



XXI Reunión Bienal
del Grupo Especializado
de **QUÍMICA**
INORGÁNICA

XV Reunión Bienal
del Grupo Especializado
de **QUÍMICA DEL**
ESTADO SÓLIDO

LIBRO DE RESÚMENES

2 - 4 SEPTIEMBRE



QIES26.USAL.ES

QIES 2026

**21ª Reunión Bienal del Grupo Especializado de QUÍMICA INORGÁNICA y
15ª Reunión Bienal del Grupo Especializado de QUÍMICA DEL ESTADO SÓLIDO**

Libro de resúmenes: Zamora, 2 - 4 septiembre 2026

Editor: Real Sociedad Española de Química, 2026

ISBN: 978-84-09-90055-8

Edición a cargo de:

Alexander Misol Gallego
Miguel Ángel Vicente Rodríguez
Raquel Trujillano Hernández
Alejandro Jiménez Martín

Diseño:

Raquel Trujillano Hernández
Alexander Misol Gallego



Bienvenidos al Congreso QIES26

Este Congreso bienal aúna, bajo el nombre de QIES26, la *XXI Reunión Bienal del Grupo Especializado de Química Inorgánica* y *XV Reunión Bienal del Grupo Especializado de Química del Estado Sólido de la RSEQ*. Compartiremos nuestros últimos trabajos durante los días 2, 3 y 4 de septiembre de 2026 en el Salón de Actos del Campus Viriato de la Universidad de Salamanca, en la ciudad de Zamora.

Nuestro objetivo es reunir a científicos y compartir el estado de nuestra investigación en el campo de la Química Inorgánica y del Estado Sólido.

Nuestro interés es generar el clima necesario para favorecer la transferencia de nuestro conocimiento celebrando esta reunión científica teniendo como sede del evento el Campus Viriato y la Escuela Politécnica Superior de Zamora.

Nuestro deseo es que este encuentro dé lugar a la adquisición de conocimientos, a la colaboración y a la propuesta de nuevos planes de investigación conjuntos.

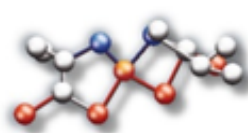
Nuestra ambición es hacernos visibles en la sociedad e impulsar y promover el gusto por la investigación entre los estudiantes.

Nuestra esperanza es que esta Reunión sea científicamente interesante y beneficiosa y, por supuesto, que tengáis una muy agradable estancia en este Campus histórico de la Universidad de Salamanca y en la ciudad de Zamora.

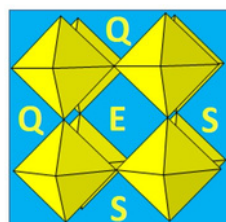
Raquel Trujillano Hernández

Presidenta del Comité Organizador

ENTIDADES COLABORADORAS



GEQI
GRUPO ESPECIALIZADO DE
QUÍMICA INORGÁNICA



GEQES
grupo especializado
de
**QUÍMICA DEL
ESTADO SÓLIDO**

A logo with four colored circles (blue, green, orange, red) arranged in a square pattern.
RSEQ
Real Sociedad Española de Química
El Sitio de la Química en España

A logo with four colored circles (blue, green, orange, red) arranged in a square pattern.
STSAL
RSEQ
Sección Territorial de Salamanca

VNiVERSiDAD D SALAMANCA

Escuela **Politécnica Superior**
de Zamora

VNiVERSiDAD D SALAMANCA

Facultad de
Ciencias Químicas



**VNiVERSiDAD
D SALAMANCA**

ORGANIZACIÓN

Comité Organizador

Presidencia

Raquel Trujillano Hernández

Universidad de Salamanca

Francisco Martín Labajos

Universidad de Salamanca

Miguel Ángel Vicente Rodríguez

Universidad de Salamanca

Alfonso Caballero Martínez

Universidad de Sevilla

Pedro F. Núñez Coello

Universidad de La Laguna

Xermán de la Fuente Leis

*Instituto de Nanociencia y Materiales
de Aragón*

M^a Ángeles Gómez de la Torre

Universidad de Málaga

Enrique Rodríguez Castellón

Universidad de Málaga

Alexander Misol Gallego

Universidad de Salamanca

Alejandro Jiménez Martín

Universidad de Salamanca

M^a José Mayoral Muñoz

Universidad Complutense de Madrid

Mayra García Álvarez

Universidad de Salamanca

Beatriz González Rodríguez

Universidad de Salamanca

Ignacio Jiménez Morales

Universidad de Salamanca

Pablo Rodríguez Miguel

Universidad de Salamanca

Gabriel Soares Bento

Universidad de Salamanca

Comité Científico

M^a Antonia Señaris Rodríguez

Universidade da Coruña

Matilde Fondo Busto

*Universidade de Santiago de
Compostela*

Rosa M^a Martín Aranda

*Universidad Nacional de Educación a
Distancia*

Ana María García Deibe

*Universidade de Santiago de
Compostela*

José M^a Fernández Rodríguez

Universidad de Córdoba

Ivana Pavlovic

Universidad de Córdoba

Yolanda Cesteros Fernández

Universitat Rovira i Virgili

María Isabel López Solera

Universidad de Castilla la Mancha

Juan Manuel Gutiérrez Zorrilla

*Universidad del País Vasco - Euskal
Herriko Unibertsitatea*

Elena Lalinde Peña

Universidad de La Rioja

Luis Sánchez Granados

Universidad de Córdoba

Flaviano García Alvarado

Universidad CEU San Pablo

María Luisa López García

Universidad Complutense de Madrid

David Ávila Brande

*Universidad Complutense de
Madrid*

Teófilo Rojo Aparicio

*Universidad del País Vasco - Euskal
Herriko Unibertsitatea*

María Teresa Insausti Peña

*Universidad del País Vasco - Euskal
Herriko Unibertsitatea*

Juan Bautista Carda

Universitat Jaume I

Pedro Amorós del Toro

Universidad de Valencia

Gema Turnes Palomino

Universidad de las Islas Baleares

Breogán Pato Roldán

*Centro Ibérico de Investigación en
Almacenamiento Energético*

Antonio Sepúlveda Escribano

Universidad de Alicante

ÍNDICE

PLENARIAS

- PL1** **Challenges and perspectives in materials for energy storage**
N. Nieto, J. Rodríguez, I. Ruiz de Larramendi, E. Goikolea, V. Palomares, L. Lezama, T. Rojo
-
- PL2** **Aventuras y desventuras con materiales híbridos orgánico-inorgánicos para nuevos sistemas de frío**
María Antonia Señarís Rodríguez
-
- PL3** **Reactive Crystal Surfaces of Metal-Organic Frameworks**
Jorge A. Rodríguez Navarro
-

CONFERENCIAS INVITADAS

- C1** **Unusual slow relaxation of the magnetization in molecular systems and their use as spin qubits**
J. Mayans, J. Serra, J. Torrent, V. Novikov, A. Escuer, D. Venegas-Yazigui, M. Chiesa, David González-Rodríguez, R. Herchel
-
- C2** **Mxeno Ti_3C_2Tx como material multifuncional para baterías Metal(Li/Na)-Azufre**
Álvaro Bonilla, Antonio Gentile, Chiara Ferrara, Juan Luis Gómez-Cámer, Riccardo Ruffo, Álvaro Caballero
-
- C3** **Colossal Breathing-Caloric Performance of MOF-508b for Sustainable Solid-State Refrigeration**
M. Gelpi, J. García-Ben, S. Rodríguez-Hermida, J. López-Beceiro, R. Artiaga, Á. Baaliña, M. Romero-Gómez, J. Romero-Gómez, S. Zaragoza, J. Salgado-Beceiro, J. Walker, C. J. McMonagle, S. Castro-García, M. Sánchez-Andújar, M. A. Señarís-Rodríguez, J. M. Bermúdez-García
-
- C4** **Supported Metal Oxide Photocatalysts for Environmentally Relevant Photoredox Processes**
M. Luisa Marin, A. Blazquez-Moraleja, A. Diego-Lopez, L. Tamarit, F. Bosca, A. Lanterna
-
- C5** **Impresión 3D (low-cost) aplicada a tecnología SOFC y baterías de ion Li**
J.I. García-Jiménez, I. M. Peláez-Tirado, J.F. Valera-Jiménez, J.R. Marín-Rueda, M. Castro-García, J.C. Pérez-Flores, H. Gueddari-Aourir, J. Canales-Vázquez
-
- C6** **Organometallic Compounds to Modulate Intracellular Chemistry**
F. Martínez-Peña, A. C. Carrasco, S. Infante-Tadeo, A. Villechenous Rojo, V. Rodríguez-Fanjul, A.M. Pizarro
-

COMUNICACIONES ORALES

- 01** **Síntesis sin disolventes de propargilaminas utilizando como catalizadores heterogéneos Pd-LDHs preparados a partir de escoria salina de aluminio**
A. Jiménez, P. Rodríguez-Miguel, A. Misol, R. Trujillano, R.E. Thampikannu, K. Vellayan, M.A. Vicente
-
- 02** **Rediseñando el Band Gap en MOFs de Ti para potenciar la producción fotocatalítica de hidrógeno vía Ingeniería de Defectos**
M. Vos-Gracia, J. Ferrando-Ferrero, M. González-Fernández, V. Fernandes de Almeida, H. G. Baldoví, H. García, S. Navalón, S. Carrasco, P. Horcajada
-
- 03** **DFT/DART-driven Optimization of Copper-mediated Suzuki-Miyaura Couplings**
Francisco A. Gómez-Mudarra, Max García-Melchor, Jesús Jover
-
- 04** **The Penetration Index and its applications in Inorganic Chemistry**
J. Echeverría, S. Alvarez
-
- 05** **Electronic-Structure-Guided Design of Spin-Crossover Compounds with Targeted $T_{1/2}$**
A. García-Duran, L. Navarro, D. Vidal, J. Cirera
-
- 06** **Integración de Complejos LnW_{10} en Materiales 2D: Nuevas Plataformas para Tecnologías Cuánticas y Fotónicas**
J. Bustamante-Fernández, N. Sorazu, D. Cabrosi, A. Palacios-Lozano, E. Ruiz-Bilbao, J.M. Gutiérrez-Zorrilla, B. Artetxe, I. Oyarzabal
-
- 07** **Johnson gyrobifastigium geometry: an unusual platform for high-performance dysprosium single-ion magnets**
P. Oreiro-Martínez, J. Corredoira-Vázquez, Ana M. García-Deibe, M. Fondo
-
- 08** **Empleo de polioxometalatos multifuncionales encapsulados en membranas electrohiladas de poliamida para remediación de aguas**
A. Palacios-Lozano, B. Artetxe, L. Ruiz-Rubio, J. Bustamante-Fernández, E. Ruiz-Bilbao, J.M. Gutiérrez-Zorrilla, J.L. Vilas Vilela
-
- 09** **Adsorción selectiva en un material microporoso $\text{POM}/\{\text{Cu}(\text{cyclam})\}^{2+}$ capaz de experimentar transformaciones monocristal a monocristal**
E. Ruiz-Bilbao, B. Artetxe, S. Reinoso, G. Beobide, J. Bustamante-Fernández, A. Palacios-Lozano, L. San Felices, L. Lezama, J. M. Gutiérrez-Zorrilla, D. Sensharma, M. J. Zaworotko, S. Mukherjee
-
- 010** **Síntesis de CAU23 y MIL53 utilizando radiación microondas y una fuente inusual de aluminio. Caracterización y adsorción de CO_2**
P. Rodríguez, A. Jiménez, R. Trujillano, H. Joseph, A. Gil, M. A. Vicente
-
- 011** **Mejora de propiedades piezoeléctricas mediante heteroestructuras laminadas de materiales cerámicos**
A. Rodríguez, X. Vendrell, J. García
-
- 012** **Polímeros Supramoleculares Paramagnéticos basados en Complejos de Dirrutenio**
Lourdes del Álamo, Santiago Herrero, María José Mayoral
-
- 013** **A dual-emissive Eu/Tb molecular material for anion sensing in water**
P. Oreiro-Martínez, J. Corredoira-Vázquez, C. Díaz-Fontenla, M. Fondo, J. Sanmartín-Matalobos

