Martínez-Montiel,³ Socorro-Meza Reyes,³ José Luis Vega-Báez,³ Penélope Merino-Montiel,³ Sara Montiel-Smith,³ Alessio Nocentini,⁴ Manuela Bartolini,⁵ Maria L. Bolognesi,⁵ Jelena Dinić,⁶ Milica Pešić,⁶ Claudiu T. Supuran,⁴ José M. Padrón,² José G. Fernández-Bolaños¹

¹Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de Sevilla, c/Profesor García González 1, 41012, Sevilla

²BioLab, Instituto Universitario de Bio-Orgánica “Antonio González”, Universidad de la Laguna, C/ Astrofísico Francisco Sánchez 2, 38206, La Laguna, Spain

³Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Ciudad Universitaria, 72570 Puebla, PUE, Mexico

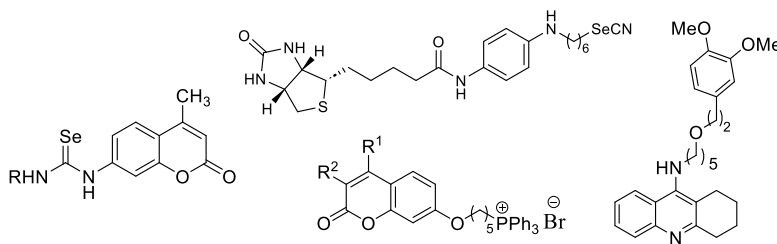
⁴NEUROFARBA Department, Sezione di Scienze Farmaceutiche e Nutraceutiche, University of Florence, 50019, Florence, Italy

⁵Department of Pharmacy and Biotechnology, Alma Mater Studiorum University of Bologna, via Belmeloro 6, 40126 Bologna, Italy

⁶Institute for Biological Research “Siniša Stanković”, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Despota Stefana 142, 11060 Belgrade, Serbia

osc-lopez@us.es

La enorme complejidad de enfermedades como el cáncer y el Alzheimer ha obligado a un cambio de paradigma en el diseño de fármacos, conduciendo a materiales multidiana [1], que combinan una acción dirigida hacia algunas de las principales dianas terapéuticas. En este contexto, hemos desarrollado [2–6] una amplia librería de compuestos con marcada acción antiproliferativa o anti-Alzheimer, combinado dos farmacóforos, y haciendo uso de plataformas naturales (ej. polifenoles, cumarinas, esteroides, carbohidratos). Muchos de estos derivados, en cuyos mecanismos de acción hemos profundizado, mejoran la potencia de fármacos.



Referencias

- [1] J. Zhou *et al.* *J. Med. Chem.* **2019**, 62, 8881–8914.
- [2] L.L. Romero-Hernández *et al.* *Eur. J. Med. Chem.* **2015**, 99, 67–81.
- [3] I. Lagunes *et al.* *Eur. J. Med. Chem.* **2019**, 179, 493–501.
- [4] J.M. Roldán-Peña *et al.* *Eur. J. Med. Chem.* **2019**, 181, 111550
- [5] J.M. Roldán-Peña *et al.* *Bioorg. Chem.* **2023**, 133, 106410.
- [6] A. Fuentes-Aguilar *et al.* *Bioorg. Chem.* **2024**, 145, 107168.

Agradecimientos

Agradecemos al MICIN (proyecto PID2020-116460RB-I00, MCIN/AEI/10.13039/501100011033) y a la Junta de Andalucía (FQM134) por el apoyo financiero.



Comunicaciones Orales Invitadas

11 - SÍNTESIS ASISTIDA POR MICROONDAS DE AEROGEL MULTIFUNCIONALES

Natalia Rey-Raap, Judith González-Lavín, Mario Sánchez-Suárez, Elisa Martínez-Díaz, Ana Arenillas

Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono, INCAR-CSIC, Francisco Pintado Fe 26, 33011 Oviedo, España.

natalia.rey@incar.csic.es

Los materiales sintéticos presentan la gran ventaja de poderse obtener con una química muy controlada, evitando la presencia de impurezas, propiedad esencial para muchas aplicaciones, especialmente aquellas relacionadas con la conversión, almacenamiento y generación de energía. Una metodología muy interesante para obtener materiales sintéticos es el proceso sol-gel, que permite sintetizar materiales, no solo controlando totalmente su composición química, sino también otras propiedades como la morfología, porosidad, estructura y tortuosidad. Durante la reacción sol-gel se forman partículas poliméricas que se unen y agregan unas a otras formando una red tridimensional. El tamaño y la agregación entre las partículas se pueden controlar modificando las condiciones de síntesis, pudiéndose así diseñar las propiedades texturales y morfológicas de estos materiales, conocidos como aerogeles. Por otro lado, la síntesis sol-gel permite utilizar un gran número de precursores de diferente naturaleza dando lugar a aerogeles orgánicos o de carbono, inorgánicos o metálicos e híbridos orgánico/inorgánico, Figura 1 [1-4]. Independientemente de los precursores utilizados, las rutas de síntesis convencionales implican largos tiempos de síntesis y el uso de precursores tóxicos. Además, en algunos casos, todavía quedan algunos puntos críticos para lograr un diseño racional y controlar todas las propiedades fisicoquímicas, requisito fundamental para producir aerogeles multifuncionales. Para abordar estos problemas, en este trabajo se utiliza i) la tecnología microondas como método de calentamiento durante la síntesis, ii) precursores sostenibles, y iii) enfoques novedosos para modificar y/o incorporar grupos funcionales superficiales. De esta forma es posible optimizar y mejorar las propiedades de los aerogeles orgánicos, inorgánicos e híbridos y, por tanto, ampliar sus campos de aplicación.

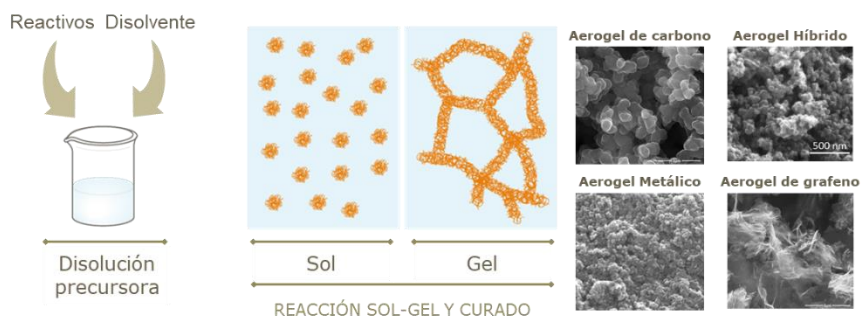


Figura 1. Esquema de la metodología sol-gel y morfología de aerogeles de distinta naturaleza.

Referencias

- [1] A. Martínez-Lázaro, M.H. Rodríguez-Barajas, N. Rey-Raap, F.I. Espinosa, L. Álvarez-Contreras, J. Ledesma-García, A. Arenillas, L.G. Arriaga, *Materials Today Nano*, 2023, 22, 100308.
- [2] J. Gonzalez-Lavin, A. Arenillas, N. Rey-Raap, *ACS Appl Nano Mater*, 2023, 6, 18582-18591
- [3] S.L. Flores-López, B. Lobato, N. Rey-Raap, I. Cameán, A.B. García, A. Arenillas, *Nanomaterials*, 2023,13, 458.
- [4] N. Rey-Raap, S.L. Flores-López, L. dos Santos-Gómez, A. Brigandì, M. Thomas, A.E. Stoyanova, F. Lufrano, A. Arenillas, *ChemElectroChem*, 2023, 10, e202300161.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado con la Beca Leonardo a Investigadores y Creadores Culturales 2023 de la Fundación BBVA y la ayuda RyC2021-031456-I financiada por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y la Unión Europea NexGenerationEU/PRTR.

12 - COPPER COMPOUNDS FOR LUMINESCENT AND OPTOELECTRONIC APPLICATIONS

Raquel Utrera¹, José Sánchez Costa¹, Sandrine Perruchas², Karine Costuas³

¹Instituto Madrileño de Estudios Avanzados, C/ Faraday, 9, 28049, Madrid

²Institut des Matériaux de Nantes, 2 Chemin de la Houssinière, 44300, Nantes, Francia

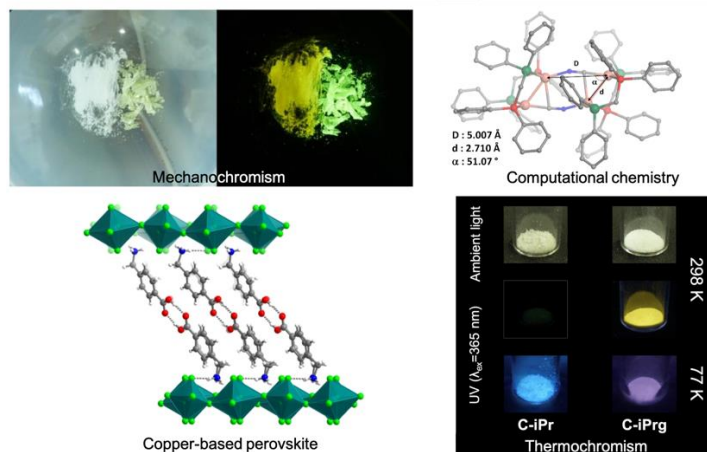
³Institut des Sciences Chimiques de Rennes, 263 Av. Général Leclerc, 35700 Rennes, Francia

raquel.utrera@imdea.org

Materials exhibiting luminescence stimuli-responsive properties, present potential application as detection systems. Among these materials, copper (I) iodide molecular clusters coordinated by phosphine ligands, exhibit thermochromic and mechanochromic luminescence properties [1,2]. These compounds are characterized by a change of their emission wavelength in response to temperature or mechanical stress. The establishment of structure- properties relationships permit to study the mechanisms responsible for their properties. The main characterization techniques used are solid-state NMR, X-ray diffraction, Infrared and Raman spectroscopies. In addition to the thermo and mechanochromic properties, these compounds have the particularity of exhibiting aggregation-induced emission (AIE) properties.

The understanding of properties is crucial for applications. Therefore, DFT (Density functional theory) calculations are also carried out to rationalize the different results and in particular the optical properties [3].

In the last years, copper has been proposed as a substituent in lead perovskite-based devices due to its non-toxic nature [4]. Currently, we are investigating the use of copper perovskites for solar cells.



References

- [1] Utrera-Melero, R.; Huitorel, B.; Cordier, M.; Mevellec, J.-Y.; Massuyeau, F.; Latouche, C.; Martineau-Corcos, C.; Perruchas, S., *Inorg. Chem.* **2020**, 59 (18), 13607–13620
- [2] Utrera-Melero, R.; Huitorel, B.; Cordier, M.; Massuyeau, F.; Mevellec, J.-Y.; Stephant, N.; Deniard, P.; Latouche, C.; Martineau-Corcos, C.; Perruchas, S., *Journal of Materials Chemistry C*, **2021**, 9, 7991-8001
- [3] Lecourt, C.; Utrera Melero, R.; Schriller, J.; Moutier, F.; Dorcet, V.; Calvez, G.; Poidevin, C.; Costuas, K.; Scheer, M.; Lescop, C., *Inorganic Chemistry Frontiers*, **2023**, 10, 6976
- [4] Aubrey, M.L., Saldivar Valdes, A., Filip, M.R., Connor, B. A., Lindquist, K. P., Neaton, J. B., Karunadasa, H. I., *Nature*, **2021**, 597, 355–359

M

MultiMat



Comunicaciones
Orales

O1 - THE QUEST FOR CATALYTIC PERFECTION: JOURNEYING THROUGH THE REALM OF DEFECTIVE METAL-ORGANIC FRAMEWORKS

Sergio Carrasco¹, Javier Ferrando¹, Guillermo Gortázar¹, Paula García-Fraile¹, Clara García-Abad¹, Giacomo Armani¹, Raúl Mulero¹, Ignacio Lemir¹, Yolanda Pérez^{1,2}, Patricia Horcajada¹

¹Adv. Porous Materials Unit, IMDEA Energy. Avda. Ramón de la Sagra 3, 28935, Móstoles

²Dpt. Biology and Geology, Physics and Inorganic Chemistry, University Rey Juan Carlos. Tulipán s/n, 28933, Móstoles

sergio.carrasco@imdea.org

Metal-organic frameworks (MOFs) are porous coordination polymers that can perform as potential catalytic supports thanks to their inherent porosity and the presence of coordinatively unsaturated sites (CUS), allowing for a fast diffusion of chemicals and their interaction with open metal sites, thus decreasing the energy barrier of a broad variety of reactions [1]. Different actions have been oriented to improve the accessibility to CUS, the diffusion of reagents/products and the physico-chemical properties (*i.e.* activity, porosity and stability) of the final material. This is known as defect engineering [2], for which we present here some examples of interesting catalytic reactions.

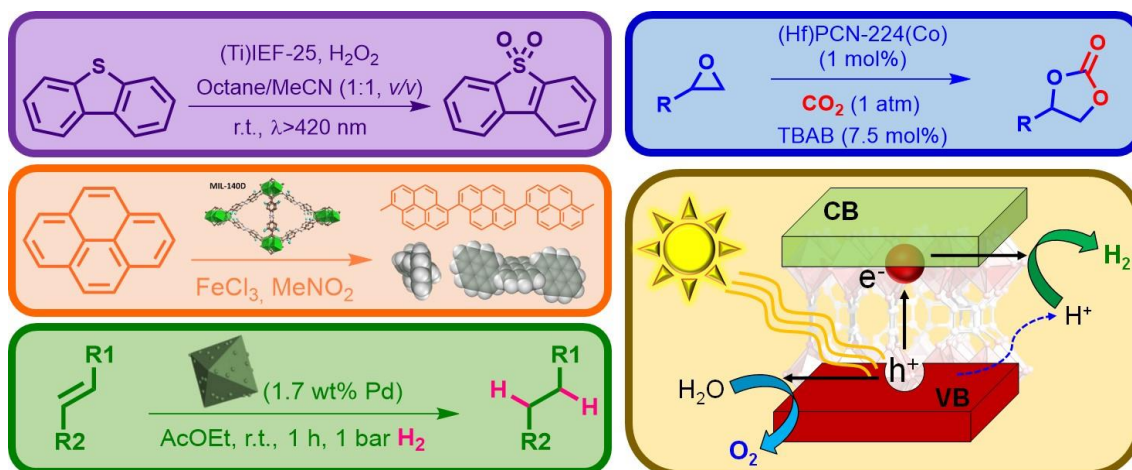


Figure 1. Selection of catalytic MOFs & processes developed at IMDEA-Energy (from top to bottom): left) photo-oxidative desulfurization, pyrene polymerization, alkene hydrogenation; right) CO₂ cycloaddition and overall water splitting.