- 014 Hybrid Ironporphyrin/TiO₂-Kaolinite Photocatalysts for Selective Degradation of Emerging Contaminants**
L. O. García, V. Lima, M. V. do Prado, E. J. Nassar, L. Marçal, E. H. de Faria, K. J. Ciuffi, A. Gil, S. Korili, R. Trujillano, M. A. Vicente
-
- 015 Diseño entrópico de hidróxidos dobles laminares 2D para su empleo como fotocatalizadores eficientes bajo luz solar en eliminación selectiva de gases NO_x**
A. Ruz-Luna, B. Gámiz, L. Marín, F. Martín, I. Pavlovic, L. Sánchez
-
- 016 Extracción electroquímica de Litio de Baterías Li-ion gastadas mediante LiFePO₄**
A. López-Chías, A. Benítez, Á. Caballero, R. Trócoli
-
- 017 ¿Intercalación o almacenamiento capacitivo? Analiza mi estructura**
F. García-Alvarado, A. Kuhn, R. Córdoba, C. M. Subramaniam, I. J. Villar-García, J. Goclon, A. Sarapulova, J. Maibach, S. Dsoke, E. García-González, C. Escudero, V. Martin-Diaconescu, F. Fauth, E. Rodríguez Castellón
-
- 018 Understanding Cooperative Reactivity in Iron Systems**
N. Hidalgo, J. Campos
-
- 019 Progresos hacia baterías Na-S mediante encapsulación de azufre en biocarbón ultramicroporoso**
Omar Saad-Molina, Azahara Cardoso-Almoguera, Juan Luis Gómez-Cámer, Almudena Benítez, Álvaro Caballero
-
- 020 Extracción de litio de aguas geotermales mediante un electrodo selectivo de LiFePO₄**
M. Ramírez-Prieto, R. Trocoli
-
- 021 A Dy³⁺ single-molecule magnet for luminescent and magnetic temperature readout**
J. Corredoira-Vázquez, P. Oreiro-Martínez, A.M. García-Deibe, M. Fondo
-
- 022 Simulation of Emission Properties in Real-Sized Lanthanide-Doped Nanoparticles**
A. N. Carneiro Neto
-
- 023 Contribución de materiales mesoporosos a la mitigación del cambio climático**
D. Cantador-Fernández, D. Suescum-Morales, J.R. Jiménez, J.M. Fernández-Rodríguez
-
- 024 Unraveling Mg²⁺ Storage and Structural Evolution in Layered H₂V₃O₈ Cathode for Rechargeable Magnesium-Ion Batteries**
A. Toledano-Mencia, M. Pokora, J. Goclon, E. García-González, F. Fauth, E. Rodríguez-Castellón, P. Díaz-Carrasco, F. García-Alvarado, A. Kuhn
-
- 025 Avances en almacenamiento térmico latente: materiales renovables, encapsulación avanzada y diseño de interfaces funcionales**
Y. E. Milián Rodríguez, C. Aguirado, M. Owais, M. Aretio
-
- 026 Discovery and decoding of the breathing-caloric effect in pillared cyanonickelate PICNIC-60**
P. Dafonte-Rodríguez, Ángel Ferradanes-Martínez, Alberto García-Fernández, Socorro Castro-García, María Antonia Señaris-Rodríguez, Juan Manuel Bermúdez-García, Manuel Sánchez Andújar

- 027** Producción de ácido bio-adípico mediante la desoxideshidratación de ácido múxico y posterior hidrogenación de ácido mucónico sobre catalizadores de renio y níquel soportados en biocarbón
J. Lozano, B. Khezri, Y. Cesteros
-
- 028** Influencia de la geometría de coordinación sobre el campo cristalino y la dinámica de espín en complejos de Gd(III)
D. Cabrosi, C. Rodríguez-Esteban, B. Artetxe, L. Lezama, A. Gaita-Ariño, M. Gonidec, I. Oyarzabal
-
- 029** Revisión de prototipos de baterías térmicas basadas en PCMs macroencapsulados
M. González Cruz, D. López Pedrajas, K. Mushtaq
-
- 030** Multi-objective optimisation of the hydrogenation of muconic acid to adipic acid on supported Ni catalysts
L. Arrieche-Hernández, J. Granados-Reyes, F. X. Felpin, Y. Cesteros
-
- 031** Funcionalización de arcillas laminares con fármacos antifúngicos para el tratamiento del eumicetoma
A. Misol, E. Sáez, M.F. Colom, M. Darder, P. Aranda
-
- 032** Magnetic Nanofluids for Power-to-Heat Applications
Breogan Pato-Doldán, Jorge Estébanez, Pelayo García Acevedo, Yolanda Piñeiro, Manuel Juncosa-Gallardo, Marllory Isaza-Ruiz, José Javier Saiz Garitaonandia, José Rivas, Javier Díez-Sierra, Claudia Gómez-Aguirre
-
- 033** Laser-triggered reactions between solids
J. Frechilla, A. Lahlahi-Attalhaoui, E. Martínez, L. A. Angurel, J. B. Carda, G. F. de la Fuente
-
- 034** Hidrocalumita y compuestos tipo hidrocalumita: Un tipo especial de hidróxido doble laminar
M.A. Vicente, A. Jiménez, P. Rodríguez-Miguel, A. Misol, R. Trujillano, V. Rives, A. Gil
-
- 035** Revealing the Structural and Electronic Dynamics of Pd(Ag)-Fe_{3-δ}O₄ Catalysts during Deactivation for Low Temperature Partial Oxidation of Methane
Marta Alonso Gómez, Elena Montejano-Nares, Esther Asedegbega-Nieto, Benjamín Solsona, Ruth Sanchis, José M. Conesa, Francisco Ivars-Barceló
-
- 036** Structural and Electronic Dynamics of Pd(Ag)-Fe_{3-δ}O₄ Catalysts during the Direct Conversion of CH₄ and CO₂ into C₂ Oxygenates
Marta Alonso Gómez, Elena Montejano-Nares, Esther Asedegbega-Nieto, José M. Conesa, Francisco Ivars-Barceló
-
- 037** In Situ Formation of Pigment Phases in Glassy Matrix Films via Laser Zone Melting
Abderrahim Lahlahi-Attalhaoui, Santiago Luis Toca Valero, Germán F. de la Fuente, Juan Bautista Carda
-
- 038** Diseño de catalizadores selectivos Co@NC para la conversión de CO₂ en CO vía RWGS
A. Rodríguez-Carrillo, M. Mercedes Pastor-Blas, A. Sepúlveda-Escribano

COMUNICACIONES ORAL-FLASH

- F1** Encapsulamiento de tetradecilamina en MgO mediante prensado uniaxial para almacenamiento de energía térmica
C. Aguirado, S. Rea, Y. E. Milián, P. M. Vilarinho
- F2** $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ para regulación térmica en biodigestores. Efecto de aditivos orgánicos en la segregación de fase
M. Aretio, C. Aguirado, Y. E. Milián, B. Pato, M. D. Robustillo
- F3** Overview of SPARK-e: Solid-State PCMs for Advanced Energy Recovery and Key Thermal Control in Electronics
M. Molina-Muriel, A. Abdellattef, B. Pato-Doldán, Rubén Ramos-Velarde, Kashif Mushtaq, Aleksandr Shkatulov, C. Gómez-Aguirre
- F4** Diseño de Nanocomposites de ZnAl-LDH/rGO para Procesos Combinados de Adsorción-Fotocatálisis en la Eliminación de Contaminantes Emergentes en Medios Acuosos
J. F. Romero, E. López-Maya, M. G. Álvarez
- F5** Elucidating the Structure–Activity Relationships of Ni@MgAl and Co@MgAl Anionic Clay Catalysts for Hydrogen Production via Dry Reforming of Methane
Zoulikha Abdelsadek, Juan P. Holgado, Ewa Rząd, Klaudia Dydek, Patrick J. Masset

PÓSTER

- P1** Tailored Porous Carbons Derived from ZIF-8 for Efficient Pharmaceutical Removal from Aqueous Media
D.R. Sáenz-García, G. Turnes, L.O. Leal, C. Palomino
- P2** Valorization of Metallic and Polymeric Residues for the Sustainable Preparation of Metal–Organic Frameworks
D. Ferrera, M. del Río, C. Palomino, G. Turnes
- P3** Membranas Compuestas Innovadoras de Geopolímero/Zeolita/PVA Obtenidas Mediante Electrohilado
M. Schneider, M. Calzado-Delgado, E. Rodríguez-Castellón, M.O. Guerrero-Pérez, D. Hotza, A. DeNoni Junior, A. Zrelli, R.F.P.M. Moreira
- P4** ZIF-8@COF Composite as a Dual-Selective Adsorbent for Environmental Remediation
M. del Río, G. Turnes, C. Palomino
- P5** A Luminescent Heteronuclear Eu/Tb Molecular Sensor for Environmental Anion Monitoring
P. Oreiro-Martínez, A. Agrafojo-Parada, J. Sanmartín-Matalobos, J. Corredoira-Vázquez, M. Fondo
- P6** Transporte Protónico y Química de Defectos en Niobatos Complejos Relacionados con la Estructura Weberita.
M. González-Rodríguez, S. Bdey, Jorge Casanova, D. Arenas-Esteban, S. N. Savvin, D. Ávila, A. Mújica, S. Radescu, P. Núñez

- P7 Pushing the Energy Barrier in Air Stable Dy³⁺ Single-Ion Magnets**
M. Fondo, A. Iglesias-Fernández, J. Corredoira-Vázquez, Ana M. García-Deibe
-
- P8 Hidróxidos Dobles Laminares de Alta Entropía con Relaciones M²⁺/M³⁺ Variables para la Eliminación Fotocatalítica de NOx Bajo Luz Visible**
C. Díaz-Torres, B. Gámiz, I. Pavlovic, L. Sánchez
-
- P9 Efecto de la Reducción de Tamaño de Partícula de Hidróxidos Dobles Laminares (LDH) Aplicados como Fotocatalizadores para la Purificación de Aire**
Laura Marín, Antonio Ruz-Luna, Ivana Pavlovic, Beatriz Gámiz, Luis Sánchez
-
- P10 Análisis del Comportamiento Mesomórfico de Nuevos Compuestos de Coordinación de Pd(II) Basados en Ligandos de Tipo Pirazol**
N. Ahijón-Díaz, C. Cuerva, L. Abad Galán
-
- P11 Síntesis de Nanopartículas de FeCo por el Método de Poliol Asistido por Microondas**
Manuel Juncosa, Marlory Isaza-Ruiz, Javier Díez, Claudia Gómez, Cristina Prieto, Breogán Pato
-
- P12 Desarrollo de Materiales Catódicos Sostenibles Basados en MnO₂ Para Baterías de Zinc**
Verónica López López, Inmaculada Álvarez Serrano, María Luisa López García
-
- P13 Rapid and Efficient Microwave-Assisted Synthesis of β -diketonate Lanthanide Complexes for Luminescent Thermometry Applications**
Isabel García Santos, Claudia Fernández-Blanco, Julio Corredoira-Vázquez, Matilde Fondo
-
- P14 Pressure-Assisted Electrocaloric Response in Thiourea under Low Electric Field in the Cryogenic Region**
J.M. Bermúdez-García, S. Yáñez-Vilar, Á. Ferradanes-Martínez, A.L. Llamas-Saiz, M. Sánchez-Andújar, S. Castro-García, M.A. Señarís-Rodríguez, J. Mira
-
- P15 Unveiling Giant Barocaloric Effects in Crystalline Molecular Rotors**
P. Dafonte-Rodríguez, Carmen de Cabo Rodríguez, María Gelpi, Julian Walker, Charles James McMonagle, Socorro Castro-García, María Antonia Señarís-Rodríguez, Juan Manuel Bermúdez-García, Manuel Sánchez-Andújar
-
- P16 Sustainable Tandem Catalysis for the Synthesis of Amides from Levulinic Acid Using Mechanochemically Prepared Mono and Bimetallic Catalytic Systems**
C. Stefani, F. Zorzetto, A. Perosa, E. Rodríguez-Castellón, M. Selva
-
- P17 Síntesis Mecanoquímica en Seco de Hidróxidos Dobles Laminares (HDL) con Diferentes Composiciones Químicas para la Fotodegradación de Paracetamol**
G. Bento, A. Misol, P. Rodríguez, K. Eguiluz, I. Gimenez, R. Trujillano
-
- P18 Hacia Polímeros con Azufre Covalente como Solución Eficiente para las Baterías Na-S**
Jesús M. Blázquez-Moreno, Almudena Benítez, Álvaro Caballero
-
- P19 Valorización de Pulpa de Café como Matriz Carbonácea Microporosa para Baterías Sodio-Azufre a Temperatura Ambiente**
Azahara Cardoso-Almoguera, Johanna Serna, José A. Siles, Alvaro Caballero, Almudena Benítez

P20 **Avoiding the Detrimental SMSI Effect on a Titania Support in the Fischer-Tropsch Reaction**

Alfonso Caballero, Francisco Platero, Juan P. Holgado, Gerardo Colón

P21 **2D Hybrid Organic-Inorganic Perovskite Solid-Solid Phase Change Materials for Thermal Management Applications**

A. Abdellattef, A. Nonato, S. Castro-García, B. Pato-Doldán, C. Gómez-Aguirre

P22 **Influencia de la Química de Precursores en la Formación de Nanopartículas de Ferrita $\text{Fe}_{3-x}\text{Co}_x\text{O}_4$ Magnéticamente Homogéneas**

M. Muñoz-Arias, A. Marigomez-Cajaraville, I. Gil del Muro, A. Díaz-García, I. Castellanos-Rubio, L. Lezama, M. Insausti

P23 **Estrategias Post-Sintéticas Combinadas para el Control del Tamaño de Cristalito en Hidróxidos Dobles Laminares**

A. Misol, A. Jiménez, F.M. Labajos, V. Rives

P24 **De POMOF a Carburo: Una Estrategia Sintética para la Obtención Controlada de Carburos de Mo Y Mo/W Orientados a la Reacción RWGS**

María Karla López González, Mario Caccia, Javier Narciso

PLENARIAS

PL1

Challenges and perspectives in materials for energy storage

N. Nieto¹, J. Rodríguez¹, I. Ruiz de Larramendi¹, E. Goikolea¹, V. Palomares¹, L. Lezama¹, T. Rojo¹

¹ Organic and Inorganic Chemistry Department, University of the Basque Country UPV/EHU, P.O. Box 644, 48080, Leioa, Spain, teo.rojo@ehu.eus

Global energy and electricity demand in 2025 increased 1.3% and 3%, respectively. Demand for electric vehicles (+38%), with over 20 million units sold, and data centers (+17%) have seen a significant increase. The use of renewable energy, particularly solar photovoltaics, has contributed to this growth in energy demand. The use of renewable energy inherently requires energy storage. Batteries constitute the critical part of the available energy storage systems.

Li-ion batteries are the most suitable for electromobility applications. Analyzing the materials used in Li-ion technology and their contribution to electromobility will allow for monitoring the evolution of electric vehicles. The recycling and sustainability of Li-ion batteries present enormous potential for the recycling industry given the significant increase in the volume of used batteries. In stationary energy storage, where cost is a determining factor, other technologies are also used, such as vanadium redox flow or sodium-based batteries.

Sodium-ion (NIB) batteries have recently been attracting the attention of numerous academic and industrial sectors and will be analyzed in some detail. The materials of choice for the cathode in NIB are layered oxides, polyanionic compounds and Prussian Blue analogues. The most promising cathodes include sodium manganese layered oxides ($\text{Na}_{2/3}\text{Mn}_{1-y}\text{M}_y\text{O}_2$; $y \leq 0.33$; M is one or more transition metals, e.g. Ni, Ti, Fe, etc.), with attractive physical, electrochemical, and commercial properties. Hard carbons (HCs) are used as anode materials in NIBs due to their high specific capacity, low voltage profile, and compatibility with medium-to-high charge/discharge rates. Full cells with biowaste-derived HCs and two types of cathodes - layered oxide and polyanionic materials- using sacrificial sodium salt will be analyzed.

Supercapacitors and M(Li,Na)-based hybrid (a coupled supercapacitor- and faradic-type electrode) energy storage systems will be explored for mobility and stationary energy storage applications. Unconventional Na-ion capacitor configurations will be also included to bridge the gap between batteries and supercapacitors, demonstrating promising power capability and cycling durability for applications requiring fast charge/discharge and long operational lifetimes.

Through this presentation, we hope to highlight the benefits of the energy storage systems, provide context for the current state-of-the-art, and insight into the future pathways for development.

Aventuras y desventuras con materiales híbridos orgánico-inorgánicos para nuevos sistemas de frío

María Antonia Señarís Rodríguez

CICA – Centro Interdisciplinar de Química y Biología, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidade da Coruña, Campus de Elviña 15071 A Coruña, España, e-mail: m.senaris.rodriguez@udc.es

En esta charla daré una visión panorámica de las investigaciones que venimos realizando en nuestro grupo de la Universidad de A Coruña para desarrollar nuevos refrigerantes sólidos basados en compuestos híbridos orgánico-inorgánicos con un enfoque típico de Química del Estado Sólido. Además, y como cada vez se nos anima más a tratar de convertir los descubrimientos del laboratorio en productos comerciales, aprovecharé para hablar de nuestra experiencia en este otro contexto.

Todo empezó, ya hace algunos años cuando, durante la realización de una Tesis Doctoral y por primera vez en la bibliografía, encontramos una respuesta barocalórica muy destacada en una perovskita híbrida orgánica-inorgánica bajo la aplicación de presiones muy bajas [1]. Y nos planteamos el reto de tratar de aprovechar tales efectos para desarrollar nuevos refrigerantes sólidos que pudiesen ser la base de sistemas de refrigeración y almacenamiento de frío más seguros, eficientes y sostenibles.

Ello implicó, por una parte avanzar en investigación básica sobre estos sistemas, lo que nos llevaría a profundizar en los fenómenos subyacentes que explican dicho comportamiento. Esto nos permitiría desarrollar tres generaciones distintas de materiales de interés basados en perovskitas híbridas [2], híbridos moleculares [3] y más recientemente en MOFs [4]. Además fue necesario optimizar otros parámetros (conductividad térmica, estabilidad química, etc.) [5], así como disponer de cantidades mucho mayores de muestra.

Desde el punto de vista tecnológico también hubo que afrontar al reto de diseñar y construir dispositivos, lo cual a su vez implicó tener que trabajar mano a mano con ingenieros.

Y por supuesto hacer un importante esfuerzo de protección de propiedad intelectual.

Con todo, la parte más compleja es, sin duda, encontrar financiación, y empresas adecuadas que quieran invertir y apostar por tecnologías novedosas que, siendo muy prometedoras, requieran aún de desarrollo para poder llegar a mercado.

[1] J M Bermúdez-García et al. *Nat. Commun.*, **2017**, 8, 15715

[2] J.M. Bermúdez-García et al. *J. Phys. Chem. Lett.*, **2017**, 8 4419; *J. Mater. Chem. C.*, **2018**, 6, 9867; J. Salgado-Beceiro et al. *Mater. Adv.*, **2020**, 1, 3167

[3] J. Salgado-Beceiro et al. *J. Mater. Chem. C*, **2020**, 8, 13686; J. García-Ben et al. *J. Mater. Chem. A*, **2023**, 11, 22232; *J. Mater. Chem. A*, **2024**, 12, 23751 ; P. Dafonte-Rodríguez et al., *Inorg. Chem. Front.*, **2025**, 13, 4419

[4] J. García-Ben et al. *Chem. Mater.*, **2022**, 34, 3323 ; M. Gelpi M et al. *Adv. Mater.*, **2023**, 36, 2310499

[5] I. Delgado-Ferreiro, A. Ferradanes-Martínez et al. *J. Mat. Chem. A*, **2025**, 13, 40179

Agradecimientos: Se agradece el apoyo financiero de los proyectos: PID2021-122532OB-I00/AEI/10.13039/501100011033/FEDER, UE; ED431C 2022/39 y ED431C 2026/32 (Xunta de Galicia) y 001_IN855A_2023 (GAIN)

Reactive Crystal Surfaces of Metal-Organic Frameworks

Jorge A. Rodríguez Navarro

Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Granada, Spain, jarn@ugr.es

The reactivity of porous reticular materials such as metal-organic frameworks (MOFs) has been primarily understood in terms of processes occurring within their internal pores/channels. This approach has stimulated considerable research into engineering MOFs pore chemistry, allowing precise control over the chemical environment of their internal surfaces for targeted applications. This approach is effective for solid-gas processes with fully activated pores and small molecules, such as CO₂ or H₂O. However, their applicability can become limited in more complex systems, particularly those involving larger substrates or solid-liquid interfaces. In such environments, solvent molecules can partially or completely occupy the pore space, while diffusion and kinetic barriers restrict the access of reactants to the inner pore region. As a result, chemical transformations and adsorption events will mainly occur at or near the external crystal surface, rather than within the internal pore network (Figure 1).