Among them, we highlight (**Figure 1**): 1) the photo-oxidative desulfurization of diesel mixtures (IEF-25) and CO₂ cycloaddition (PCN-224) with porphyrin-based MOFs [3]; 2) the regioselective polymerisation of pyrene with the azo-derivative ligand-based MIL-140D; 3) the selective hydrogenation of alkenes using Pd@UiO-66-NH₂; and 4) the photocatalytic overall water splitting for green hydrogen generation with IEF-11 [4]. All these materials have been synthesised by using microwave radiation, modulators or doping agents [5], strategies for inducing defective networks.

References

- [1] S. Yuan, L. Feng, K. Wang, J. Pang, M. Bosch, C. Lollar, Y. Sun, J. Qin, X. Yang, P. Zhang, Q. Wang, L. Zou, Y. Zhang, L. Zhang, Y. Fang, J. Li, H.-C. Zhou, *Adv. Mater.*, **2018**, 30, 1704303.
- [2] Y. Shan, G. Zhang, Y. Shi, H. Pang, *Cell Rep. Phys. Sci.*, **2023**, 4, 101301.
- [3] S. Carrasco, G. Orcajo, F. Martínez, I. Imaz, S. Kavak, D. Arenas-Esteban, D. MasPOCH, S. Bals, G. Calleja, P. Horcajada, *Mater. Today Adv.*, **2023**, 19, 100390.
- [4] P. Salcedo-Abraira, A. A. Babaryk, E. Montero-Lanzuela, O. R. Contreras-Almengor, M. Cabrero-Antonino, E. Svensson Grape, T. Willhammar, S. Navalón, E. Elkáim, H. García, P. Horcajada, *Adv. Mater.*, **2021**, 33, 2106627.
- [5] S. Carrasco, A. Sanz-Marco, B. Martín-Matute, *Mater. Today Chem.*, **2023**, 31, 101618.

Acknowledgements

The European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie MSCA-COFUND grant agreement No 754382 (GOT Energy Talent) and MSCA-ITN grant agreement No 860942 (HeatNMof). Retos Investigación MOFSEIDON (grant PID2019-104228RB-I00) project, Generación de Conocimiento NAPOLION (grant PID2022-139956OB-I00) project and Colaboración Público-Privada HYLIOS (grant CPP2022-010052) project.

O2 - TOWARDS INTRACELLULAR FORMATION OF METAL COMPLEXES

Manu Sanchez,¹ & Carlos Sanchez-Cano.^{1,2,3}

¹ Donostia International Physics Center (DIPC), Manuel Lardizabal Ibilbidea, 4, 20018 Donostia, Gipuzkoa

² Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia, Kimika Fakultatea, Euskal Herriko Unibertsitatea UPV/EHU, 20018 Donostia-San Sebastian, Spain

³ Ikerbasque, Basque Foundation for Science. Plaza de Euskadi 5, Bilbao 48009, Spain

Metal complexes can be used for multiple applications inside cells, and are promising systems with great potential for therapeutic and biotechnological applications. Still, they can suffer from processes leading to intracellular degradation, which can cause premature deactivation and decrease in biological efficiency, but also unwanted toxicity upon release of free metal ions.

A possible alternative to solve the low intracellular stability of metal complexes is the use of ligands with high affinity towards biometals (Fe, Cu, Zn). Ideally, such ligands would coordinate to the labile metal ions present in the cell, forming *in situ* active complexes and becoming available again after degradation of the complex.

However, any successful design strategy for the intracellular *in situ* formation of a metal complex needs to understand the chemical environment where it would be generated and perform its activity. This is quite complicated, as the presence of large metabolic variations, but also compartmentalisation, often leads to the existence of multiple chemical microenvironments within the same cell. Still, the chemical conditions found in certain cellular organelles are relatively well known and stable over time. This is the case of lysosomes, which is important for cellular transport, proteolysis and metal homeostasis, and contain stable pools of Cu, Zn and Fe ions (1-5 μM) (1).

As such, we are exploring *in vitro* the ability of different ligands to chelate metal ions under lysosomal conditions.

We intend to link the successful ligand candidates to nanoparticles (NPs), as NPs get normally introduced into cells by endosomal routes, reaching lysosomes after endosomal maturation and can stay there for long periods of time (2). Ultimately, this aims to obtain viable bioactive metal complexes inside cells with increased biocompatibility and biostability.

References

[1] Lysosomal Physiology. *Annu. Rev. Physiol.*, **2015**, *77*, 57

[2] In vitro interaction of colloidal nanoparticles with mammalian cells: What have we learned thus far? *Beilstein J. Nanotechnol.*, **2014**, *5*, 1477

O3 - NUEVOS NANOMATERIALES BIFUNCIONALES BASADOS EN BIOPOLÍMEROS MAGNÉTICOS Y FLUORESCENTES

Ruperto Bermejo¹, M^a Carmen Hurtado¹, M^a Carmen Murillo¹, Rafael Cuesta², Félix López³, Natalie Korbee³ and F. Gabriel Acién⁴

¹Departamento de Química Física y Analítica, Escuela Politécnica Superior de Linares, Campus Científico Tecnológico de Linares, Universidad de Jaén, 23700 Linares (Jaén), Spain

² Departamento de Química Inorgánica y Orgánica, Universidad de Jaén, 23700 Linares (Jaén), Spain

³ Departamento de Ecología y Geología, Universidad de Málaga (IBYDA), 29071 Málaga, Spain

⁴ Ciesol Solar Energy research Centre, Joint Centre University of Almeria-CIEMAT, 04120 Almería, Spain

rbermejo@ujaen.es

Las ficobiliproteínas son una familia de macromoléculas procedentes de micro y macroalgas, que poseen excelentes propiedades fluorescentes y que presentan múltiples aplicaciones en sectores tales como los de la alimentación y la salud (inmunoensayos, efectos antioxidantes y anticancerígenos, ensayos FRET con anticuerpos, citometría de flujo, contaje individual de moléculas, colorantes naturales, etc.) [1]. Por otro lado, la ferritina es la principal proteína almacenadora, transportadora y liberadora de forma controlada de hierro en los sistemas biológicos, constituyendo un material con altas prestaciones y con gran potencial de utilización en áreas como la biomedicina [2]. Así, la ferritina nativa contiene residuos de lisina y cisteína en la superficie externa que pueden utilizarse para acoplar covalentemente moléculas que pueden aportar una nueva funcionalidad a la partícula de ferritina. Por lo tanto, la manipulación de la superficie exterior de las partículas de ferritina podría producir una biblioteca de nanopartículas bifuncionales para aplicaciones en ciencias de los materiales y nanotecnología.

Actualmente, la obtención de nanomateriales multifuncionales es un objetivo importante dentro del sector nanotecnológico y por ello nuestro grupo ha puesto su atención en la coexistencia de la bifuncionalidad magnético-fluorescente, que permite la detección in situ y la monitorización del movimiento de las nanopartículas bajo un campo magnético externo, siguiendo la señal fluorescente, lo que es de gran interés desde un punto de vista terapéutico y diagnóstico. Mediante una nueva metodología basada en filtración por membranas, se han conseguido purificar R-ficoeritrina (R-PE) y R-ficocianina (R-PC) procedentes de la macroalga *Porphyra linearis*, habiéndose obtenido una nueva nanopartícula bifuncional que viene a ampliar el catálogo de las ya previamente obtenidas por nuestro grupo y formadas por la unión de ferritina a otras biliproteínas (C-PC, APC y BPE). Se ha realizado una completa caracterización espectroscópica y estructural de los nuevos nanomateriales, utilizando espectroscopías uv-visible y de fluorescencia tanto de estado estacionario como resuelta en el tiempo.

Referencias

[1] Ji, L., Qiu, S., Wang, Z., Zhao, C., Tang, B., Gao, Z. & Fan, J., Phycobiliproteins from algae: current updates in sustainable production and applications in food and health, *Food Research International*, **2023**, 126, 112737.

[2] B. Fernández, N. Gálvez, P. Sánchez, R. Cuesta, R. Bermejo & J.M. Domínguez-Vera, Fluorescence resonance energy transfer in ferritin labeled with multiple fluorescent dyes, *MJ. Biol. Inorg. Chem.*, **2008**, 13, 349-355.

Agradecimientos

M. Murillo agradece al Ministerio de Ciencia e Innovación del Gobierno de España por su contrato postdoctoral dentro del proyecto ALGA-HUB (TED 2021-131555B-C21). M. Hurtado agradece al Ministerio de Trabajo y Economía Social del gobierno de España por su contrato de investigación dentro del "Programa Investigo" del Servicio Público de Empleo estatal (SEPE-NextGenerationEU).

O4 - DESIGNING pH FLUORESCENT SENSORS THROUGH EXCITED STATE INTRAMOLECULAR PROTON TRANSFER (ESIPT) MECHANISM

Amparo Navarro¹, Julián Rodríguez-López², Rodrigo Plaza-Pedroche², M. Paz Fernández-Liencre¹, Sonia B. Jiménez-Pulido³, Nuria Illán-Cabeza³, Sylvain Achelle⁴

¹Universidad de Jaén, Dpto. de Química Física y Analítica, Facultad de Ciencias Experimentales, Campus Las Lagunillas, 23071 Jaén, Spain.

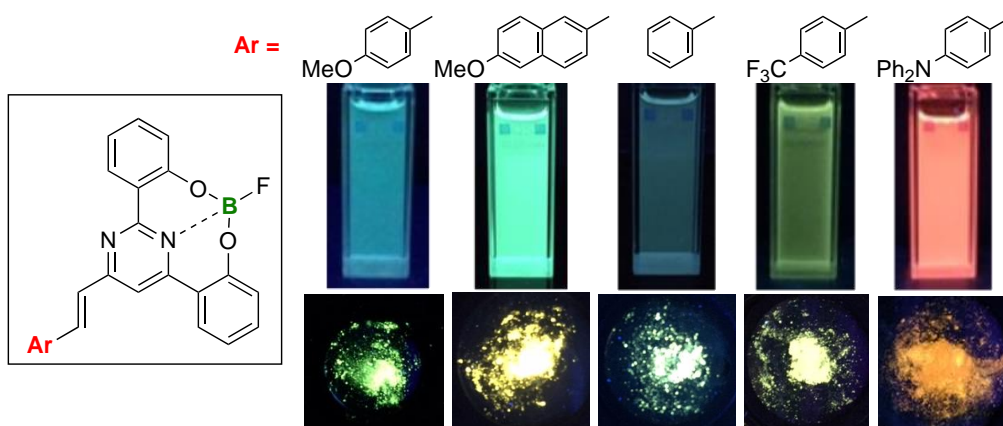
²Universidad de Castilla-La Mancha, Área de Química Orgánica, Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas, Avda. Camilo José Cela 10, 13071 Ciudad Real, Spain.

³Universidad de Jaén, Dpto. de Química Inorgánica y Orgánica, Facultad de Ciencias Experimentales, Campus Las Lagunillas, 23071 Jaén, Spain.

⁴Univ. Rennes, CNRS, Institut des Sciences Chimiques de Rennes (ISC), UMR 6226, F-35000 Rennes, France.

anavarro@ujaen.es

We present a novel series of 6-arylvinyl-2,4-bis(2'-hydroxyphenyl)pyrimidines whose luminescent properties are strongly influenced by the nature of the end groups on the arylvinylene fragment, allowing for the tuning of the emission color from blue to red. Similar to their 2-(2'-hydroxyphenyl)pyrimidine counterparts [1], the non-emissive properties of these compounds could be attributed to the occurrence of a *dual* excited-state intramolecular proton transfer (ESIPT) process from the OH groups to the nitrogen atoms of the pyrimidine ring upon photoexcitation. The non-fluorescent emission can be reversibly *switched on* by inhibiting the ESIPT process through protonation. Nevertheless, the rigid tridentate O⁻N⁺O⁻ chelating ligands enable the synthesis of a novel class of four-coordinate donor-acceptor organoboron compounds in which fluorescence was successfully restored both in solution and in the solid state.



References

[1] R. Plaza-Pedroche, *et al.* Excited-State Intramolecular Proton Transfer in 2-(2'- Hydroxyphenyl)pyrimidines: Synthesis, Optical Properties, and Theoretical Studies. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2022**, *14*, 24964–24979.

Acknowledgements

Funding from the Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha/FEDER is gratefully acknowledged by J. R.-L., A. N., and S. A. (project SBPLY/21/180501/000042).

O5 - IMANES MONOMOLECULARES CON RENDIMIENTO VARIABLE: INFLUENCIA DE LA CARGA ELECTRÓNICA EN EL PLANO ECUATORIAL

Andoni Zabala-Lekuona¹, Javier Cepeda¹, Nina P. Gritsan², Antonio Rodríguez-Diéguez³, José M. Seco¹, Enrique Colacio³

¹Departamento de Química Aplicada, Facultad de Química, Universidad del País Vasco UPV/EHU, Paseo Manuel Lardizabal 3, 20018, Donostia

²Voevodsky Institute of Chemical Kinetics and Combustion, SB RAS, 3 Institutskaya Str., 630090 Novosibirsk, Russian Federation

³Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, C/ Severo Ochoa s/n, 18071, Granada

andoni.zabala@ehu.eus

Entre los imanes monomoleculares (SMMs, Single-molecule magnets), aquellos basados en iones lantánido han demostrado gran rendimiento en términos de temperatura de bloqueo. Los metallocenos de disprosio(III), por ejemplo, han superado la barrera del nitrógeno líquido.¹ No obstante, este tipo de materiales son sensibles al aire y requieren de diseños muy específicos para que el plano ecuatorial no esté ocupado por otros ligandos.

Normalmente, los compuestos de coordinación basados en lantánidos presentan números de coordinación elevados (>8) y poca simetría. Esto puede ser un problema, ya que dificulta notablemente el diseño de un campo ligando apropiado y el rendimiento magnético está estrictamente relacionado a ello. Con lo cual, ser capaz de controlar la posición de los átomos y poder cambiar su naturaleza es esencial para obtener compuestos que presenten relajación lenta de la magnetización a altas temperaturas.

En esta comunicación presentamos un complejo de tipo bis(ZnDy) en el cual podemos modificar dos posiciones (individual o simultáneamente) en el plano ecuatorial. Así, hemos sido capaces de obtener sistemas con barreras de energía muy altas o casi nulas, las cuales impiden (o no) la reorientación de la magnetización.