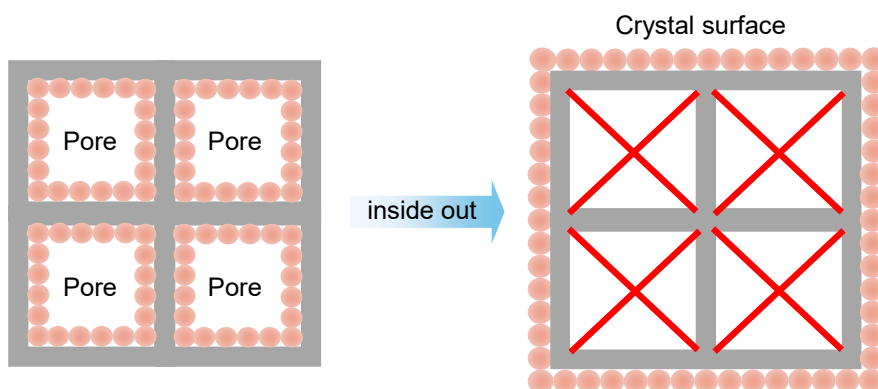


Figure 1. Pore nanospace vs. crystal surface.

In reticulated porous materials, molecular interactions and reactions are governed by nanoscale confinement and diffusion within pores (see left), whereas exposed crystal facets provide direct, diffusion-free access to reactants without substrate size limitations (see right). To exemplify this approach, we will show some examples of crystal surface reactivity of Zeolitic imidazolate frameworks (ZIFs) and metal-organic polyhedra polyoxometalate [MOP][POM] salts towards the selective break down of phosphoester and peptide bonds of biological and environmentally relevant substrates [1-5].

References

- [1] J. D. Martín-Romera, et al. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2024**, 16, 9900–9907.
- [2] C. Perona-Bermejo, et al. *Adv. Funct. Mater.* **2024**, 2405785.
- [3] E. Borrego-Marin, et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, 147, 10834–10839
- [4] E. Borrego-Marin, et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2026**, 148, 1646–1654.
- [5] C. Perona-Bermejo, et al. To be published.

CONFERENCIAS INVITADAS

Unusual slow relaxation of the magnetization in molecular systems and their use as spin qubits

J. Mayans¹, J. Serra¹, J. Torrent¹, V. Novikov¹, A. Escuer¹, D. Venegas-Yazigui², M. Chiesa³, David González-Rodríguez⁴, R. Herchel⁵

¹ Universitat de Barcelona and Institut de Nanociència i Nanotecnologia (IN²UB), Martí i Franqués 1-11, 08028, Barcelona, Spain. julia.mayans@ub.edu

² Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago de Chile, USACH, Casilla 40 Correo 33, Santiago, Chile.

³ Department of Chemistry and NIS Centre, University of Torino, Torino 10125, Italy.

⁴ Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, Cantoblanco, 28049, Madrid, Spain.

⁵ Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, Olomouc 77147, Czech Republic.

One of the main goals in exploring the nanoworld is the development of devices working under the laws of quantum mechanics. Quantum superposition, quantum entanglement, and quantum coherence, highly connected capital concepts, have been exploited in recent years in the so-called quantum coherent nanoscience (QCN)¹ and used mainly to develop devices for quantum computing and quantum sensing. Fortunately, any two-level system that fulfils the seven DiVincenzo criteria,² including some paramagnetic molecules, can behave as a qubit and can be initialized through different external stimuli. For this reason, since some years ago, magnetic molecules have been proposed to be used in quantum information processing (QIP).³ We propose the use, as molecular spin qubits, two types of molecules exhibiting slow magnetic relaxation that differs from the well-known relaxation observed in Single Molecule Magnets: isotropic cations (Gd^{III}, Mn^{II} and Cr^{III}),⁴ and molecules with $S = \frac{1}{2}$ (VO^{II}, Cu^{II} and Ag^I)⁵ which, in both cases, demonstrated a very well qubit performance (Figure 1).

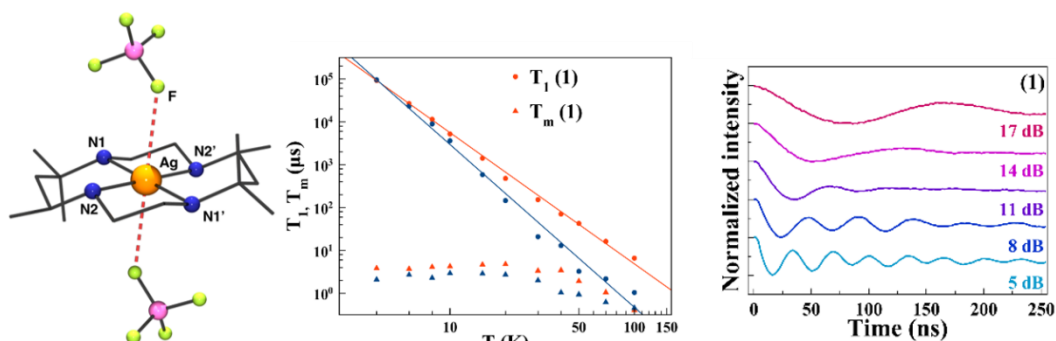


Figure 1. Left, molecular structure of an Ag^I compound with $S=\frac{1}{2}$ as an example of molecular spin qubit. Middle, temperature dependence of spin-phonon and spin-spin relaxation for the compound. Right, Rabi oscillations recorded at 20 K for different microwave attenuations demonstrating its qubit behaviour.

References

- [1] A. J. Heindrich, W. D. Oliver, L. M. K. Vandersypen, A. Ardavan, R. Sessoli, D. Loss, A. B. Jayich, J. Fernandez-Rossier, A. Laucht, A. Morello. *Nat. Nanotechnol.*, **2021**, *16*, 1318–1329. [2] D. P. DiVincenzo. *Fortschr. Phys.* **2000**, *48*, 771–783. [3] A. Gaita-Ariño, F. Luis, S. Hill, E. Coronado. *Nat. Chem.* **2019**, *11*, 301–309. [4] J. Mayans, A. Escuer. *Chem. Commun.*, **2021**, *57*, 721–724. [5] J. Serra, E. Salvadori, Y.-K. Liao, A. Gallén, A. Escuer, M. Chiesa, J. Mayans. *Inorg. Chem.*, **2025**, *64*, 14091–14100.

Mxeno $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ como material multifuncional para baterías Metal(Li/Na)-Azufre

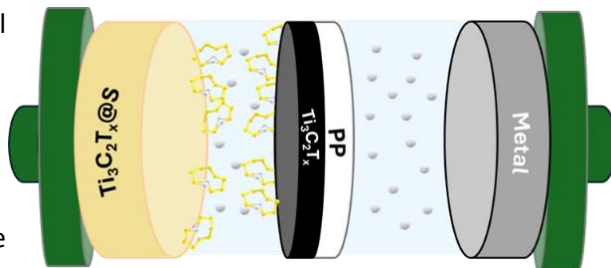
Álvaro Bonilla¹, Antonio Gentile², Chiara Ferrara², Juan Luis Gómez-Cámer¹, Riccardo Ruffo²,
 Álvaro Caballero¹

¹ Dpto de Química Inorgánica, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, 14014, Córdoba, España. Email: q62botoa@uco.es

² Dipartimento di Scienza dei Materiali, Università degli Studi di Milano Bicocca, via Cozzi 55, 20125 Milano, Italy

Las baterías de metal-azufre destacan debido a la alta capacidad teórica del azufre. Sin embargo, sufren una rápida degradación causada por el efecto lanzadera (*shuttle effect*), el cual implica la disolución y migración de polisulfuros hacia el ánodo. Este proceso conduce a la pérdida de material activo y a una vida útil de ciclaje reducida [1]. Aunque se han investigado cátodos modificados y separadores basados en carbones, su efectividad sigue siendo limitada [2]. Los MXenos, materiales bidimensionales altamente conductores y con superficies polares, ofrecen una solución prometedora al anclar los polisulfuros y mitigar este efecto, mejorando así el rendimiento y la estabilidad de la batería [3].

Este estudio explora el doble uso del MXeno como matriz de azufre en el cátodo y como separador funcionalizado en baterías metal-azufre. El análisis electroquímico revela una interacción sinérgica que mejora el transporte de iones, acelera la cinética de reacción y



reduce la polarización. Como resultado, la batería exhibe un rendimiento mejorado y una estabilidad notable, superando los 1000 ciclos a 0.5C. A velocidades altas, como 5C, mantiene una capacidad cercana a 600 mAh g⁻¹ con una retención del 85%. Además, con una alta carga de azufre (9 mg cm⁻²), ofrece una capacidad areal inicial superior a 8 mAh cm⁻², lo que demuestra un gran potencial para aplicaciones de alta densidad de energía y larga vida útil. La versatilidad y multifuncionalidad del material MXeno $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ le confiere las características requeridas para su uso eficiente en baterías Sodio-Azufre a temperatura ambiente.

Agradecimientos

Esta investigación fue financiada por el Ministerio de Ciencia e Innovación de España (MCIN/AEI/10.13039/501100011033) bajo el proyecto PID2023-952147080OB-I00 y por la Junta de Andalucía (FQM-175). Álvaro Bonilla agradece al MICIN por la concesión del contrato predoctoral FPU20/02673.

Referencias

- [1] Á. Bonilla, U. Jiménez-Blasco, J. L. Gómez-Cámer, E. Garaio, J. I. Pérez-Landazábal, Á. Caballero, *J. Power Sources*, **2025**, 628, 235856.
- [2] Y. Huang, L. Lin, C. Zhang, L. Liu, Y. Li, Z. Qiao, J. Lin, Q. Wei, L. Wang, Q. Xie, D. Peng, *Adv. Sci.*, **2022**, 9, 2106004.
- [3] Y. Wang, T. Guo, E. Alhajji, Z. Tian, Z. Shi, Y. Zhang, H. N. Alshareef, *Adv. Energy Mater.*, **2023**, 13, 2202860.

Colossal Breathing-Caloric Performance of MOF-508b for Sustainable Solid-State Refrigeration

M. Gelpi¹, J. García-Ben¹, S. Rodríguez-Hermida², J. López-Beceiro³, R. Artiaga³, Á. Baaliña⁴,
M. Romero-Gómez⁴, J. Romero-Gómez⁴, S. Zaragoza⁵, J. Salgado-Beceiro⁶, J. Walker⁷,
C. J. McMonagle⁸, S. Castro-García¹, M. Sánchez-Andújar¹, M. A. Señarís-Rodríguez¹,
J. M. Bermúdez-García¹

¹ QuiMolMat Group Department of Chemistry Faculty of Science and CICA, UDC, A Coruña 15071, Spain. m.gelpi@udc.es

² Research Support Services, University of A Coruña, A Coruña, 15071 Spain

³ CITENI-Proterm Group, Ferrol Industrial Campus, Campus de Esteiro, University of A Coruña, Ferrol, 15403 Spain

⁴ INGEN Group, Department of Nautical Sciences and Marine Engineering (ETSNM), UDC, A Coruña, 15011 Spain

⁵ CITENI, Ferrol Industrial Campus, University of A Coruña, Ferrol, A Coruña, 15403 Spain

⁶ SINTEF Energy Research, Trondheim, 7034 Norway

⁷ Department of Materials Science and Engineering, NTNU, Trondheim, 7491 Norway

⁸ Swiss-Norwegian Beamlines, European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, 38043 France

The search for environmentally friendly heating and cooling technologies has stimulated growing interest in caloric materials that undergo pressure-driven phase transformations.[1] Flexible metal-organic frameworks (MOFs) are promising candidates for sustainable heating and cooling applications because their reversible breathing transitions between narrow-pore and large-pore phases enable large pressure-driven thermal responses, named as breathing-caloric effects.[2] In this work, we investigate the breathing-caloric performance of MOF-508b ($[\text{Zn}_2(\text{bdc})_2(\text{bpy})]$, where bdc = 1,4-benzenedicarboxylate and bpy = 4,4'-bipyridine) using variable-pressure differential scanning calorimetry (VP-DSC) under CO_2 pressures up to 30 bar. The measurements reveal exceptionally large entropy changes that surpass those reported for several commercial refrigerant fluids. To demonstrate the practical potential of this material, we developed a proof-of-concept thermometric device operating that exhibits reversible adiabatic temperature changes of $\sim 30^\circ\text{C}$, reaching $+56^\circ\text{C}$ and -10°C with applied pressures of only 26 bar. These results highlight the strong promise of breathing MOFs as next-generation solid-state refrigerants for sustainable heating and cooling technologies.[3]

References

[1] P. Lloveras, *Barocaloric Effects in the Solid State – Materials and Methods*, IOP Publishing, Bristol, **2023**.

[2] J. García-Ben, *et al.*, *Chem. Mater.*, **2022**, 34, 3323.

[3] M. Gelpi, *et al.*, *Adv. Mater.*, **2024**, 36, (16), 2310499.

Acknowledgments

Grant PID2021-122532OB-I00 funded by MICIU/AEI/10.13039/501100011033 and by “ERDF/EU”. ED431C 2022/39, ED431F 2023/33, ED481A-2023 and ED481B-2024 funded by Xunta de Galicia. Grant RYC2021-033040-I, funded by MICIU/AEI/10.13039/501100011033 and from NextGenerationEU/PRTR. UDC-Inditex InTalent Programme. ESRF beam time (MA-5145 and A01-2-1291 on BM01).

Supported Metal Oxide Photocatalysts for Environmentally Relevant Photoredox Processes

M. Luisa Marin¹, A. Blazquez-Moraleja¹, A. Diego-Lopez¹, L. Tamarit¹, F. Bosca¹, A. Lanterna²

¹ Instituto de Tecnología Química (ITQ), Consejo Superior de Investigaciones Científicas-Universitat Politècnica de València, Valencia, 46022, Spain; marmarin@itq.upv.es

² School of Chemistry, University of Nottingham, University Park, Nottingham NG7 2RD, U.K.

Microplastic (MP) pollution in aquatic systems, clean energy demand, and CO₂ emissions are major global challenges that require robust, sustainable technologies. Photocatalysis offers a versatile strategy for water decontamination, pollutant and microplastic mineralization, renewable hydrogen production, and CO₂ valorization. This work presents reusable and scalable TiO₂-based photocatalysts immobilized on solid supports. TiO₂ was selected because of its low cost, stability, and suitable photocatalytic properties, although its performance is often limited by charge-carrier recombination and nanoparticle agglomeration. To overcome these limitations, SiO₂@TiO₂ core-shell spheres were prepared using Stöber silica as a support. Initially, we synthesized a variety of SiO₂@TiO₂ photocatalysts with different TiO₂ shell thicknesses, maintaining comparable crystalline phases and crystallite sizes. Their photophysical and photocatalytic behavior strongly depended on shell thickness, with those having an approximately 30 nm TiO₂ shell exhibiting optimal efficiency for wastewater decontamination [1]. These spheres were supported on commercial millimetric-sized sand coated with TiO₂, resulting in a new photocatalyst that adds photocatalytic properties to the sand's filtration/retention capability, enabling the mineralization of real MPs in continuous flow, without catalyst leaching, demonstrating potential for industrial wastewater treatment. Moreover, spheres with an approximately 28 nm TiO₂ shell exhibited the highest activity for the photogeneration of H₂ using glycerol as a sacrificial electron donor, with evolution rates up to 7 times higher than those of commercial P25 when normalized to the photoactive component. Further decoration with Pd nanoparticles (PdNPs) even increased hydrogen production, yielding rates 54 times higher than those of ST28 and 371 times higher than those of P25 under identical conditions [2]. Finally, in gas-phase CO₂ photoreduction using water as the electron donor and without sacrificial reagents, the SiO₂@TiO₂ ST28 produced more CO than P25. PdNPs also shifted CO₂-reduction selectivity from CO towards CH₄, probably because their strong affinity for CO promotes further hydrogenation. Overall, the supported photocatalysts have demonstrated their reusability, highlighting the potential of photocatalysis for water treatment, clean energy production, CO₂ valorization, and the circular economy.

Acknowledgements. The authors would like to acknowledge the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities (PID2023-151872OB-I00). This research was supported by GVA through the CLEAN-LAGOON project (PROMETEO/CIPROM-2024-49). A.B.M. acknowledges financial support through the postdoctoral contract CIAPOS/2023/201, co-funded by the GVA and the EU. A.B.M., L.T., and A.D.-L. are grateful to the UPV (PAID-06-24, PAID-10-24, and PAID-01-22, respectively).

Referencias

[1] O. Cabezuelo, *et al*, *J. Photochem. Photobiol. A Chem.* **2023**, 444, 114917.

[2] A. Diego-Lopez, *et al*, *Chem. Eng. J.* **2026**, 532, 174350.

Impresión 3D (low-cost) aplicada a tecnología SOFC y baterías de ion Li

J.I. García-Jiménez, I. M. Peláez-Tirado, J.F. Valera-Jiménez, J.R. Marín-Rueda, M. Castro-García, J.C. Pérez-Flores, H. Gueddari-Aourir, J. Canales-Vázquez

¹Inst. Energías Renovables, Calle Investigación 1, Universidad de Castilla-La Mancha, 02071 Albacete, jesus.canales@uclm.es

En este trabajo presentamos el uso de tecnologías de impresión 3D basadas en extrusión de cara al desarrollo de componentes y celdas SOFC, y también en la fabricación de electrodos para baterías de ion Li. Por un lado, hemos sido capaces de producir filamentos con alta carga cerámica (60-80% en masa) de alta calidad que pueden ser empleados en impresoras 3D de sobremesa para generar cuerpos verdes que, tras tratamientos térmicos optimizados permiten generar los componentes cerámicos con la forma deseada. El procedimiento es muy versátil y también permite la adición de formadores de poro o aditivos para mejorar la conductividad electrónica de la cerámica final.

En tecnología SOFC, empleando diversas estrategias de impresión e incluso hibridando tecnologías, se han conseguido producir celdas SOFC funcionales Ni-YSZ||8YSZ||LSM-YSZ con densidades de potencia de más 200 mW·cm⁻² a 900°C, exhibiendo sus componentes por separados propiedades eléctricas competitivas con las de los mismos materiales procesados por vías convencionales [1].

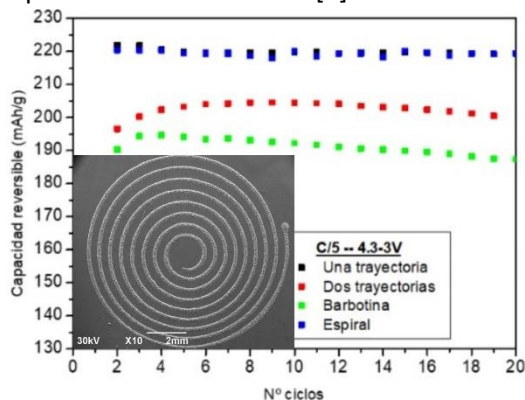


Figura 1.-Capacidad específica e imagen SEM de electrodo NMC622 con geometría espiral

Por otro lado, estas estrategias de fabricación también han sido trasladadas a la producción de electrodos para baterías de Li. A pesar de existir materiales ánodos (LTO, 168 mAh g⁻¹ a C/2, 100+ ciclos) y catódicos (LFP, 152 mAhg⁻¹ a C/2, 100+ ciclos) [2,3] que permiten la generación de electrodos impresos con prestaciones muy similares a las del estado del arte, existen materiales como la familia NMC para aplicaciones de alto voltaje que no parecen compatibles con la

impresión por filamentos. En esos casos, una alternativa es el robocasting, con el que se pueden fabricar

electrodos de muy alta calidad con la geometría deseada. Así, en electrodos con geometría espiral se han obtenido capacidades para NMC622 de 220 mAhg⁻¹ a C/5, superando los valores obtenidos en electrodos procesados mediante barbotinas.

Agradecimientos: Los autores agradecen financiación de los siguientes proyectos: SBPLY/19/180501/000240 (JCCM-FEDER), SBPLY/23/180225/000202 (JCCM-FEDER), TED2021-129663B-C54, PLEC2022-009412 y 2025-GRIN-38585 (UCLM/JCCM-FEDER).

Referencias

- [1] I.M. Peláez-Tirado *et al*, *J. Eur. Ceram. Soc.*, **2024**, 44, 5031-5040; I.M. Peláez-Tirado, Tesis Doctoral, Universidad de Castilla-La Mancha, 2025.
- [2] J.F. Valera-Jiménez *et al*, *Appl. Mater. Today*, **2021**, 25, 101243
- [3] J.M. Ramos-Fajardo *et al*, *J. Phys Energy*, **2023**, 5, 035010

Organometallic Compounds to Modulate Intracellular Chemistry

F. Martínez-Peña, A. C. Carrasco, S. Infante-Tadeo, A. Villechenous Rojo, V. Rodríguez-Fanjul, A.M. Pizarro

IMDEA Nanociencia, Faraday, 9, Madrid, Spain, ana.pizarro@imdea.org

Organometallic and coordination bonds have accessible energy dynamics that make them attractive tools to react with cellular components. Metal-mediated chemistry of organometallics can be activated or inhibited by the right choice of metal and its surrounding ligands. It is the fine balance between reactivity and inertness that gives metal complexes extraordinary potential in the crowded intracellular environment.

I will introduce half-sandwich compounds featuring iridium, rhodium, osmium, and ruthenium. Structurally, these compounds include a tether ring that can open and close, a switch-like intramolecular mechanism that provides controlled access to the metal's chemistry inside human cells.

Some of the complexes I will present rank among the most potent metal-based compounds to date against cancer cells. I will show our efforts to understand the molecular basis that drive intracellular reactivity of some of our complexes. I will also show an example of how we attempt to map the distribution of our metal-complexes inside cells, as we try to fully illustrate their intracellular fate. Finally, I will give an example on how we try to harness organometallic chemistry in the intracellular space.