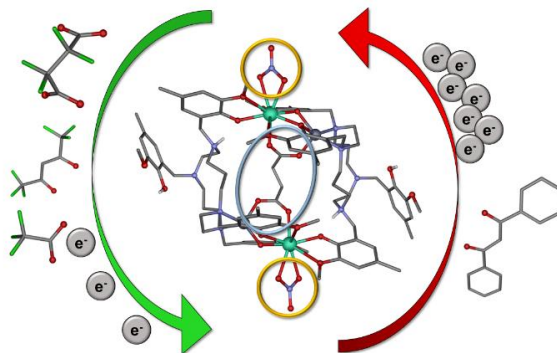


Figura 1.- Jugando con la esfera de coordinación del ion Dy(III).

Referencias

[1] F.-S., Guo, B.M. Day, Y.-C., Chen, M.-L. Tong, A. Mansikkamäki, R.A. Layfield, *Science*, **2018**, 362, 1400-1403.

Agradecimientos

Gobierno Vasco/Eusko Jaurlaritza (IT1755-22), Red Guipuzcoana de Ciencia, Tecnología e Innovación (DG23/16) y Programa de Ayudas a la Investigación Colaborativa en áreas estratégicas ELKARTEK del Gobierno Vasco (bmG21).

O6 - SWITCHABLE SPIN CROSSOVER MATERIAL FOR PASSIVE CONTROL OF TEMPERATURE FLUCTUATIONS IN BUILDINGS

Esther Resines-Urien,¹ Miguel Ángel García García-Tuñón,² Mar García-Hernández,³ Jose Alberto Rodríguez-Velamazán,⁴ Ana Espinosa,³ and Jose Sánchez Costa¹

¹IMDEA Nanociencia, C/ Faraday 9, Madrid 28049, Spain

²ICV-CSIC, C/Kelsen s/n, Madrid 28240, Spain.

³ICMM-CSIC, C/Sor Juana Inés de la Cruz, 3, 28049, Madrid, Spain.

⁴Institut Laue-Langevin, 71 avenue des Martyrs, BP 156, 38042, Grenoble Cedex 9, France.

esther.resines@imdea.org

Nowadays, building thermalization is a widespread human necessity, accounting for 28% of energy-related CO₂ worldwide emissions.^[1] These emissions are a major contributor to climate change, which has become one of the biggest concerns of humankind.^[2] Thus, the growing energy-saving and environmental protection demand have prompted the development and implementation of more energy efficient and environmentally friendly thermalization technology. In this regard, remarkable efforts have been focused on the implementation of passive thermal regulation systems, that can be incorporated directly into windows^[3] roofs, or walls of buildings and operate without the need for electricity.^[4]

Here, it is demonstrated that the heat generated by the sun is sufficient to produce a partial spin transition in a spin crossover (SCO) material. SCO materials exhibit a reversible transition, between the high spin and low spin electronic states through the application of external stimuli such as temperature.^[5] This SCO leads to a cooling effect with respect to other materials, due to an increase in light reflection resulting from the color change (from pink to white) and the energy absorption associated with the spin transition. In addition, when the material is cooled, a dampening of the temperature decrease is produced due to the SCO energy release. Therefore, these materials can be used to reduce temperature fluctuations, and could potentially be implemented for passive temperature control in buildings. Interestingly, SCO molecule-based materials are remarkably stable upon cycling and highly versatile, allowing for the design of compounds adapting the intended properties (transition temperature and hysteresis) for the desired climatic conditions.

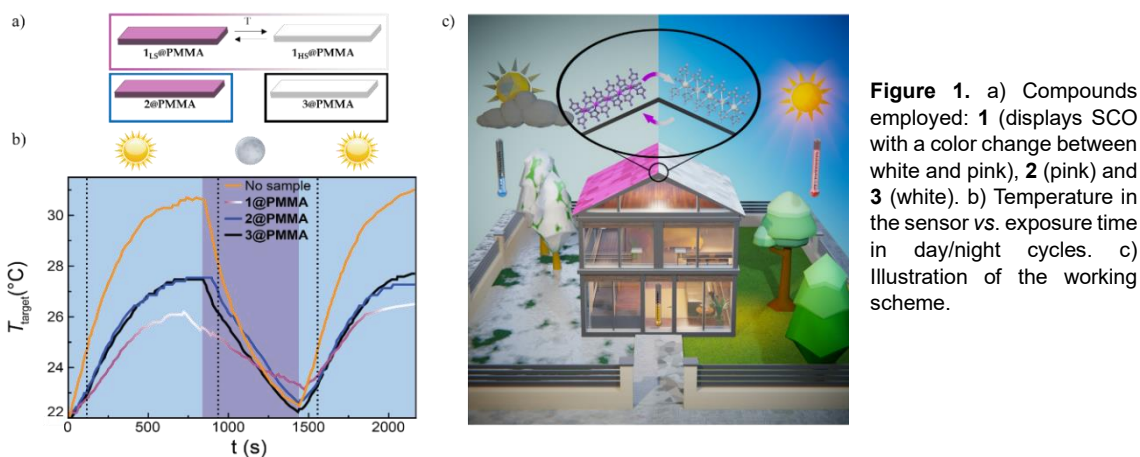


Figure 1. a) Compounds employed: **1** (displays SCO with a color change between white and pink), **2** (pink) and **3** (white). b) Temperature in the sensor vs. exposure time in day/night cycles. c) Illustration of the working scheme.

References

- [1] International Energy Agency "The Critical Role of Buildings, Perspectives for the Clean Energy Transition – Analysis", <https://www.iea.org/reports/the-critical-role-of-buildings> (accessed: November 2020).
- [2] Crowley, T. J.; Berner, R. A.; *Science*, **2001**, 292, 870-872.
- [3] Wang, S.; Zhou, Y.; Jiang, T.; Yang, R.; Tan, G.; Long, Y.; *Nano Energy*, **2021**, 89, 106440.
- [4] Granqvist, C. G.; *Adv. Mater.*, **2003**, 15, 1789-1803.
- [5] Vallone, S.P.; Tantillo, A.N.; dos Santos, A.M.; Molaison, J.J.; Kulmaczewski, R.; Chapoy, A.; Ahmadi, P.; Halcrow, M.A.; Sandeman, K.G.; *Coord. Chem. Rev.*, **2017**, 346, 176-205.

O7 - FABRICATION OF GELATIN-BASED NANOCOMPOSITES AS A METHODOLOGY TO CRYSTALLIZE PLA NANOPARTICLES

Carmen Moya-Lopez^{1,2}, David Chapron¹, Patrice Bourson¹, Carolina Hermida-Merino³, Iván Bravo Pérez¹, Carlos Alonso Moreno¹, Daniel Hermida-Merino^{2,4}

¹Departamento de Química Inorgánica, Orgánica y Bioquímica, Facultad de Farmacia, Universidad de Castilla La-Mancha, Av. Dr. José María Sánchez Ibáñez, s/n, 02071, Albacete

²LMOPS, Centrale Supélec, University of Lorraine, 2 Rue Edouard Belin, 57070, Metz, France

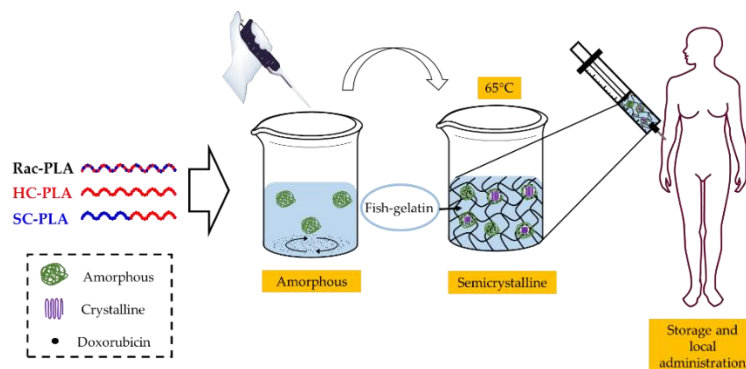
³Departamento de Física Aplicada, CINBIO, Universidad de Vigo, Campus Lagoas-Marcosende, 36310, Vigo

⁴Departamento de Física Aplicada, CINBIO, Universidade de Vigo, Campus Lagoas-Marcosende, 36310 Vigo, Spain

Carmen.moya@uclm.es

Nanoparticles (NP) are drug delivery systems that improve the stability and solubility of the encapsulated drugs, improving safety and efficacy of the treatment [1]. Polylactide (PLA) is among the most commonly used polymers for NP formulation development due to its biocompatibility. Besides, PLA presents a wide variety of nanostructured derivatives featuring different physicochemical properties, which might enable attaining a wide variety of drug release rates [2]. However, PLA is typically copolymerized with hydrophilic monomers such as glycolic acid which usually limits their physicochemical properties to the characteristic features of the amorphous phase [3] that neutralize the PLA chirality effect on the molecular mobility relaxation process that typically affect drug release [4].

Herein, a series of bionanocomposites based on gelatin hydrogels and PLA-NP have been developed as a straightforward methodology to anneal PLA-NP and achieve the desired drug release rate while increasing its hydrophilic character. The gelatin matrix confers the mechanical properties to administrate locally the therapeutic agent as well as supporting the PLA-NP upon annealing to customize their release profile whilst retaining the bioactive functions and offering the support for combined therapeutic agents with different release profiles.



Referencias

- [1] Mitchell, M.J.; Billingsley, M.M.; Haley, R.M.; Langer, R.; Wechsler, M.E.; Peppas, N.A. Engineering Precision Nanoparticles. *Nat. Rev. Drug Discov.*, **2021**.
- [2] Tsuji, H. Poly(Lactic Acid) Stereocomplexes: A Decade of Progress. *Adv. Drug Deliv. Rev.*, **2016**, *107*, 97–135.
- [3] Scheuer, K.; Bandelli, D.; Helbing, C.; Weber, C.; Alex, J.; Max, J.B.; Hocken, A.; Stranik, O.; Seiler, L.; Gladigau, F.; Neugebauer, U.; Schacher, F.H.; Schubert, U.S.; Jandt, K.D. Self-Assembly of Copolyesters into Stereocomplex Crystallites Tunes the Properties of Polyester Nanoparticles. *Macromolecules*, **2020**, *53*, 8340–8351.
- [4] Varol, N.; Monnier, X.; Delbreilh, L.; Saiter, A.; Fatyeyeva, K.; Dargent, E. Highlight of Primary and Secondary Relaxations in Amorphous Stereocomplex Poly lactides. *Express Polym. Lett.*, **2020**, *14*, 48–62.

O8 - Conductive CHIRAL MOFs, CISS Effect and Water Electrolysis

Eider San Sebastián.¹

¹ Facultad de Química, Química Aplicada, UPV/EHU. Paseo Manuel de Lardizabal 3, 20018, San Sebastian, Gipuzkoa

An enantiopure, conductive, and paramagnetic crystalline 3-D metal–organic framework (MOF), based on Dy(III) and the L-tartrate chiral ligand, has been proved to behave as an almost ideal electron spin filtering material at room temperature, transmitting one spin component only, leading to a spin polarization (SP) power close to 100% in the ± 2 V range (1 *Nano Lett.* 2020, 20, 8476–8482). This impressive spin polarization capacity was first attributed to the Chirality-Induced Spin Selectivity (CISS) effect of the material arising from a multidimensional helicity pattern, the inherited chirality of the organic motive, and the enhancing influence of Dy(III) ions on the CISS effect, with large spin–orbit coupling values.

But, recently (1) *Comm. Phys.* 2024. Accepted) the computational characterization of the electronic structure of the chiral MOF revealed that the high SP of the material is also linked to the asymmetric display of alpha and beta spin states around the Fermi level, arising from the f states of the lanthanide, which leads to two different conduction channels (band gaps) for each spin state. Moreover, the analysis of an analogous non-chiral 3D Dy MOF suggests that the helicity (chirality) of the system is not a requirement to display the spin asymmetry responsible for the spin filtering capacity, although it might enhance the SP power.

Our chiral MOF has been now proved to catalyse the spin forbidden (SF) Oxygen Evolution Reaction (OER) occurring at the anode of an electrochemical water splitting cell which benefits from the electron spin filtering capacity of the material, reducing the overpotential required to generate molecular oxygen in triplet state and avoiding formation of singlet hydrogen peroxide by-product. Since the material behaves as a poor semi-conductor, modifications have been proposed that would boost its conductivity, leaving its SP ability unaffected

References

[1] *Nano Lett.* **2020**, 20, 8476–8482

[2] *Comm. Phys.* **2024**. Accepted

09 - ECONOMÍA CIRCULAR DE AGROQUÍMICOS UTILIZANDO MOFs

Jonathan Machi¹, Amalia García-García¹, Antonio Rodríguez-Diéguez¹, Íñigo Vitórica-Yrezabal¹, Sara Rojas¹

¹Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Av. Fuentenueva s/n, 18071, Granada

jmachi@ugr.es

La contaminación del agua se está convirtiendo cada vez más en un reto, así como eliminar los nuevos contaminantes de origen antropogénico conocidos como Contaminantes Orgánicos Emergentes (EOCs por sus siglas en inglés) [1]. Una clase importante de EOCs son los productos agroquímicos, sustancias de especial interés, sobre todo en España, debido a su presencia en aguas superficiales y subterráneas y su persistencia en sistemas hídricos. Además, también preocupa su llegada en una fase final al agua potable dado que los sistemas de tratamientos de aguas actuales no están preparados para eliminar este tipo de contaminantes.

En respuesta a este reto, las redes metal-orgánicas o Metal-Organic Frameworks (MOFs) han atraído la atención de la academia y la industria. Los MOFs han demostrado un rendimiento excepcional en la eliminación de varios EOCs, sin embargo, su potencial para la eliminación y recuperación de agroquímicos permanece en gran parte inexplorado [2-3]. Además, los estudios existentes sobre MOFs en el tratamiento de aguas a menudo no simulan las condiciones reales de las plantas depuradoras, descuidando parámetros críticos como la estabilidad de los MOFs y la aplicación de sistemas de flujo continuo.

Los materiales MIL-127(Fe), NH₂-MIL-88B(Fe) y NH₂-MIL-53(Fe) son tres MOFs ampliamente conocidos por su biocompatibilidad y sus propiedades adsorptivas en disolución [2]. En una primera etapa, se ha estudiado la capacidad de estos materiales para capturar una serie de agroquímicos de interés. A continuación, se estudiará su desempeño a la hora de descontaminar agua en condiciones de flujo continuo, así como la liberación controlada de los agroquímicos tras su captura. Este enfoque innovador no sólo aborda los retos de la descontaminación del agua, sino que también explora la liberación controlada y la reutilización de agroquímicos en la agricultura, contribuyendo significativamente a la gestión medioambiental sostenible y al desarrollo de tecnologías avanzadas para el tratamiento del agua y la recuperación de recursos.

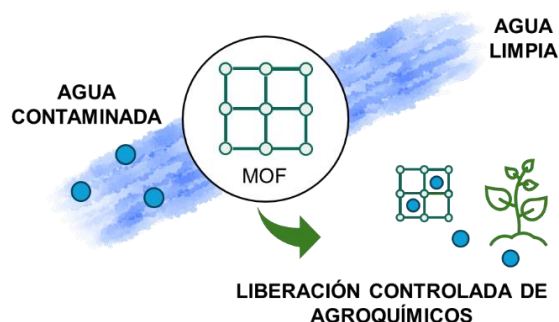


Figura 1.- Esquema de economía circular en la agricultura utilizando MOFs

Referencias

- [1] Deblonde, T.; Cossu-Leguille, C.; Hartemann, P. *Int. J. Hyg. Environ. Health* **2011**, 214, 442–448.
- [2] Rojas, S.; Horcajada, P. *Chem. Rev.* **2020**, 120, 16, 8378–8415.
- [3] Svensson Grape, E.; Chacón-García, A.J.; Rojas, S. *et al. Nat Water* **2023**, 1, 433–442

Agradecimientos

Al proyecto MOFCycle (30RP230005) financiado por MCIN/AEI /10.13039/501100011033, y a B-FQM-394.

O10 - ESTUDIO EXPERIMENTAL Y TEÓRICO DE LA RELAJACIÓN MAGNÉTICA EN POLÍMEROS DE COORDINACIÓN HETEROMETÁLICOS BASADO EN 6-METIL-2-OXONICOTINATO E IONES LANTÁNIDO(III)

Laura Razquin-Bobillo¹, Andoni Zabala-Lekuona¹, Antonio Rodríguez-Diéguez², José M. Seco¹, Eider San Sebastian¹, Javier Cepeda¹

¹Departamento de Química Aplicada, Facultad de Química, Universidad del País Vasco UPV/EHU, Paseo Manuel Lardizabal 3, 20018, Donostia

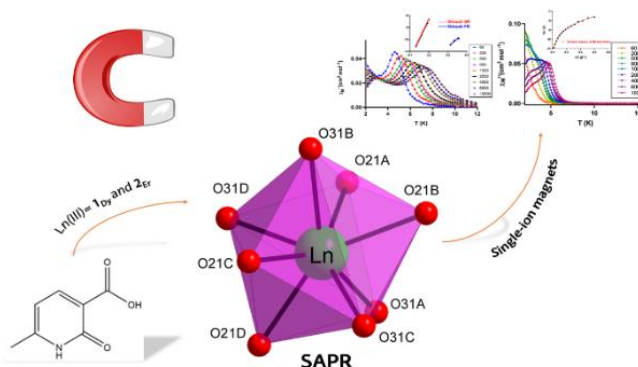
²Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, C/ Severo Ochoa s/n, 18071, Granada

laura.razquin@ehu.eus

La posibilidad de combinar, en un material cristalino, diversas propiedades físicas han convertido a los polímeros de coordinación (PCs) en compuestos muy atractivos para los científicos que trabajan en el campo de la química de coordinación debido a su gran variedad de potenciales aplicaciones. Un punto clave de este éxito deriva de la posibilidad de combinar los componentes de partida apropiados (iones metálicos y ligandos), de tal manera que den lugar a la arquitectura metal-orgánica deseada cuando se auto-ensamblan durante la cristalización, controlando de algún modo las propiedades finales del compuesto.[1]

En esta comunicación presentamos una nueva familia de PCs basados en el ligando 6-metil-2-oxonicotinato y los iones lantánido Dy(III) y Er(III). La caracterización estructural y química de estos compuestos revela la siguiente fórmula química: $\{[Ln(6m2onic)_2(\mu-6m2onic)_2Na(H_2O)_3] \cdot 8H_2O\}_n$ [donde Ln(III) = Dy (**1_{Dy}**) y Er (**2_{Er}**)]. Los compuestos cristalizan en forma de polímeros unidimensionales unidos mediante una red de enlaces de hidrógeno dirigida por las moléculas de agua de cristalización. El aspecto estructural más relevante de los compuestos es el entorno de antiprisma cuadrado distorsionado (SAPR) que presentan los iones lantánido, el cual está formado por los ligandos 6m2onic que establecen cuatro anillos quelantes.

Las medidas de susceptibilidad magnética dc y ac confirman que **1_{Dy}** y **2_{Er}** se comportan como imanes moleculares (SIMs). Se han realizado diluciones magnéticas basadas en el compuesto isoestructural de Y(III) para conseguir un homólogo de Dy(III) (**1_{Y/Dy}**) que presenta una relajación magnética lenta en ausencia de campo dc. Bajo un campo H_{dc} optimizado (de 1000 Oe y 1500 Oe para **1_{Y/Dy}** y **2_{Y/Er}**, respectivamente), **1_{Y/Dy}** presenta una relajación de doble vía, atribuida a dos procesos: i) SR ($U_{eff} = 65,2$ K ($45,3$ cm⁻¹) y $T_0 = 2,76 \times 10^{-9}$ s) y ii) FR ($U_{eff} = 23,2$ K ($16,1$ cm⁻¹) y $T_0 = 1,40 \times 10^{-8}$ s), mientras que **2_{Y/Er}** muestra una vía de relajación múltiple que considera mecanismos de tunel cuántico de la magnetización (QTM), Orbach, Raman y directo.[2]



Referencias

[1] L. Jiao, J. Y. R. Seow, W. S. Skinner, Z. U. Wang and H.-L. Jiang, *Mater. Today*, **2019**, 27, 43–68.

[2] Razquin-Bobillo, L. et al. *Dalton Trans.*, **2022**, 51,16243–16255.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el Gobierno Vasco/Eusko Jaurlaritza (IT1755-22), y la Junta de Andalucía (FQM-394 y B-FQM-734-UGR20). LRB agradece su beca predoctoral a la UPV/EHU.

O11 - COMBINANDO POLÍMEROS Y REDES METAL-ORGÁNICAS EN LA BÚSQUEDA DE NUEVAS ESTRATEGIAS DE DISEÑO DE MATERIALES

Catalina Biglione¹, Bernhard Schmidt², Patricia Horcajada¹

¹ Unidad de Materiales Porosos Avanzados, Instituto IMDEA Energía, Av. Ramón de la Sagra 28935. Madrid, España.

²Departamento de Química, Universidad de Glasgow, G128QQ, Glasgow, Reino Unido.

catalina.biglione@imdea.org

Las redes metal-orgánicas (MOFs por sus siglas en inglés), construidos por unidades metálicas y ligandos orgánicos orgánicos, muestran una porosidad excepcional y estructuras definidas con precisión que son fácilmente ajustables en cuanto a composición y topología. Estos materiales híbridos cristalinos porosos tienen el potencial para una amplia gama de aplicaciones, incluyendo biomedicina, sensores y catálisis. Sin embargo, su traslación a entornos clínicos e industriales ha sido obstaculizada debido mayormente a su estabilidad y toxicidad. En respuesta, el enfoque reciente se ha centrado en los compuestos combinando MOF con polímeros, valiéndose de las propiedades mecánicas y químicas de los polímeros en conjunción con la alta porosidad y cristalinidad de los MOFs. En este contexto, los poliMOFs emergen como materiales prometedores que consisten en polímeros que contienen ligandos policomplejos, co-ligandos e iones metálicos. Los mismos se presentan como una amplia variedad de materiales novedosos con propiedades aún por explorar.

En este contexto, nuestro objetivo es diseñar una estrategia sintética robusta para sintetizar nuevos poliMOFs como sistemas de administración de fármacos para combatir infecciones microbianas. En este sentido, la selección de los bloques de construcción es crucial. Por lo tanto, el diseño racional de estos materiales implica un centro metálico con actividad antimicrobiana, un co-ligando activo y un polímero con grupos coordinantes. Inicialmente, se sintetizaron dos MOFs basados en zinc y cobre y ácido elágico. Posteriormente, se investigaron poliMOFs análogos utilizando polímeros basados en carboxilatos de diferente naturaleza. Todos los materiales se caracterizaron para evaluar la influencia del polímero en propiedades generales como tamaño, morfología, estabilidad, porosidad, etc.

Referencias

- [1] a) H. Furukawa, K. E. Cordova, M. O'Keeffe, O. Yaghi, *Science*, **2013**, 341, 1230444. b) S. Rojas, P. Horcajada, *Chem. Soc. Rev.*, **2020**, 120, 8378-8415.
[2] a) M. Kalaj, K. C. Bentz, S. Ayala Jr., J. M. Palomba, K. Barcus, Y. Katayama, S. Cohen, *Chem. Rev.*, **2020**, 120, 8267-8302. b) S. Yang, V. V. Karve, A. Justin, I. Kochetgov, J. Espin, M. Asgari, O. Trukhina, D.T. Sun, L. Peng, W. Queen, *Coord. Chem. Rev.*, **2021**, 427, 213525.
[3] a) W. Nong, J. Wu, R. A. Ghiladi, Y. Guan, *Coord. Chem. Rev.*, **2021**, 442, 214007; b) C. Pettinari, R. Pettinari, C. Di Nicola, A. Tombesi, S. Scuri, F. Marchetti, *Coord. Chem. Rev.*, **2021**, 446, 214121.
[4] J.M. Landete, *Food Research International*, **2011**, 44, 1150.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer el apoyo financiero del Programa de Investigación e Innovación Horizon Europe bajo el acuerdo de subvención Marie Skłodowska-Curie No 101061833.

O12 - DISEÑO DE CATALIZADORES ESCORPIONATO DE ZINC PARA LA FIJACIÓN DE CO₂ EN NUEVOS MATERIALES DE CARÁCTER BIODEGRADABLE

Marta Navarro¹, Andrés Garcés², Luis Fernando Sánchez-Barba², David González-Lizana², Agustín Lara-Sánchez¹

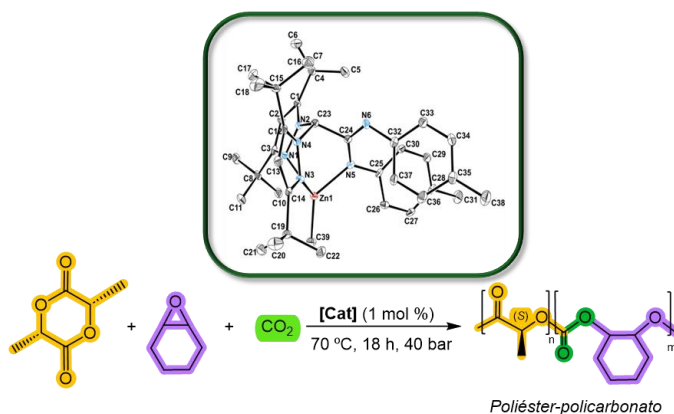
¹Departamento de Química Inorgánica, Orgánica y Bioquímica-Centro de Innovación en Química Avanzada (ORFEO-CINQA), Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas e Instituto Regional Científica Aplicada-IRICA, Universidad de Castilla-la-Mancha, 13071, Ciudad Real.

²Departamento de Biología y Geología, Física y Química Inorgánica, Universidad Rey Juan Carlos, 28933, Móstoles.

marta.navarro@uclm.es

En las últimas décadas, la escasez de combustibles fósiles y la demanda de una economía circular han impulsado hacia la búsqueda de procesos catalíticos más sostenibles.^[1] Para ello, la producción de materiales poliméricos biodegradables supone una excelente alternativa como posibles sustitutos de los polímeros derivados de materias primas fósiles. Una de las estrategias a seguir, consiste en el empleo de CO₂ y monómeros derivados de la biomasa como fuentes de materia prima. En este contexto, los poliésteres alifáticos y los policarbonatos son tipos de polímeros que destacan gracias a las potenciales aplicaciones que pueden ofrecer. Así, la combinación de ambos tipos de polímeros en una única cadena, mejora sus propiedades térmicas y mecánicas gracias a la sinergia de los segmentos sustituyentes.^[2] Una de las estrategias sintéticas más empleadas en la literatura consiste en la producción de estos materiales vía procesos de polimerización por apertura de anillo (ROP) de los correspondientes monómeros cíclicos.

En esta línea, en este trabajo se describen una serie de catalizadores basados en zinc activos en la preparación de materiales poliméricos tipo poliéster-policarbonato, de carácter biodegradable. Para ello, se utilizaron complejos de tipo heteroescorpionato de zinc en un proceso de copolimerización por apertura de anillo (ROCOP) de L-Lactida (LLA), óxido de ciclohexeno (CHO) y CO₂ en condiciones moderadas de reacción (Esquema 1). Estos catalizadores representan uno de los pocos ejemplos sobre sistemas basados en Zinc descritos en la bibliografía capaces de producir estos materiales de manera selectiva y efectiva.



Referencias

[1]. Sun, Z.; Fridrich, B.; De Santi, A.; Elangovan, S.; Barta, K. *Chem. Rev.*, **2018**, 118, 614–678.

[2]. Diallo, K.A.; Guerin, W.; Slawinski, M.; Brusson, J.M.; Carpentier, J.F.; Guillaume, S.M. *Macromolecules*, **2015**, 48, 3247-3256.

Agradecimientos

Agradecimientos a la Junta de Comunidades de Castilla-la-Mancha y al Fondo Social Europeo (FSE+) por la financiación de esta investigación bajo el Programa Operativo Regional Fondo Social Europeo (FSE+) 2021-2027.