Relevant publications

- [1] A. C. Carrasco, V. Rodríguez-Fanjul, A. Habtemariam, A. M. Pizarro. *J. Med. Chem.* **2020**, *63*, 4005-4021.
- [2] J. J. Conesa, A. C. Carrasco, V. Rodríguez-Fanjul, Y. Yang, J. L. Carrascosa, P. Cloetens, E. Pereiro, A. M. Pizarro. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 1270-1278.
- [3] S. Infante-Tadeo, V. Rodríguez-Fanjul, A. Habtemariam, A. M. Pizarro. *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 9287-9297.
- [4] S. Infante-Tadeo, V. Rodríguez-Fanjul, C. C. Vequi-Suplicy, A. M. Pizarro. *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 18970-18978.
- [5] A. Villechenous Rojo, V. Rodríguez-Fanjul, A. M. Pizarro. *submitted*

COMUNICACIONES ORALES

Síntesis sin disolventes de propargilaminas utilizando como catalizadores heterogéneos Pd-LDHs preparados a partir de escoria salina de aluminio

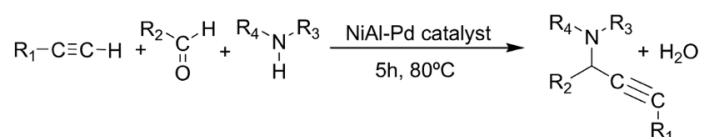
A. Jiménez¹, P. Rodríguez-Miguel¹, A. Misol¹, R. Trujillano¹, R.E. Thampikannu², K. Vellayan², M.A. Vicente¹

¹ GIR–QUESCAT, Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Salamanca, 37008 Salamanca, E-mail: alejm@usal.es

² Department of Chemistry, Government College Kattappana, Kattappana P.O., Kerala 685508, India

Las propargilaminas son compuestos de alto valor en la síntesis orgánica y la farmacología, sirviendo como precursores clave para alcaloides y diversas moléculas bioactivas [1]. Actualmente, su producción mediante el acoplamiento A3 (aldehído, amina y alquino) tipo *one-pot* y libre de disolventes se prefiere debido a su alta economía atómica y sostenibilidad [2]. En este sentido, los hidróxidos dobles laminares (LDHs) basados en el Al³⁺ son excelentes catalizadores heterogéneos debido a su estructura laminar. El rendimiento de estos materiales puede optimizarse variando la composición química e impregnándolos con fases activas. Un aspecto innovador de este enfoque es la recuperación de Al³⁺ a partir de residuos industriales derivados de la producción secundaria de aluminio, la escoria salina, lo que permite la síntesis de catalizadores de bajo coste que promueven procesos de química circular [3].

En este trabajo se evalúan diversos LDH cuyo catión trivalente es Al³⁺, sintetizados por coprecipitación a partir de escoria de aluminio e impregnados con Pd²⁺, como catalizadores heterogéneos para la síntesis de propargilaminas (Esquema 1) [3]. Los materiales se caracterizaron utilizando técnicas como difracción de rayos X en polvo (PXRD), espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FT-IR) y fisisorción de N₂. El catalizador NiAl-Pd mostró la mayor eficiencia en el acoplamiento de benzaldehído, morfolina y fenilacetileno, alcanzando rendimientos óptimos bajo condiciones de 80 °C durante 6 h con una dosis de 30 mg de catalizador. La naturaleza del catión divalente influyó directamente en la actividad de los sitios activos de paladio. La muestra presentó una buena estabilidad cíclica, manteniendo una actividad superior al 80 % después de cuatro ciclos de reutilización.



Esquema 1. Reacción general para la síntesis de propargilaminas

Agradecimiento: Agencia Estatal de Investigación - PID2023-146935OB-C22.

Referencias

- [1] R. Manujyathi, T. Aneja, G. Anilkumar, *RSC Adv.* **2021**, *11*, 19433–19449.
- [2] M.J. Ndolomingo, N. Bingwa, R. Meijboom, *J. Mater. Sci.* **2020**, *55*, 6195–6241.
- [3] R.E. Erattammottil, A. Jiménez, M.A. Vicente, V. Rives, K. Vellayan, *Mol. Catal.* **2024**, *569*, 114594.

Rediseñando el *Band Gap* en MOFs de Ti para potenciar la producción fotocatalítica de hidrógeno vía Ingeniería de Defectos

M. Vos-Gracia¹, J. Ferrando-Ferrero¹, M. González-Fernández², V. Fernandes de Almeida²,
H. G. Baldoví², H. García³, S. Navalón², S. Carrasco¹, P. Horcajada¹

¹ Adv. Porous Materials Unit, IMDEA Energy. Avda. Ramón de la Sagra 3, 28935, Móstoles, España. javier.ferrando@energia.imdea.org

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

³ Instituto de Tecnología Química (CSIC-UPV), Universitat Politècnica de València, Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Av. dels Tarongers s/n, 46022 Valencia, España

Las redes metal-orgánicas (MOFs) se han consolidado como plataformas porosas de vanguardia para la fotocatálisis solar, especialmente en la división global del agua (OWS) y la conversión de CO₂, gracias a su elevada área superficial y versatilidad estructural [1]. Los MOFs de Ti resultan particularmente atractivos debido a la fotoactividad intrínseca y la reversibilidad redox del centro metálico [2]. En este contexto, nuestro grupo describió en 2021 el IEF-11(Ti) (IMDEA Energy Framework), un escuarato de Ti(IV) con una estabilidad hidrolítica excepcional y una gran actividad fotocatalítica en OWS sin necesidad de añadir co-catalizadores de metales nobles [3]. Recientemente, demostramos que la combinación de ingeniería de defectos inducida por microondas y el dopaje con vanadio del IEF-11(Ti) permite modular sus propiedades optoelectrónicas y cuadruplicar su porosidad, optimizando así la producción de hidrógeno [4].

Aprovechando la versatilidad de este sistema, en este trabajo presentamos una estrategia de ingeniería de defectos basada en el dopaje con escuaramida mediante síntesis solvotermal. Esta modificación preserva la integridad de la red cristalina original, al tiempo que induce un aumento significativo del área superficial y la formación de mesoporosidad. La sustitución parcial de átomos de oxígeno por heteroátomos de nitrógeno dentro de la estructura introduce nuevos estados electrónicos intermedios en la banda prohibida, logrando un estrechamiento del *band gap* que desplaza la absorción de luz hacia el espectro visible de manera muy efectiva. Como resultado, el material optimizado (7% de ligando escuaramida incorporado) alcanza una actividad récord en la producción de H₂ mediante OWS de 372 $\mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$, superando significativamente al material original (298 $\mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$) y posicionando a estos MOFs dopados con nitrógeno como candidatos robustos y escalables para la generación sostenible de hidrógeno verde.

Referencias

- [1] 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
- [2] G.-Y. Han, M. Sun, R. Zhao, Q. M. Junaid, G. Hou, N. Z. K. Mohmand, C. Jia, Y. Liu, P. Van Der Voort, L. Shi, X. Feng, *Chem. Soc. Rev.*, **2025**, 54, 5081–5107
- [3] P. Salcedo-Abraira, A. A. Babaryk, E. Montero-Lanzuela, O. R. Contreras-Almengor, M. Cabrero-Antonino, E. Svensson Grape, T. Willhammar, S. Navalón, E. Elkäim, H. García, P. Horcajada, *Adv. Mater.*, **2021**, 33, 2106627
- [4] J. Ferrando-Ferrero, M. Vos-Gracia, M. González-Fernández, V. Fernandes de Almeida, H. G. Baldoví, G. Santoriello, M. Voccia, M. Farnesi Camellone, L. Caporaso, H. García, S. Navalón, P. Horcajada, S. Carrasco, *J. Am. Chem. Soc.*, **2026**, 148, 10437–10451

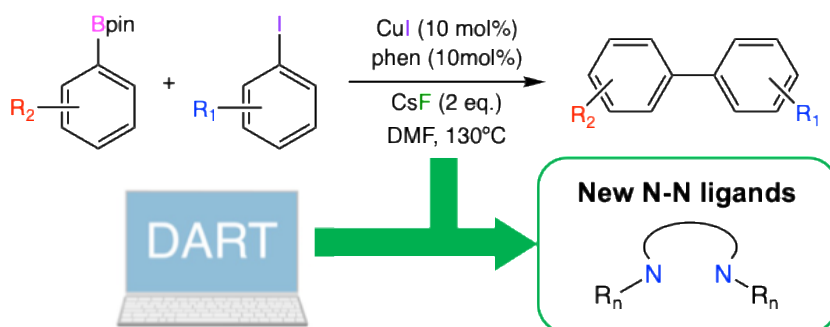
DFT/DART-driven Optimization of Copper-mediated Suzuki-Miyaura Couplings

Francisco A. Gómez-Mudarra¹, Max García-Melchor², Jesús Jover¹

¹ Departament de Química Inorgànica i Orgànica, and Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTC-UB), Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Spain. e-mail: jjovermo@ub.edu

² Center for Cooperative Research on Alternative Energy (CIC EnergiGUNE), Basque Research and Technology Alliance (BRTA), Alava Technology Park, Albert Einstein 48, 01510, Vitoria-Gasteiz, Spain and IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, Plaza de Euskadi 5, 48009. Bilbao, Spain.

Computational Density Functional methods have been used to study the reaction mechanism of the copper-catalyzed Suzuki-Miyaura coupling between aryl iodides and phenylboronic acid pinacol esters.[1,2] Theoretical analyses show that the nature of the ancillary ligand is essential to determining the overall reaction barrier. Based on these findings, the DART (Directed Assembly of Random Transition Metal Complexes)[3] platform has been used to generate alternative catalysts for the studied copper-catalyzed Suzuki-Miyaura coupling reaction. This process involves generating and evaluating more than 500 potential catalysts featuring different bidentate N-N ligands, which DART extracted from real metal complexes within the Cambridge Structural Database. These potential catalysts have been constructed and computed using DFT to create a large database containing their relevant features e.g. constitutional, topological, electronical, etc. Machine learning and design of experiments techniques have been used to identify representative catalyst candidates, which have been further analyzed to infer the activation barriers for the entire database. This process has identified new, promising candidates that typically bear ligands from the bis(imino)acenaphthene (BIAN) family. Some of these species have been tested experimentally and exhibit enhanced catalytic behavior for the studied coupling reaction.



Referencias

- [1] Y. P. Budiman, A. Friedrich, U. Radius, T. B. Marder, *ChemCatChem*, **2019**, *11*, 5387-5396.
- [2] F. A. Gómez-Mudarra, G. Aullón, J. Jover, *Catal. Sci. Technol.*, **2023**, *13*, 1381-1394.
- [3] C. Clarke, T. Sommer, F. Kleuker, M. García-Melchor, *ChemRxiv*, **2024**, doi:10.26434/chemrxiv-2024-tlj9.

The Penetration Index and its applications in Inorganic Chemistry

J. Echeverría¹, S. Alvarez²

¹ Departamento de Química Inorgánica e Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea, Universidad de Zaragoza-CSIC, Pedro Cerbuna 12, 50009 Zaragoza (Spain). jorge.echeverria@unizar.es

² Departament de Química Inorgànica i Orgànica, e Institut de Química Teòrica i Computacional, Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028 Barcelona (Spain).