O13 - APLICACIÓN DE LA ESPECTROSCOPIA FOTOELECTRÓNICA DE RAYOS X (XPS) PARA CARACTERIZAR MATERIALES MULTIFUNCIONALES

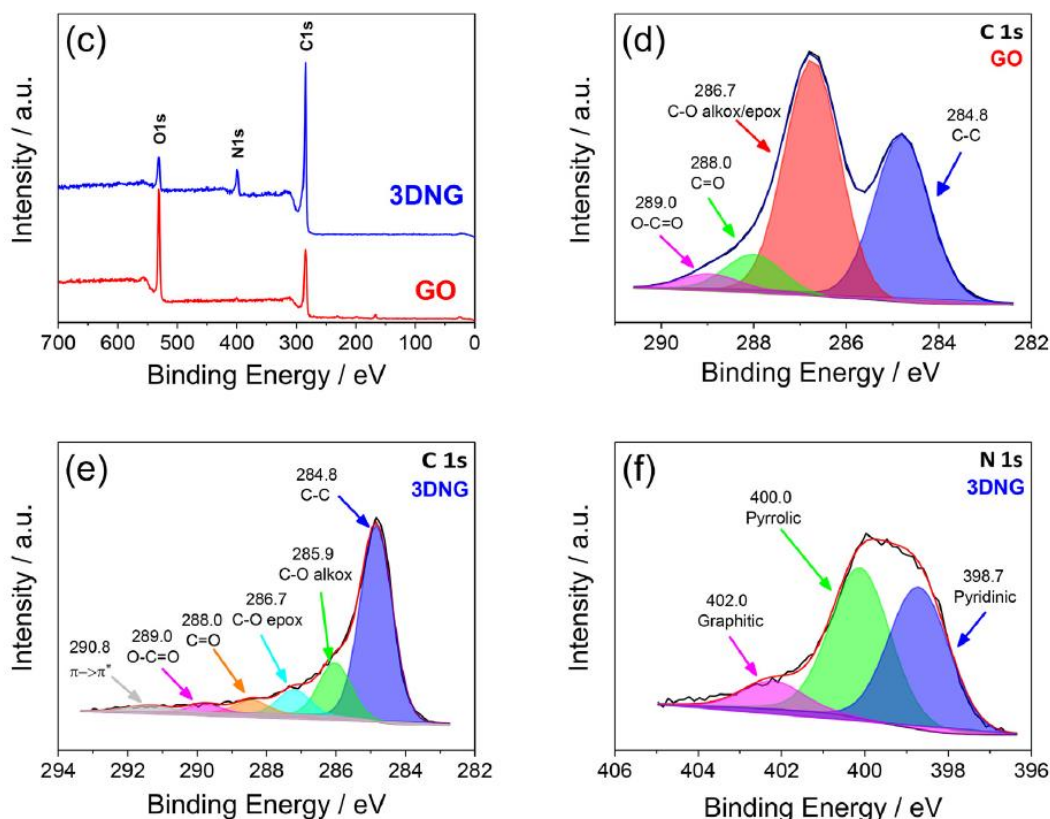
Enrique Rodríguez-Castellón¹

¹Departamento de Química Inorgánica, Cristalografía y Mineralogía, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, 29071 Málaga

castellon@uma.es

Las propiedades de la superficie de materiales multifuncionales de todo tipo generalmente son diferente a las propiedades másicas debido a la presencia de vacantes, defectos de coordinación, o a la existencia de fases activas con distintos estados de oxidación. El XPS es una técnica con la que podemos estudiar la composición química de la superficie más externa y el estado químico de los elementos constituyente de la superficie. En esta presentación se abordará el estudio de líquidos iónicos, adsorbentes nanoporosos (carbones activos, MOFs, sílices nanoporosas) y catalizadores para la generación de hidrógeno, aportando numerosos ejemplos ilustrativos.

Por ejemplo, en un grafeno 3D obtenido a partir de óxido de grafito que se usó en la fabricación de electrodos para baterías litio azufre, el cátodo que es un composite formado por la infiltración de azufre en una estructura de grafeno 3D. Mediante XPS podemos identificar distintos grupos funcionales, algunos de ellos difíciles de identificar como los que contienen nitrógeno. Ver figura inferior.



Referencias

[1] A. Benítez, D. Di Lecce^b, A. Caballero, J. Morales, E. Rodríguez-Castellón, J. Hassoun, J. Power Sources 397 (2018) 102-112.

Agradecimientos

Proyecto TED2021-130756B-C31 MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y "ERDF una manera de hacer Europa por the European Union NextGenerationEU/PRTR.

O 14 - IMDEA ENERGY FRAMEWORKS: DEFECTIVE POROUS COORDINATION POLYMERS FOR ENHANCING THE PHOTOCATALYTIC GREEN HYDROGEN GENERATION

J. Ferrando-Ferrero,¹ S. Carrasco,¹ M. González-Fernández,² H. García Baldoví,² S. Navalón,² H. García,² P. Horcajada¹

¹ Adv. Porous Materials Unit, IMDEA Energy. Avda. Ramón de la Sagra 3, 28935, Móstoles.

² Departamento de Química and Instituto de Tecnología Química (CSIC-UPV), Universitat Politècnica de València, C/Camino de Vera, s/n, 46022 Valencia, Spain.

javier.ferrando@imdea.org

Both human and industrial activities are the main responsible for the current global environmental crisis, as a direct consequence of **fossil fuel combustion** and **CO₂ emissions**. In this context, current technologies are not sufficiently developed to mitigate energy-related issues because of the **lack of robust and efficient catalysts**, particularly oriented to fuels production. **Metal-organic frameworks** (MOFs) appear to be promising candidates for facing this challenge as they show relevant features such as: great **chemical versatility**,¹ large **surface/volume ratio**, and proved **catalytic efficiency** in several processes, including **hydrogen production** through the photocatalytic overall water-splitting reaction (OWS),² and **CO₂ capture and conversion** into high value-added products (e.g. green solar fuels, monomers, drug precursors).³ Specifically, **IEF-11(Ti)** (from IMDEA Energy Frameworks),² based on the photo/electro-active Ti(IV) cation and the quadrate ligand (3,4-dihydroxycyclobut-3-ene-1,2-dione; *i.e.* squarate), has shown, at the time of publication, the **largest photocatalytic efficiency** in the H₂ generation by OWS (672 μmol H₂·g⁻¹ in 22 h) for a MOF-based catalyst.

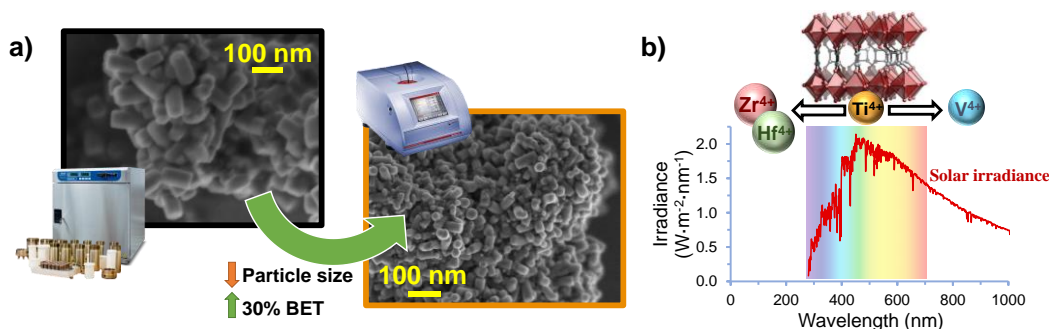


Figure 1. Defect engineering strategies to modify IEF-11. Modulation of: **a)** crystal size and porosity by microwave radiation; and **b)** band gap, with different metal cations, matching different regions of the solar irradiance.

The use of microwave radiation (Figure 1a) and doping strategies (Figure 1b) are elegant and promising approaches in defect engineering for enhancing the catalytic activity and/or robustness of already-known MOFs.⁴ As a promising candidate, IEF-11(Ti) has been tested with remarkable results when synthesizing novel isostructural MOFs by using V, Zr and Hf. Both physicochemical (e.g. size, porosity) and optoelectronic properties (e.g. bandgap) can be finely modulated by the progressive/full substitution of Ti by other metal cations. Preliminary catalytic tests have demonstrated significant differences between defective and conventional MOF-based materials in terms of hydrogen production.

References

- [1] Horcajada, P.; Gref, R.; Baati, T. *et al. Chem. Rev.* **2012**, *112*, 1232-1268.
- [2] Salcedo-Abraira, P.; Babaryk, A.A.; Montero-Lanzuela, E. *et al. Adv. Mater.* **2021**, *33*, 2106627.
- [3] Carrasco, S.; Orcajo, G.; Martinez, F. *et al. Mater. Today Adv.* **2023**, *19*, 100390.
- [4] Y. Shan, G. Zhang, Y. Shi, H. Pang, *Cell Rep. Phys. Sci.*, **2023**, *4*, 101301.

Acknowledgements

Authors acknowledge the NAPOLION (PID2022-139956OB-I00) and HYLIOS (CPP2022-010052) projects funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and ERDF "A way of making Europe" and CAM (PEJ-2021-AI/IND-22349).

O15 - Imaging the chemical behaviour of photoactivable Pt^{IV} complexes in tumoral cells

E. Zingales,¹ J. Sanchez-Camacho,¹ L. Salassa,^{1,2,3,4} C. Sanchez-Cano.^{1,2,3,4} Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, C/ Severo Ochoa s/n, 18071, Granada

¹ Donostia International Physics Center, Paseo Manuel de Lardizabal 4, Donostia, 20018, Spain

² Ikerbasque, Basque Foundation for Science, Bilbao 48011, Spain

³ Polimero eta Material Aurreratuak Fisika, Kimika eta Teknologia, Kimika Fakultatea, Eusal Herrik

⁴ Unibertsitatea UPV/EHU, Paseo Manuel de Lardizabal 3, Donostia 20018, Spain

esteban.zingales4@gmail.com

Photoactivatable Pt^{IV} prodrugs are promising alternatives to clinical platinum drugs, as they can reduce the unwanted side effects caused by their active Pt^{II} form.¹ Still, the efficiency of the activation in cells of most of these complexes is low (less than 20%), even after long irradiations (1h)². In this context, flavins can photocatalyse with high efficiency the reduction of Pt^{IV} complexes to their Pt^{II} active anticancer species.³ However, the real activation efficiency of these Pt^{IV} prodrugs in cancer cells upon addition of flavin is still unknown.

We used Pt^{IV} prodrugs covalently bound or not to a flavin, to assess the possible variations caused on the cellular localization and activation efficiency of Pt^{IV} complexes caused by flavin coadministration. Cells cultured on silicon nitride windows were treated with such complexes (50 μM), irradiated shortly with blue light (3 min), and vitrified on ethane/propane mixtures. Membranes were then freeze-dried for analysis at room temperature, and imaged at I14 nanoprobe synchrotron beamline (Diamond, UK). We acquired X-ray fluorescence (XRF) and X-Ray Absorption Near Edge Structure (XANES) maps to probe the localization and chemical state of Pt complexes in those cells.

XRF imaging and XANES mapping of cells allowed to quantify accumulation and visualize the distribution of Pt, but also to probe the reduction from Pt^{IV} to Pt^{II} upon irradiation of those cells in the presence or absence of flavin. This was done by direct detection of the metal center of the complexes. This permitted to determine that the total amount of Pt was higher in cells treated Pt^{IV} carrying a flavin in their structure than in those without it, which was consistent with our previous measurements using ICP-MS. XRF maps did also show that the presence of the flavin did not alter the cellular distribution of the complex, but increased cellular damage caused. Additionally, XANES maps collected from areas with high concentration of Pt determined that over 70% of the Pt accumulate corresponded to Pt^{II} species. Remarkably, those levels of activation of the Pt^{IV} prodrug are much higher than previously seen for similar photoactivatable Pt^{IV} prodrugs in the absence of flavin.³

Our work confirms that the presence of flavin moieties not only improves the uptake of Pt^{IV} prodrugs inside cells, but also increase greatly the efficiency of their activation upon irradiation for short periods of time.

Referencias

[1] T.C. Johnstone, K. Suntharalingam, S.J. Lippard. Chem. Rev. 2016, 116, 3436-3486.

[2] E.M. Bohlito, C. Sanchez-Cano, H. Shi, P.D. Quinn, M. Harkiolaki, C. Imberti, P.J. Sadler, J. Am. Chem. Soc. 2021, 143, 20224-202401

[3] J. Sanchez-Camacho, S. Infante-Tade, A.C. Carrasco, S. Scoditti, A. Martinez, F. Barroso-Bujans, E. Sicilia, A.M. Pizarro, L. Salassa, Inorg. Chem. 2023, 62, 5644-5651.

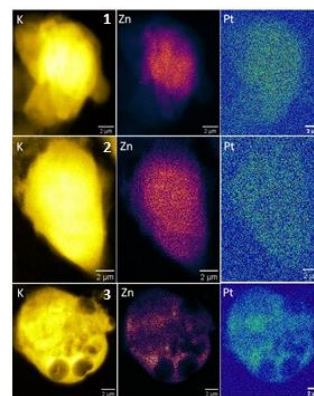


Figure 2 Synchrotron XRF elemental map of a series of cryo-fixed and freeze-dried MCF7 cells treated with a riboflavin derivative, showing K (yellow), Zn (purple), Pt (green). The map of the cell number 1 was collected using 50 nm step size and 0.15 s dwell time.

O16 - FROM TUNA COLLAGEN TO NANOMEDICINE: DRUG-LOADED HYDROGEL AS CANCER THERAPY

Irene Sevilla-Carrillo¹, Carolina Hermida-Merino², Inmaculada Posadas Mayo³, Iván Bravo Pérez¹, Carlos Alonso Moreno¹

¹Departamento de Química Inorgánica, Orgánica y Bioquímica, Facultad de Farmacia, Universidad de Castilla La-Mancha, Av. Dr. José María Sánchez Ibáñez, s/n, 02071, Albacete

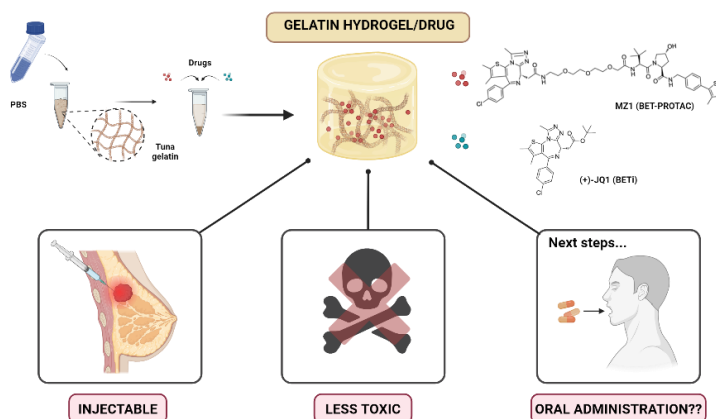
²Departamento de Ingeniería Eléctrica, Electrónica, Automática y Física Aplicada, ETSIDI, Universidad Politécnica de Madrid, Ronda de Valencia, 3, 28012, Madrid

³Departamento de Ciencias Médicas, Facultad de Farmacia, Universidad de Castilla La-Mancha, Av. Dr. José María Sánchez Ibáñez, s/n, 02071, Albacete

Irene.Sevilla@uclm.es

Hydrogels are based on polymers that constitute three-dimensional viscoelastic networks and present the capacity to retain water in their structure several times more than their dry weight [1]. Their use as controlled drug release systems is gaining interest due to their great properties, such as biocompatibility, biodegradability, and negligible cytotoxicity [2]. In addition, hydrogels usually present high drug encapsulation efficiency as well as the possibility of their administration by different routes, such as oral or local, in contrast to the limitations of other nanodevices [3]. In particular, tuna gelatin has demonstrated mechanical properties that confirmed its potential as a hydrogel due to the nature of its collagen networks [4].

Herein, natural hydrogels obtained from tuna collagen were formulated to control the release of a BET inhibitor (inhibits a protein overexpressed in breast cancer) and its corresponding PROTAC (Proteolysis Targeting Chimera) for the treatment of breast cancer. The encapsulation efficiency of the selected drugs in the tuna hydrogel was 100% and the drugs reinforced the three-dimensional network of the tuna hydrogel, as evidenced by viscosity analysis. Moreover, the drug-loaded hydrogels exhibit appropriate mechanical properties for local injection into the human body. In addition, the drug-loaded hydrogels present similar cytotoxicity against breast cancer cells compared to free drugs and reduce the drug toxicity in normal cells, suggesting the potential of the tuna-hydrogels as drug delivery systems for local administration and prompting further analysis for oral administration.



Referencias

- [1] S. Jacob, A. B. Nair, J. Shah, N. Sreeharsha, S. Gupta, and P. Shinu, *Pharmaceutics*, **2021**, vol. 13, no. 3.
- [2] Z. Sun, C. Song, C. Wang, Y. Hu, and J. Wu, *Mol Pharm*, **2020**, vol. 17, no. 2, 373–391.
- [3] V. Poongavanam and J. Kihlberg, *Future Med Chem*, **2021**, vol. 14, no. 3, 123–126.
- [4] Hermida-Merino C, Cabaleiro D, Lugo L, Valcarcel J, Vázquez JA, Bravo I, Longo A, Salloum-Abou-Jaoude G, Solano E, Gracia-Fernández C, Piñeiro MM, Hermida-Merino D, C. *Gels*, **2022**, vol. 8, no. 4.

O17 - METAL-ORGANIC FRAMEWORK NANOCOMPOSITES FOR CANCER THERAPY

Pablo Cristóbal-Cueto¹, Darina Francesca Picchi¹, Sorraya Lelouche¹, Safiyye. Kavak², Catalina Biglione¹, Sara Bals², Erik Svensson Grape³, Andrew Kentaro Inge³, Patricia Horcajada¹

¹Advanced Porous Materials Unit, IMDEA Energy Institute, Móstoles, Madrid, Spain

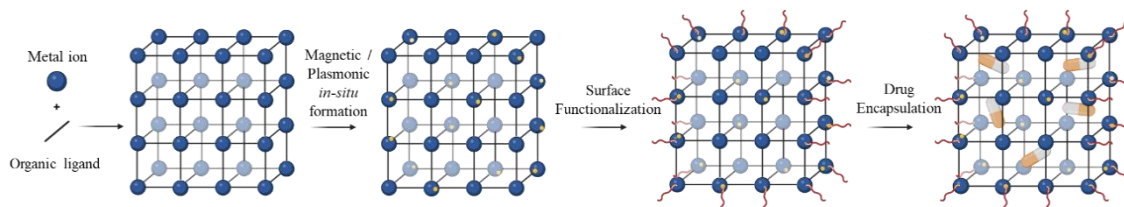
²EMAT, University of Antwerp, Campus Groenenborger, Antwerp, Belgium,

³Dep. Materials and Environmental Chemistry, Stockholm University, Stockholm, Sweden,

pablo.cristobal@imdea.org

Metal-organic frameworks (MOFs) are currently recognized as promising drug delivery systems (DDS) due to their biocompatibility, high porosity and remarkable structural and chemical tunability¹. In order to enhance the drug release control, recently, magnetic and plasmonic nanoparticles (iNPs) have been incorporated into nanoscaled MOFs². Thus, the drug release could be triggered by light irradiation or a magnetic field, while improving the stability of iNPs³. Further, iNPs@MOF nanocomposites are under investigation for their potential in photodynamic therapy (PDT), photothermal therapy (PTT) or magnetic resonance imaging (MRI), among others⁴.

In this study, we describe the synthetic methodologies employed for the production of various iNP@MOF nanocomposites by the *in-situ* formation of different inorganic nanoparticles. Specifically, we demonstrate the successful incorporation of magnetic nanoparticles based on iron oxide and plasmonic nanoparticles based on silver and/or gold into the benchmarked nanometric MOFs SU-102 and MIL-125-NH₂, respectively. Hereafter, the nanoparticles incorporation into the MOF was confirmed without altering MOF crystallinity. Finally, two different antitumoral drugs (Doxorubicin and 5-Fluorouracil), widely use in pancreatic cancer, were encapsulated and co-encapsulated, investigating their potential as drug nanocarriers.



References

1. Maurin, G., Serre, C., Cooper, A. & Férey, G. The new age of MOFs and of their porous-related solids. *Chem. Soc. Rev.* **46**, 3104–3107 (2017).
2. Taheri-Ledari, R. *et al.* A Mesoporous Magnetic Fe₃O₄/BioMOF-13 with a Core/Shell Nanostructure for Targeted Delivery of Doxorubicin to Breast Cancer Cells. *ACS Appl. Mater. Interfaces* (2023) doi:10.1021/ACSAMI.3C14363.
3. Picchi, D. F., Biglione, C. & Horcajada, P. Nanocomposites Based on Magnetic Nanoparticles and Metal-Organic Frameworks for Therapy, Diagnosis, and Theragnostics. *ACS Nanosci. Au* (2023) doi:10.1021/acsnanoscienceau.3c00041.
4. Liu, H. *et al.* Metal-organic framework-mediated multifunctional nanoparticles for combined chemophotothermal therapy and enhanced immunotherapy against colorectal cancer. *Acta Biomater.* **144**, 132–141 (2022).

Acknowledgments

This work was supported by the H2020-MSCA-ITN-2019 HeatNMof project (ref. 860942).

O18 - MOLÉCULAS MULTIFUNCIONALES ORGÁNICAS BASADAS EN DERIVADOS DE 7-AZAINDOL PARA DIFERENTES APLICACIONES

Eva M. García Frutos

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM), CSIC, Madrid, 28049 (Spain).

emgfrutos@icmm.csic.es

Los derivados de 7-azaindol han despertado el interés de muchos grupos de investigación debido a sus potenciales propiedades en áreas tan diversas como la optoelectrónica o la química terapéutica. El anillo de piridina proporciona a la estructura de azaindol características relevantes en diferentes aplicaciones para OLEDs[1], sensores[2], o en el descubrimiento de nuevos fármacos[3]. Dentro de estas áreas, la modificación de la sustitución química de la molécula mediante la incorporación de diferentes sustituyentes puede dar lugar a una modulación de sus propiedades (Figura 1). El diseño de derivados de 7-azaindol, orientado a la diversidad, aumenta la versatilidad de esta plataforma orgánica, permitiendo la obtención de una vasta biblioteca molecular para el estudio de la relación estructura química-actividad, incrementando sus aplicaciones multidisciplinarias.

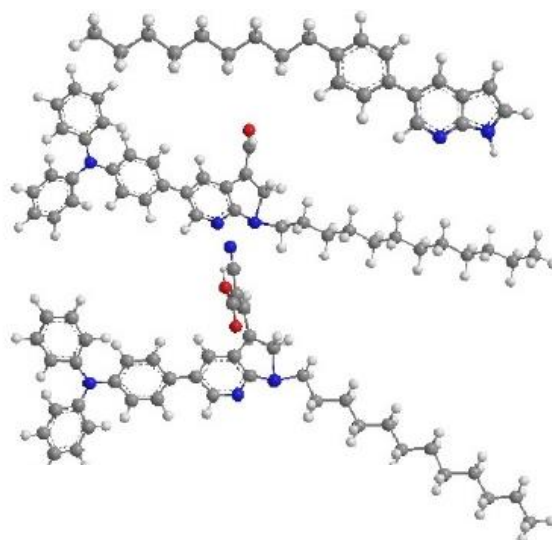


Figura 1

Referencias

- [1] C. Martín, C. Borreguero, K. Kennes, M. van der Auweraer, J. Hofkens, G. de Miguel, E. M. García-Frutos. *J. Mater. Chem C*, **2019**, 7, 1222.
- [2] S. Cardoza, P. Das, V. Tandon. *J. Org. Chem.* **2019**, 84, 14015.
- [3] R. García-Vázquez, E. P. Rebitski, L. Viejo, C. de los Ríos, M. Darder and E. M. García-Frutos, *Appl. Clay Sci* **2020**, 189, 105541.

Agradecimientos

Grant PID2022-137889OB-I00 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and, by “ERDF A way of making Europe”

O19 - PLASMAS MIXTOS PARA EL CODOPADO DE GRAFENO CON S Y N

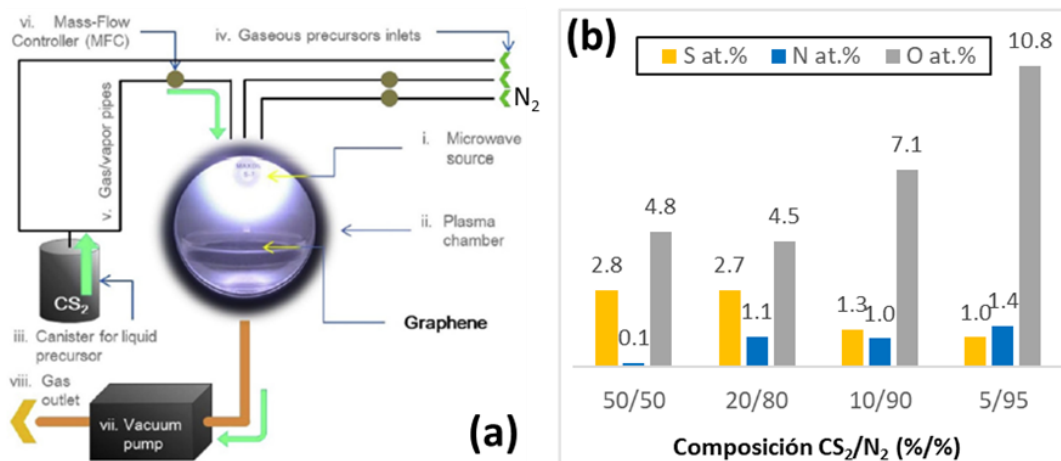
Víctor K. Abdelkader-Fernández, F. Javier López-Garzón, Miguel A. Galindo, y Manuel J. Pérez-Mendoza

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

victorkarim@ugr.es

La modificación químico-superficial del grafeno es clave para la mejora de sus propiedades y, por lo tanto, de su aplicabilidad. De este modo, durante los últimos años se han explorado diversas metodologías para la fijación de diferentes heteroátomos y grupos funcionales a las láminas de grafeno. Sin embargo, sigue siendo un gran desafío el desarrollo de procedimientos simples, de etapa única y que ahorren tiempo y energía, especialmente cuando el objetivo específico consiste en introducir de manera simultánea dos heteroátomos diferentes.

Recientemente, nuestro grupo de investigación ha realizado varias contribuciones importantes [1] en este campo basadas en la utilización de plasmas fríos (también conocidos como plasmas de no equilibrio). Los plasmas fríos (**a**) son gases parcialmente ionizados en los que coexisten electrones libres, iones, radicales y átomos/moléculas excitados a diferentes temperaturas. Esto hace que sean extremadamente reactivos, muy útiles para producir cambios composicionales/estructurales controlados en las superficies de nanomateriales de carbono. En este contexto, hemos estudiado el co-doping con heteroátomos de N y S (simultáneo) de grafeno en polvo a través del uso de mezclas de CS_2/N_2 como precursores de plasmas de radiofrecuencia (RF). Esto nos ha permitido evaluar exhaustivamente la influencia de la composición de la mezcla CS_2/N_2 (**b**) —así como el tiempo de exposición del grafeno al plasma— sobre el grado de doping total y las ratios S/N. Así, con un tratamiento de solo 8 minutos hemos llegado a obtener grafeno dopado con 8.6 y 3.5 at.% (XPS) de S y N, respectivamente. Este notable resultado allana el camino para desarrollar otros protocolos de plasma avanzados para la modificación de nanomateriales de carbono que, a diferencia de otros métodos publicados anteriormente, se llevan a cabo a temperatura ambiente de una manera muy rápida, eficiente y respetuosa con el medio ambiente. Además, la obtención de muestras con diversos contenidos en S y N ha permitido llevar a cabo una evaluación preliminar del efecto del co-doping sobre las propiedades electrocatalíticas del grafeno.

**Referencias**

[1] V. K. Abdelkader-Fernández et al., *Carbon*, **2019**, 144, 269-279.

Agradecimientos

VKAF agradece a la Junta de Andalucía la financiación de su actividad investigadora en el marco del Programa de contratación de Jóvenes Doctores (PAIDI 2020), así como al proyecto "Separación de gases de interés ambiental con materiales porosos avanzados" TED2021-129886B-C41.

O20 - PLAYING WITH THE WEAKEST SUPRAMOLECULAR INTERACTIONS IN 3D CRYSTALLINE HEXAKIS[60]FULLERENES

Estefania Fernandez-Bartolome^{a,b}, Arturo Gamonal^b, José Santos^{ab}, Saeed Khodabakhshi^b, Eider Rodríguez-Sánchez^b, E. Carolina Sañudo^{cd}, Nazario Martín^{*ab} and José Sánchez Costa^{*b}

^aDepartamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense, 28040 Madrid, Spain. Tel: 91 394 5156.

^bIMDEA Nanociencia, Ciudad Universitaria de Cantoblanco, C/ Faraday 9, Madrid, 28049, Spain. Tel: 912998700.

^cInstitut de Nanociència i Nanotecnologia, Universitat de Barcelona, 08028 Barcelona, Spain. Tel: 937 37 26 49

^dDepartament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció química Inorgànica, *Universitat de Barcelona, C/Martí i Franqués 1-11, Barcelona, 08028, Spain. Tel: 934 02 12 00*
estefania.fernandez@imdea.org

Weak forces can play an essential role in chemical reactions. Controlling such subtle forces in reorganization processes by applying thermal or chemical stimuli represents a novel synthetic strategy and one of the main targets in supramolecular chemistry^[1]. Actually, to separate the different supramolecular interactions contributing to the stability of 3D assemblies is still a major challenge. Therefore, a clear differentiation of these contributions would help in understanding the intrinsic nature as well as the chemical reactivity of supramolecular ensembles^[2]. In the present work^[3,4], a controlled reorganization of hexakis[60]fullerene-based molecular compounds (butyl and propyl malonates arms) purely governed by van der Waals interactions, among them the weakest known, i.e. the dihydrogen interaction, usually called sticky fingers, is illustrated. This preorganization of the hexakis[60]fullerene under mild conditions allows, on the one hand, a further selective hydrogenation of the crystalline material via hydrazine vapors exposure (Figure 1) and, on the other hand, the uptake of chloroform inside the structure. This unique two-step transformation process is monitored by single-crystal to single-crystal diffraction (SCSC) which allows the direct observation of the molecular movements in the lattice and the subsequent solid-gas reaction.