We present here a newly defined geometrical parameter that permits the comparison of bonding between pairs of atoms in structural and computational studies independently of the atom sizes.[1] This parameter, named Penetration Index, is based on the covalent and van der Waals radii of the involved atoms and the distance between them (Fig. 1). We will show the existence of good correlations of penetration indices with bonding and energetic parameters such as bond angles, interaction energies, contributions to the interaction energy obtained from EDA analysis, formal bond orders or calculated Wiberg bond indices, or the electronegativity difference between the interacting atoms.[2] The Penetration Index is particularly useful in the study of multicenter or collective interactions, large biological systems or reaction mechanisms involving transition metal complexes.

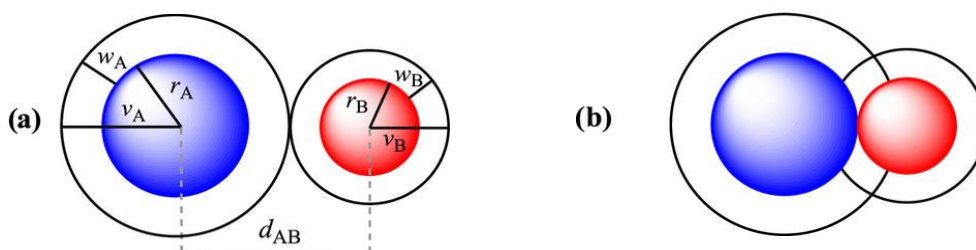


Fig. 1. (a) Definition of the van der Waals crusts of widths w_A and w_B for atoms A and B from the covalent and van der Waals radii (r and v , respectively), and visual description of the case of two contacting van der Waals spheres with no interpenetration ($p_{AB} = 0\%$). (b) Schematic description of the case in which the two atoms are at a distance equal to the sum of the covalent radii ($d_{AB} = r_A + r_B$) that corresponds to a penetration index $d_{AB} = 100\%$.

Referencias

- [1] Echeverría, J., Alvarez, S., *Chem. Sci.* **2023**, *14*, 11647-11688.
[2] Pardos, J., Gonzalo, J., Merino, P., Echeverría J., *Dalton Trans.* **2026**, *55*, 3967-3974.

Electronic-Structure-Guided Design of Spin-Crossover Compounds with Targeted $T_{1/2}$

A. Garcia-Duran¹, L. Navarro¹, D. Vidal¹, J. Cirera¹

¹ Departament de Química Inorgànica i Orgànica and Institut de Recerca de Química Teòrica i Computacional (IQTC-UB). Universitat de Barcelona, Spain, email: jcirera@ub.edu

Spin-crossover (SCO) materials are coordination compounds-based materials in which small changes in ligand-field strength induce a reversible switch between the low-spin and high-spin electronic states. Because the spin-state energetics are linked to the electronic structure of the metal site, SCO complexes provide with an excellent platform for establishing quantitative relationships between ligand chemistry, d-orbital splitting, and macroscopic physical properties. For thermally induced SCO systems, the transition temperature ($T_{1/2}$), defined as the temperature with equal populations of both spin-states, turns in a key descriptor of their electronic structure. However, the rational design of SCO materials with specific $T_{1/2}$ remains challenging, particularly across chemically diverse families of compounds.

In this work, we shown how electronic-structure calculations can quantitatively reproduce experimental $T_{1/2}$ values for several families of SCO complexes.[1,2] Analysis of the computed d-based molecular orbitals shows that the transition temperature is primarily governed by the ligand-field splitting pattern generated by the coordination environment. Electronic ligand effects, including inductive and resonance contributions, can modulate the σ -donor and π -acceptor character of the ligands and, therefore, the relative stabilization of the metal-centered orbitals. Moreover, steric effects influence metal–ligand bond distances and distortions, further tuning the ligand-field magnitude. The interplay between these factors rationalizes experimentally observed trends in systems ranging from classical Fe-based SCO compounds to less common examples such as $[\text{Cr}^{\text{II}}(\text{Tpm})_2][\text{BF}_4]$ (Tpm = tris(pyrazolyl)methane) or $[\text{Mn}^{\text{III}}(\text{OL}_1)_2]\text{Cl}$ (OL_1 = (2-pyridyl)(2-pyridylamino)methanolate).[3,4]

The reliability of the computed electronic-structure descriptors further enables the accelerated *in silico* discovery of new SCO systems. Machine-learning models trained on electronic-structure data can automatically classify Fe^{III} complexes as high-spin, low-spin, or SCO systems,[5] while GPU-accelerated methodologies significantly reduce computational cost and enable high-throughput screening within entire families based on parent molecules such as the $[\text{Fe}(\text{phen})_2(\text{NCS})_2]$ one.[6] Overall, this work establishes quantitative relationships between ligand design, d-orbital diagrams, and spin-transition thermodynamics, providing chemically guidelines for the rational design of spin-crossover materials with targeted $T_{1/2}$ values.

References:

- [1] Cirera, J.; Via-Nadal, M.; Ruiz, E. *Inorg.Chem.* 2018, 57, 14097.
- [2] Cirera, J.; Ruiz, E. *J. Phys. Chem. A*, 2020, 124, 5053.
- [3] Navarro, L.; Rodriguez, F.; Cirera, J. *Dalton Trans.* 2021, 50, 8704.
- [4] Garcia-Duran, A.; Cirera, J. *Inorg. Chem.* 2026, under review
- [5] Vidal, D.; Cirera, J.; Ribas-Arino, J. *PCCP*. 2023, 25, 12490.
- [6] Garcia-Duran, A.; Cirera, J.; J. *Comput. Chem.* 2026, under review

Integración de Complejos LnW_{10} en Materiales 2D: Nuevas Plataformas para Tecnologías Cuánticas y Fotónicas

J. Bustamante-Fernández¹, N. Sorazu¹, D. Cabrosi², A. Palacios-Lozano¹, E. Ruiz-Bilbao¹, J.M. Gutiérrez-Zorrilla^{1,2}, B. Artetxe¹, I. Oyarzabal^{2,3}

¹ Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco UPV/EHU, 48080 Bilbao, Spain. janire.bustamante@ehu.eus

² BCMaterials, Basque Center for Materials, Applications and Nanostructures, 48940 Leioa, Spain.

³ IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, 48009, Bilbao, Spain.

Los complejos $[\text{Ln}^{\text{III}}\text{W}_{10}\text{O}_{36}]^{9-}$ (LnW_{10}) constituyen plataformas moleculares versátiles en las que la configuración electrónica 4f apantallada de los iones lantánido, combinada con el esqueleto de wolframato, da lugar a una interacción única entre la anisotropía magnética y una emisión luminiscente bien definida.[1,2] Además, estos sistemas presentan un gran potencial como qubits moleculares debido a sus tiempos de coherencia de espín relativamente largos, lo que los convierte en candidatos prometedores para aplicaciones en tecnologías cuánticas.[3]

Una estrategia para mejorar su aplicabilidad reside en su integración en arquitecturas bidimensionales (2D) que preservan y potencian sus propiedades intrínsecas. La inmovilización de los complejos LnW_{10} en materiales laminares permite mantener los centros de lantánido en posiciones fijas y lo más alejados posible entre sí, evitando así el acoplamiento magnético entre los átomos de lantánido. Estos sistemas híbridos 2D pueden facilitar la integración en dispositivos, ya que, a diferencia de los materiales *bulk*, las redes 2D proporcionan una elevada relación superficie-volumen y sitios activos expuestos, esenciales para una deposición superficial eficiente y una exfoliación controlada. Esta dimensionalidad permite la fabricación precisa de sistemas de pocas capas sobre diversos sustratos, asegurando que las propiedades moleculares sean directamente accesibles en la superficie. Aquí se presentan los sistemas 2D $\text{Na}_3[\text{Zn}(\text{cyclam})(\text{H}_2\text{O})_2][\text{Ln}^{\text{III}}\text{W}_{10}\text{O}_{36}\{\text{Zn}(\text{cyclam})\}_2] \cdot 18\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Ln} = \text{La} - \text{Ho}$), y se exponen sus propiedades magnéticas y luminiscentes, además de discutirse su comportamiento qubit.

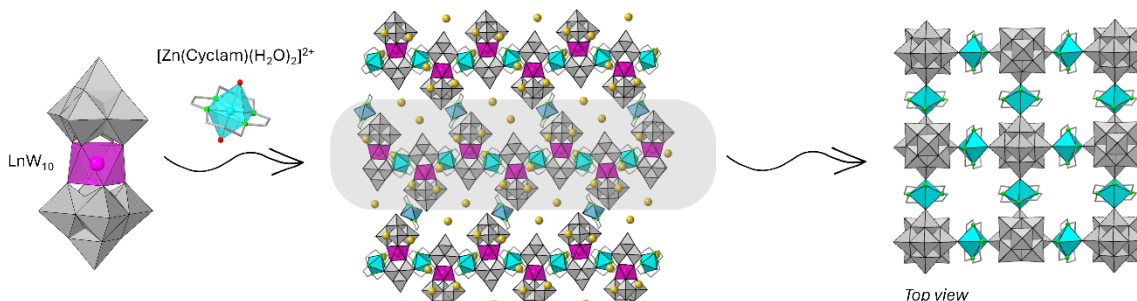


Figura 1.- Estructura laminar de $\text{Na}_3[\text{Zn}(\text{cyclam})(\text{H}_2\text{O})_2][\text{Ln}^{\text{III}}\text{W}_{10}\text{O}_{36}\{\text{Zn}(\text{cyclam})\}_2] \cdot 18\text{H}_2\text{O}$.

Referencias

- [1] AlDamen, M. A.; Clemente-Juan, J. M.; Coronado, E.; Martí-Gastaldo, C.; Gaita-Ariño, A. *Inorg. Chem.* **2009**, *48* (8), 3467-3479.
- [2] Sugeta, M.; Tamai, C.; Konaka, S.; Hirota, K. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1993**, *66* (2), 444-449.
- [3] Shiddiq, M.; Komijani, D.; Duan, Y.; Gaita-Ariño, A.; Coronado, E.; Hill, S. *Nature* **2016**, *531*, 348-351.

Johnson gyrobifastigium geometry: an unusual platform for high-performance dysprosium single-ion magnets

P. Oreiro-Martínez¹, J. Corredoira-Vázquez^{1,2}, Ana M. García-Deibe¹, M. Fondo¹

¹ Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Spain, e-mail: matilde.fondo@usc.es

² Institute of Materials (iMATUS), Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Spain

Single-molecule magnets (SMMs) based on oblate Dy^{3+} ions are among the most promising candidates for applications in high-density information storage and quantum computing [1]. Current strategies to achieve high-performance air-stable SMMs mainly focus on highly axial coordination environments, and particularly hexagonal bipyramidal (hbp) Dy^{3+} complexes hold the current record of blocking temperature T_B^H (40 K) [2] and effective energy barrier (U_{eff}) for magnetization reversal (2427 K) [3].

Alternative eight-coordinate geometries capable of inducing strong magnetic axiality in non-hbp environments, such as triangular dodecahedron, square antiprism, and biaugmented trigonal prism, have also delivered remarkably high energy barriers, reaching values of up to 944 K [4]. Although these barriers are still significantly lower than those found in the best-performing air-stable SMMs, they demonstrate the potential of unconventional coordination geometries as emerging platforms for developing high-performance molecular nanomagnets.