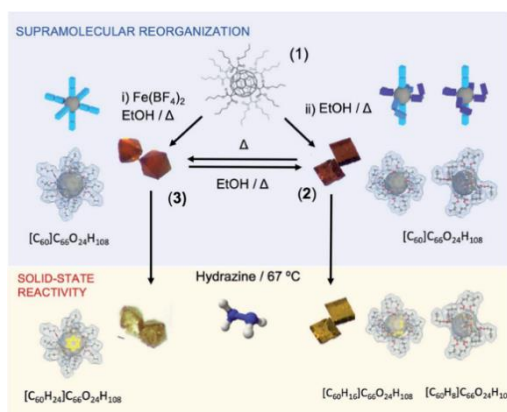


Figure 1. Illustration summarizing the hexakis[60]fullerene supramolecular reorganization for **2** and **3** (blue on top) and the solid-state reactivity (hydrogenation with hydrazine under mild conditions, in yellow)^[4].

References

- O. Sato, *Nat. Chem.*, **2016**, *8*, 644–656.
- J.-H. Deng, J. Luo, Y.-L. Mao, S. Lai, Y.-N. Gong, D.-C. Zhong and T.-B. Lu, *Sci. Adv.*, **2020**, *6*, eaax9976.
- E. Fernandez-Bartolome, J. Santos, A. Gamonal, S. Khodabakhshi, L. J. McCormick, S. J. Teat, E. C. Sañudo, J. S. Costa and N. Martín, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, *58*, 2310-2315.
- E. Fernandez-Bartolome, A. Gamonal, J. Santos, S. Khodabakhshi, Eider Rodríguez-Sánchez, E. C. Sañudo, J. S. Costa and N. Martín, *Chem. Sci.*, **2021**, *12*, 8682–8688.

O21 - MOFs QUIRALES CON CAPACIDAD DE FILTRO DE SPIN: IMPLEMENTACION Y USO COMO ELECTRODOS PARA UNA ELECTRÓLISIS EFICIENTE DE LA MOLECULA DE AGUA

German E. Pieslinger,^{1,2} Uxua Huizi-Rayo,^{3,6} Xuban Gastearena,⁴ Javier Cepeda,³ Aitzol Garcia-Etxarri,^{2,5} Francisco Alcaide,^{6,*} Jesus Ugalde^{2,4} y Eider San Sebastian^{3,*}

¹CONICET-Universidad de Buenos Aires, Instituto de Química y Físicoquímica Biológicas (IQUIFIB), Buenos Aires, Argentina

²Donostia International Physics Center (DIPC), Donostia-San Sebastián, España

³Departamento de Química Aplicada, Facultad de Químicas, UPV/EHU, Donostia-San Sebastián, España

⁴Departamento de Polímeros y Materiales Avanzados: Física, Química y Tecnología (PMAS), Facultad de Químicas, UPV/EHU, Donostia-San Sebastián, España

⁵IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, Bilbao, España

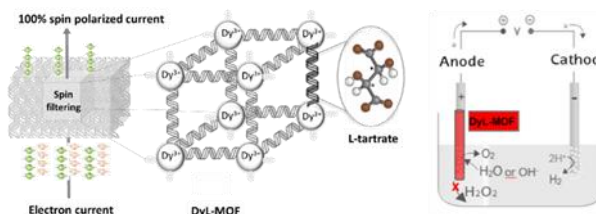
⁶CIDETEC, Donostia-San Sebastián, España

german.pieslinger@dipc.org

El gas hidrógeno es un insumo energético con distintos usos, entre los que se encuentra el almacenamiento de energía, su transformación y transporte. Sumado a esto, se lo utiliza para producir fertilizantes, así como en los procesos de refinерías. La producción convencional de hidrógeno se presenta en tres "colores", dependiendo de la cantidad de carbono liberado en el proceso de producción. El método actual más común es el reformado al vapor del metano, produciendo lo que se llama hidrógeno "gris" con la emisión de dióxido de carbono a la atmósfera. Si este dióxido de carbono producido se secuestra mediante la captura y almacenamiento de carbono, entonces se produce hidrógeno "azul". Durante los últimos años, se realizaron numerosos esfuerzos por encontrar el método ideal: la producción de hidrógeno "verde" a partir de una fuente de energía renovable y sin emisiones de carbono.

La electrólisis del agua es una excelente candidata para producir hidrógeno verde. Este proceso electrolítico requiere un potencial termodinámico de 1,23 V; sin embargo, es necesario aplicar un elevado sobrepotencial para superar barreras cinéticas y que el proceso tenga lugar. Si bien la liberación de H₂(g) en el cátodo sucede prácticamente sin estas barreras, no ocurre lo mismo en el ánodo, donde oxidación involucra dos centros y cuatro electrones para generar ³O₂(g). Mientras este estado triplete es el fundamental, su formación requiere una energía de activación más grande respecto al ¹O₂ debido a los procesos de inversión de espín. Por lo tanto, la eficiencia en la producción de H₂(g) depende en gran medida de la capacidad del ánodo para mejorar la producción de ³O₂(g).

En este trabajo presentamos la funcionalización de electrodos de espuma de níquel con un MOF quiral 3D cristalino, enantiopuro, semiconductor y paramagnético basado en Dy(III) y L-tartrato, que presenta una capacidad de filtro de espín del 100%.^[1,2] Con estos electrodos modificados, buscamos generar una corriente de electrones "polarizados por espín" con el fin de disminuir así la gran demanda energética asociada a la electrólisis del agua.



Referencias

[1] U. Huizi-Rayo, J. Gutierrez, J. M. Seco, V. Mujica, I. Diez-Perez, J. M. Ugalde, A. Tercjak, J. Cepeda, E. San Sebastian, *Nano Lett.* **2020**, *20*, 8476–8482.

[2] X. Gastearena, J. M. Ugalde, G. E. Pieslinger, E. San Sebastian, E. Jimenez-Izal, *Commun. Phys.* **2024**, in press.

A 3D rendering of a molecular structure, likely a crystal lattice or a network of atoms, with a blue and grey color scheme. The structure is composed of spheres representing atoms, connected by rods representing bonds. The perspective is from an angle, showing the depth of the structure.

Comunicaciones Flash

F1 - MATERIALES MULTIFUNCIONALES BASADOS EN POLÍMEROS DE COORDINACIÓN

M. Skiba^{a,b}, R. R. Reszegi^a, Y. Huang^a, S. Roy^c, Jili Han^a, C. Sanchez-Cano^{d,e,f}, Y. Zhao^g, M. Hassan^g, N. Feliu^c, G. Falkenberg^{h,*}, W. J. Parak^{a,b,*}

^aCenter for Hybrid Nanostructures, University of Hamburg, Luruper Chaussee 149, Hamburg, 22761, Germany

^bThe Hamburg Centre for Ultrafast Imaging, Hamburg, Germany

^cFraunhofer Center for Applied Nanotechnology (CAN), Fraunhofer IAP, Grindelallee 117, 20146 Hamburg, Germany

^dIkerbasque, Basque Foundation for Science, 48013 Bilbao, Spain

^eDonostia International Physics Center, Paseo Manuel de Lardizabal 4, Donostia-San Sebastian, 20018, Spain

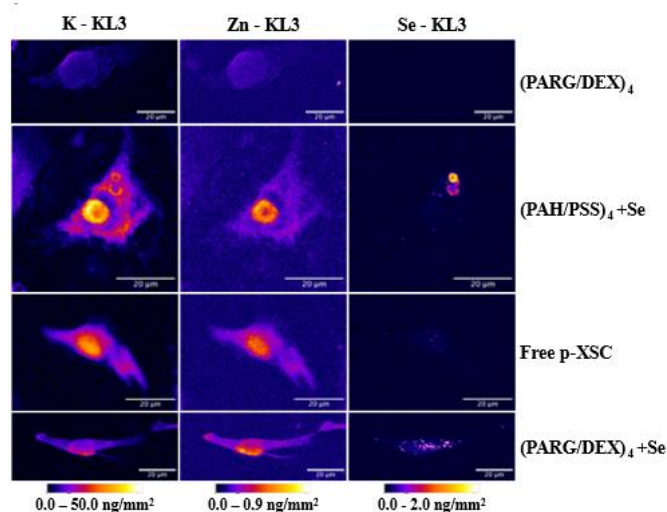
^fPolimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia, Kimika Fakultatea, Euskal Herriko Unibertsitatea UPV/EHU, Paseo Manuel de Lardizabal 3, 20018 Donostia, Spain

^gDepartment of Laboratory Medicine, Experimental Cancer Medicine (ECM), Karolinska Institutet, 17177 Stockholm, Sweden

^hDeutsches Elektronen-Synchrotron (DESY), Notkestr. 85, 22607 Hamburg, Germany

rebeka.reszegi@studium.uni-hamburg.de

Selenium (Se) compounds hold promise as potential therapeutics in cancer research due to their diverse biological functions and redox-regulating properties. In this study, we investigated the encapsulation of a hydrophobic selenium compound inside 5 μm sized biodegradable polyelectrolyte capsules consisting of poly-L-arginine and dextrane. While the encapsulated form of the drug show comparable cellular uptake and cytotoxicity as the free drug, e.g. no improved performance was achieved, our investigation yielded crucial insights. Utilizing subcellular resolution synchrotron X-ray fluorescence imaging (XFI), we successfully traced the intracellular location of the drug by demonstrating the degradation of the capsules and the following redistribution of the drug, without having to add any label. This highlights the potential of XFI as a powerful tool for tracking intracellular dynamics of metal-based drugs.



Pseudo-coloured images comparing the intracellular distribution density $p_{\text{p-XSC}}$ of p-XSC using different exposure conditions, as acquired by XFI. The signals originated from the K KL₃ emission (first column), Zn KL₃ emission (second column), and Se KL₃ emission (third column). The control HeLa cells in the first row were treated with biodegradable unfilled capsules (PARG/DEX)₄. In the next row non-biodegradable (PAH/PSS)₄ p-XSC-filled capsules were employed. In the third-row cells were exposed to p-XSC-filled biodegradable (PARG/DEX)₄ capsules. In the last row cells had been exposed to free p-XSC. The scale bars indicate 20 μm .

Referencias

[1] The manuscript is currently being prepared.

F2 - Post-Synthesis modification (PSM) of MOFs

María Devesa García¹, M. Carmen Contreras Morales¹, Iñigo J. Vitorica Yrezabal¹, Sara Rojas Macías¹

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

Metal-organic frameworks (MOF) are a class of porous materials formed by metal ions or clusters connected by organic molecules. MOFs have a highly ordered structure with a large surface area, making them useful for applications such as gas storage, separation, catalysis, and drug delivery [1]. Post-synthesis modification (PSM) of MOFs involves altering the structure and/or properties of MOFs after their initial synthesis. This can include adding functional groups, exchanging metal ions, or modifying the surface of the primitive MOF [2,3]. In this work we have modified the 2D $\text{Cu}_3(\text{H}_2\text{Gly})_2(4,4\text{Bipy})_2$ (Gly = glyphosine, 4,4 Bipy = 4,4 bipyridine) MOFs structure by introducing different metal ions to form a $\text{Cu}_3\text{M}_2(\text{Gly})_2(4,4\text{Bipy})_2$ (Gly = glyphosine, 4,4 Bipy = 4,4 bipyridine, M = metal cation) 3D structure.

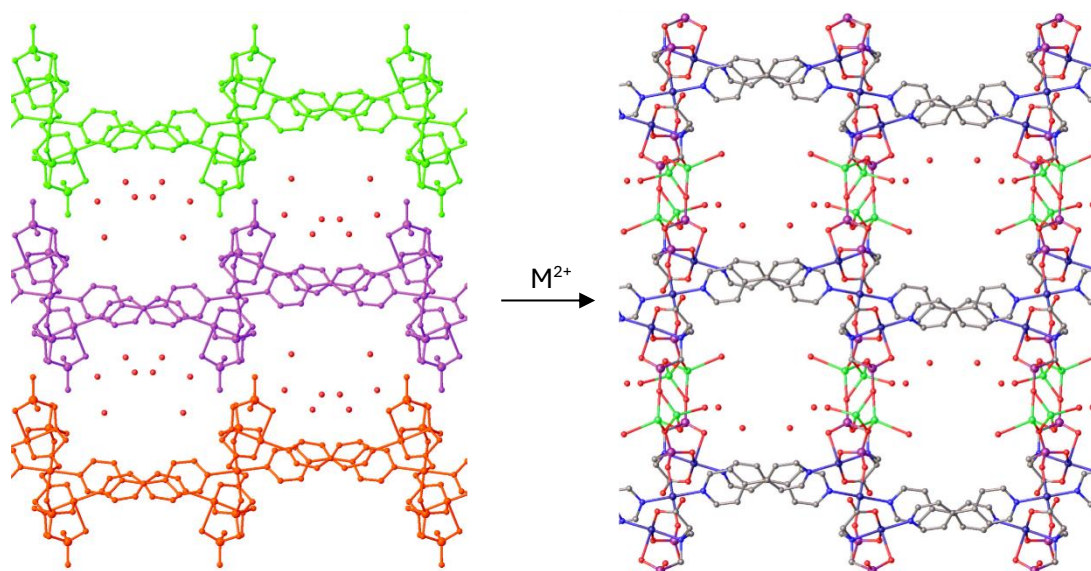


Figure 2. Structure of the starting compound and the compound formed by PSM with metal cation. Hydrogen atoms have been omitted for clarity. One disordered metal atom has been omitted for clarity. The different layers of the starting compound are represented by various colours (red, green, and purple), and water molecules are depicted in the pores. Carbon, grey; oxygen, red; nitrogen, light blue; copper, dark blue; phosphorus, purple; and metal cation, green.

References

- [1] M. Kalaj, S. M. Cohen. *ACS Cent. Sci.* **2020**, 6, 7, 1046–1057.
- [2] W. He, D. Lv, Y. Guan, S. Yu. *J. Mater. Chem. A*, **2023**, 11, 24519.
- [3] S. Mandal, S. Natarajan, P. Mani, A. Pankajakshan. *Adv. Funct. Mater.*, **2021**, 31, 2006291.

F3 - Designing novel MOFs using reticular chemistry

Pablo Salcedo-Abraira¹, Íñigo Vitorica-Yrezabal¹, Antonio Rodríguez Diéguez¹

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

psalcedo@ugr.es

The design of new materials has been always a challenge. In the last decades, the use of reticular chemistry has appeared as an excellent route to modulate as required the properties of different materials [1-3]. In this work, we present the synthesis of a novel series of isorecticular materials based on the lab-made ligand H₄PL₄ and Co.

The different structures are composed by a layered bidimensional Co-PL₄ coordination polymer interacting between them by weak interactions or through the coordination of a co-ligands that create porous 3D structures (Figure 1); with different properties depending on the nature of the selected co-ligand, allowing us to modulate the porosity and stability of the framework depending on the target application.

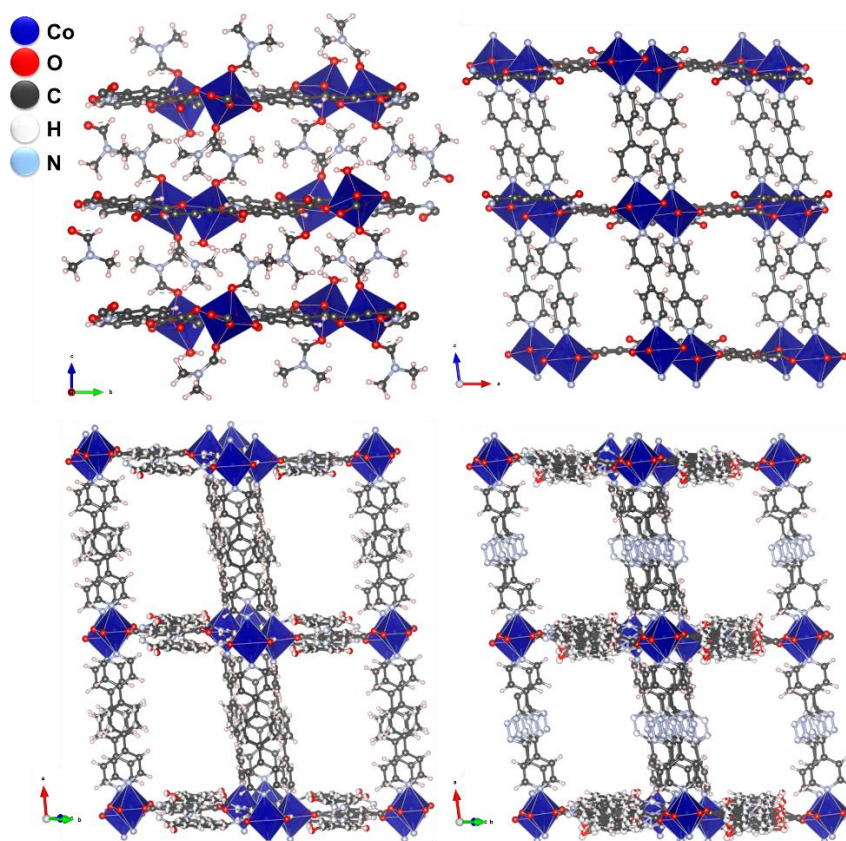


Figure 1: Co-PL₄- based MOF structures without co-ligand (top left) and with 4,4'-bipyridine (top right), 1,4-di(pyridyl)benzene (bottom left) and 3,6-di(4-pyridil)-1,2,4,5-tetrazine (bottom right).

Referencias

- [1] O.M. Yaghi, *ACS Central Science*, **2019**, 5, 8, 1295-1300.
- [2] H. Jiang, D. Alezi, M. Eddaoudi, *Nature Review Materials*, **2021**, 6, 466-487
- [3] A. Ejsmont, J. Andro, A. Lanza, A. Galarda, L. Macreadie, S. Wuttke, S. Canossa, E. Ploetz, J. Goscianska, *Coordination Chemistry Reviews*, **2021**, 430, 213655

Agradecimientos

P.S-A. agradece la ayuda JDC2022-048964-I, financiado por MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y por la Unión Europea "NextGenerationEU"/PRTR.

F4 - ASYMMETRIC DILANTHANIDE MOLECULES AS PLATFORMS FOR QUBITS

Hanae Boulehjour,^{1,2} Andoni Zabala-Lekuona,² Daniel Reta^{1,2,3}

¹Donostia International Physics Center, 20018, Donostia, Spain

²Faculty of Chemistry, University of the Basque Country (UPV/EHU), 20018 Donostia, Spain,

³Ikerbasque, Basque Foundation for Science, 48011, Bilbao, Spain

hanae.boulehjour@dipc.org

In the quest to obtain a robust platform to implement quantum computing, qubits based on molecular spins are exciting candidates due to the reproducibility and versatility offered by coordination chemistry – yet, the figures of merit of the available compounds fade when compared to more established approaches such as those based on quantum dots¹ or trapped ions². Thus, novel molecular systems are in high demand to help advance the field. In this context, molecules containing two lanthanide ions in asymmetric coordination environments are promising candidates³ as these afford strong spin-orbit coupling which results in well-defined electronic states. When accounting for their interaction, these states can be thought of as the computational basis of the qubit, where to encode logical operations.³

In this project, coordination chemistry was employed to synthesize a previously reported⁴ asymmetric ligand offering two pockets of different size and nature to selectively host appropriate lanthanide ions, used in a different context. To assess the validity of the proposed methodology, the synthesis was first performed using diamagnetic lanthanide ions, which led to the obtention of the Lanthanum(III) mononuclear compound, characterized by Nuclear Magnetic Resonance (NMR) and Single Crystal X-Ray Diffraction (SCXRD). Following this result, the same reaction was performed with the paramagnetic Cerium(III) ion and resulted in an equivalent mononuclear compound. Then, crystallization of the attempted dinuclear compound reveals an unexpected bis(heterodinuclear)[La³⁺Y³⁺] structure (**Figure 1**) in which the four lanthanide ions hold a well-defined position, representing a first stepping stone to continue the investigation. Current efforts to characterize magnetic properties using magnetometry and electronic structures by quantum chemistry methods are on-going.

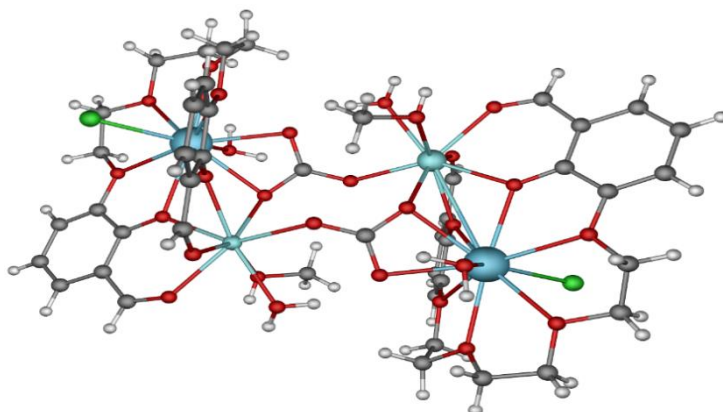


Figure 1. Cationic fragment of the bis(heterodinuclear)[La³⁺Y³⁺] compound measured by SCXRD. H: white, C: grey, O: red, La: blue, Y: light blue, Cl: green.

Referencias

- [1] F. P. García de Arquer et al., *Science*, **2021**, 373, 640
- [2] V. M. Schäfer et al., *Nature*, **2018**, 555, 75
- [3] David Aguilà et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **2014**, 136, 40
- [4] S. Tamburini et al., *Inorg. Chim. Acta*, **2006**, 359, 183–196

F5 - DESDE MOLÉCULAS HACIA POLÍMEROS DE COORDINACIÓN: PRIMERAS ETAPAS DE ESTE VIAJE

Laura F. Mazzei¹, Hanae Boulehour², Andoni Zabala-Lekuona¹, Javier Cepeda¹, Iñigo J. Vitorica-Yrezabal³, Antonio Rodríguez-Diéguez³, José M. Seco¹, Enrique Colacio³

¹Departamento de Química Aplicada, Facultad de Química, Universidad del País Vasco UPV/EHU, Paseo Manuel Lardizabal 3, 20018, Donostia

²Donostia International Physics Center (DIPC), 20018, Donostia

³Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, C/ Severo Ochoa s/n, 18071, Granada

laurafilomena.mazzei@ehu.eus

Nuestro equipo de investigación se ha especializado en el estudio de compuestos de coordinación basados en lantánidos. Entre otras cosas, para hacer estudios sobre propiedades magnéticas y luminiscentes, ya que en función del ion y ligandos seleccionados podemos obtener relajación lenta de la magnetización (efecto memoria) o bandas de emisión muy estrechas (colores muy puros).^{1,2}

En este camino, nos hemos topado con la posibilidad no buscada de implementar quiralidad a algunos de nuestros complejos viendo cómo dicha propiedad se manifiesta en otras como la luminiscencia dando lugar a CPL (*circularly polarized luminescence*). Dichos materiales son sistemas moleculares que, a nuestro modo de ver, ofrecen la posibilidad de polimerizar empleando una gran variedad de espaciadores.

Así, en esta comunicación presentamos los primeros pasos que hemos dado a la hora de polimerizar nuestras moléculas para llegar a responder una de las preguntas que nos planteamos: ¿Qué ocurrirá si conseguimos ordenar nuestras moléculas quirales a lo largo de una dimensión?

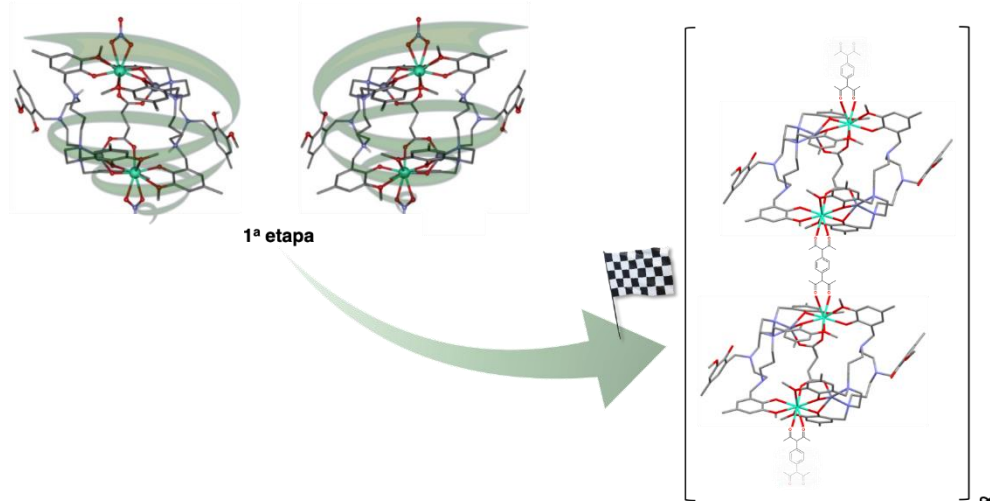


Figura 1. Desde sistemas moleculares (izquierda) a polímeros (derecha).

Referencias

- [1] A. Zabala-Lekuona, J.M. Seco, E. Colacio, *Coord. Chem. Rev.*, **2021**, 441, 213984.
[2] J.-C. G. Bünzli, *Coord. Chem. Rev.*, **2015**, 293-294, 19.

Agradecimientos

Gobierno Vasco/Eusko Jaurlaritz (IT1755-22), Red Guipuzcoana de Ciencia, Tecnología e Innovación (DG23/16) y Programa de Ayudas a la Investigación Colaborativa en áreas estratégicas ELKARTEK del Gobierno Vasco (bmG21).

F6 - ULTRABRIGHT AND COLOR-TUNABLE LUMINESCENCE OF NaGdF₄:Eu NANOPARTICLES FUNCTIONALIZED WITH Ir(III) COMPLEXES

Jesús Díaz-Burrucco¹, Juan Manuel Herrera¹

¹Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Sciences, University of Granada, Av. Fuentenueva s/n, 18071, Granada, Spain.

jesdb@ugr.es

Nowadays, fluoride-based lanthanide nanoparticles (LnNPs) are at the forefront of lanthanide luminescence and related applications such as lighting, telecommunications, security inks or bioimaging.¹ LnNPs are chemically and photophysically very stable, their emission is sharp and long-lived, and their color emission can be tuned from the UV to the IR spectroscopic regions by careful selection of the optically active lanthanide dopants and their concentration. Nevertheless, the brightness of these LnNPs is about two order of magnitude lower than that observed in analogous bulk materials. This is due to their intrinsically large surface-to-volume ratio, which favors non-radiative deactivation of the lanthanide excited states by surface defects. In addition, the forbidden nature of the f-f transitions makes direct excitation of the lanthanide ions difficult and results in weak emissions.³

To overcome these issues, we propose the use of luminescent d-block chromophores as light-harvesting units to sensitize lanthanide emission via d → f energy transfer processes (antenna effect).³ In this flash presentation we will present our latest results in the search for ultrabright and color-tunable composites based on LnNPs nanoparticles functionalized with emissive Ir(III) complexes.

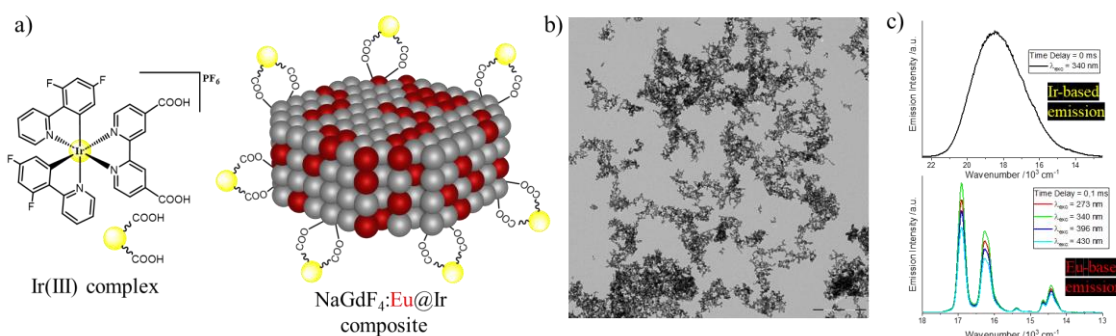


Figure 1. a) Schematic representation of emissive Ir(III) complex and NaGdF₄:Eu@Ir composite. b) TEM image of NaGdF₄:Eu nanoparticles. c) Time-gated emission of NaGdF₄:Eu@Ir nanocomposite.

Referencias

- [1] L. Wang, S. Han, C. Li, D. Tu, X. Chem., *Acc. Chem. Res.* **2023**, *4*, 193.
 [2] C. Cheignon, A. Kassir, L. K. Soro, L. J. Charbonnière, *Nanoscale* **2022**, *14*, 13915.
 [3] Y. Ye, J.-R. Jiménez, M. M. Quesada-Moreno, A. Navarro, E. M. Ortega-Naranjo, A. Orte, J. M. Herrera, *Adv. Opt. Mater.* **2024**, 2302954 (<https://doi.org/10.1002/adom.202302954>).

Acknowledgements

Project PID2022-138090NB-C21, MICIN/AEI/10.13039/501100011033/FEDER.