With this perspective in mind, we herein report the first eight-coordinate Dy^{3+} SMM featuring a Johnson gyrobifastigium geometry, $[\text{DyL}^{\text{N6prop}}(\text{OSiPh}_3)_2](\text{BPh}_4)$ (**1**), shown in Figure 1, which displays an U_{eff} exceeding 1200 K.

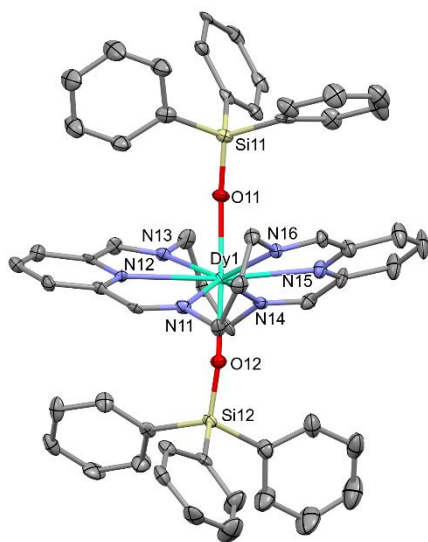


Figura 1.- Ellipsoids diagram for the cation $[\text{DyL}^{\text{N6prop}}(\text{OSiPh}_3)_2]^+$ in **1**. The BPh_4^- anion and hydrogen atoms are omitted for clarity.

References

- [1] R. Sessoli, *Nature*, **2017**, 543, 189-190.
- [2] J. Corredoira-Vázquez, C. González-Barreira, M. Fondo, A. M. García-Deibe, J. Sanmartín-Matalobos, S. Gómez-Coca, E. Ruiz, C. D. S. Brites, L. D. Carlos, *Inorg. Chem. Front.*, **2025**, 12, 5506-5516.
- [3] W.-J. Xu, Q.-C. Luo, Z.-H. Li, Y.-Q. Zhai, Y.-Z. Zheng, *Adv. Sci.*, **2024**, 11, 2308548.
- [4] M. Fondo, P. Oreiro-Martínez, J. Corredoira-Vázquez, A. M. García-Deibe, J. Sanmartín-Matalobos, D. Aravena, *Appl. Organomet. Chem.*, **2024**, 38, e7684.

Empleo de polioxometalatos multifuncionales encapsulados en membranas electrohiladas de poliamida para remediación de aguas

A. Palacios-Lozano¹, B. Artetxe¹, L. Ruíz-Rubio², J. Bustamante-Fernández¹, E. Ruiz-Bilbao¹, J.M. Gutiérrez-Zorrilla¹, J.L. Vilas Vilela²

¹Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco UPV/EHU, P.O. Box 644, 48080 Bilbao, España. asier.palacios@ehu.eus

²Departamento de Química Física, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco UPV/EHU, P.O. Box 644, 48080 Bilbao, España

La sociedad actual se enfrenta a una serie de desafíos relacionados con la salud, la sostenibilidad y la protección del medio ambiente, descritos como Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) en la Agenda 2030. En este contexto, los polioxometalatos (POMs) se erigen como candidatos excepcionales para la remediación ambiental y el control de patógenos (ODS 6, 14 y 15), debido a la extraordinaria versatilidad de los mismos. [1] Con el fin de potenciar la aplicación de estos clústeres inorgánicos aniónicos de manera efectiva y facilitar su reciclabilidad, una de las estrategias más prometedoras es su inmovilización en soportes adecuados, como los materiales poliméricos. [2] Entre todas las opciones posibles, el uso de nanofibras electrohiladas resulta ideal debido a su bajo coste y facilidad de procesamiento; además de una gran superficie de contacto que actúa como un vehículo perfecto para maximizar la multifuncionalidad de los clústeres inorgánicos. Alentados por ello, en este trabajo se presenta el empleo de diferentes polioxowolframatos de tipo Keggin, especialmente aquellos sustituidos con cationes de cobalto(II) encapsulados en nanofibras de nylon-66. Las membranas han sido caracterizadas mediante espectroscopia FT-IR, microscopía SEM y análisis EDX, y se ha evaluado su actividad para la fotodegradación de contaminantes como los PAHs, la captura de metales pesados y sus propiedades antibacterianas.

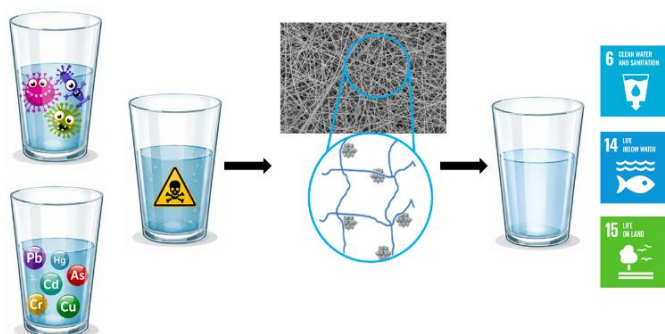


Figura 1. Representación esquemática del proceso de saneamiento de agua contaminada mediante la fibra híbrida POM-polímero.

Referencias

- [1] J-H. Kruse, M. Langer, I. Romanenko, et. al., *Adv. Funct. Mater.*, **2022**, 32, 2208428.
- [2] Z. Liang, Y. Yao, H. Wang, *Nanotechnol. Rev.*, **2024**, 13, 20230199.

Adsorción selectiva en un material microporoso POM/{Cu(cyclam)}²⁺ capaz de experimentar transformaciones monocristal a monocristal

E. Ruiz-Bilbao¹, B. Artetxe¹, S. Reinoso², G. Beobide¹, J. Bustamante-Fernández¹, A. Palacios-Lozano¹, L. San Felices¹, L. Lezama¹, J. M. Gutiérrez-Zorrilla¹, D. Sensharma³, M. J. Zaworotko³, S. Mukherjee³

¹ Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Universidad del País Vasco UPV/EHU, P.O. Box 644, 48080 Bilbao, Spain. estibaliz.ruiz@ehu.eus

² Departamento de Ciencias & Institute for Advanced Materials and Mathematics (InaMat2), Universidad Pública de Navarra (UPNA), Pamplona, Spain.

³ Bernal Institute, Department of Chemical Sciences, University of Limerick, Ireland.

El híbrido $[\{\text{Cu}(\text{cyclam})\}_3(\kappa\text{-Mo}_8\text{O}_{27})]\cdot 14\text{H}_2\text{O}$ (**1**) (cyclam=1,4,8,11-tetraazaciclotetradecano) formado por polioxometalatos (POMs) unidos covalentemente mediante complejos $\{\text{Cu}(\text{cyclam})\}^{2+}$, experimenta transformaciones monocristal-a-monocristal (SCSC) promovidas térmicamente, dando lugar a dos nuevos compuestos anhidros: $[\text{Cu}(\text{cyclam})][\{\text{Cu}(\text{cyclam})\}_2(\lambda\text{-Mo}_8\text{O}_{27})]$ (**2a**) y $[\{\text{Cu}(\text{cyclam})\}_3(\mu\text{-Mo}_8\text{O}_{27})]$ (**3a**) (Figura 1).[1] Estas transiciones implican modificaciones en el empaquetamiento cristalino, así como la isomerización del POM octamolibdato para dar lugar a dos nuevos clústeres sin precedentes. La fase **2a** se hidrata rápidamente formando una nueva fase (**5**). Por el contrario, la hidratación de **3a** implica la condensación de una molécula de agua al isómero, dando lugar al compuesto $[\{\text{Cu}(\text{cyclam})\}_3(\gamma\text{-Mo}_8\text{O}_{26}(\text{OH})_2)]\cdot 11\text{H}_2\text{O}$ (**4**), el cual puede volver a deshidratarse sin modificar significativamente su estructura, para dar la fase **6a**. Además de la dinámica estructural, cabe destacar que las fases anhidras (**2a,3a,6a**) muestran porosidad permanente y la capacidad de adsorber selectivamente distintos gases. Especialmente, destaca la afinidad de **3a** para adsorber preferentemente C_2H_2 frente a C_2H_4 (1:99 ratio) o C_2H_6 frente a C_2H_4 según cálculos teóricos, y la separación eficaz y reversible de C_2H_2 frente a CO_2 ($21\text{ cm}^3/\text{g}$ vs. $2\text{ cm}^3/\text{g}$) en mezclas de gases reales.

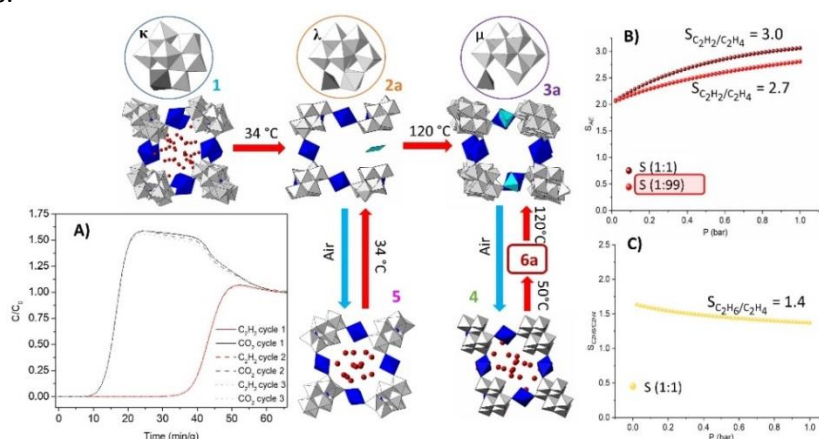


Figura 1. Representación de las transiciones SCSC del compuesto **1** y de la capacidad de adsorción selectiva de **3a** sobre: A) mezcla real de $\text{C}_2\text{H}_2/\text{CO}_2$ y los sistemas B) $\text{C}_2\text{H}_2/\text{C}_2\text{H}_4$ y C) $\text{C}_2\text{H}_6/\text{C}_2\text{H}_4$ calculados teóricamente.

Referencias

[1] E. Ruiz-Bilbao, A. Iturrospe, S. Reinoso, B. Artetxe, G. Beobide, L. San Felices, L. Lezama, J. M. Gutiérrez-Zorrilla, S. Darwish, D. Sensharma, M. J. Zaworotko, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, 62, e202307436.

Síntesis de CAU23 y MIL53 utilizando radiación microondas y una fuente inusual de aluminio. Caracterización y adsorción de CO₂

P. Rodríguez¹, A. Jiménez¹, R. Trujillano¹, H. Joseph², A. Gil², M. A. Vicente¹

¹ GIR-QUESCAT. Dpto. de Química Inorgánica. Universidad de Salamanca, 37008, Salamanca. pablormi@usal.es

² Dpto. de Ciencias, INAMAT², Universidad Pública de Navarra, 31006 Pamplona.

Se ha estudiado la síntesis ecológica de redes extendidas organometálicas (MOF) CAU23 y MIL53 añadiendo a las disoluciones acuosas de ligando otras de aluminio obtenidas de la extracción ácida o básica de escorias salinas [1]. Los sólidos obtenidos se compararon con otros sintetizados con disoluciones de AlCl₃ y NaAlO₂ comerciales. Las mezclas de reacción se sometieron a reflujo (RF) [2] o a radiación microondas (MW) disminuyendo así los tiempos de síntesis y todos los sólidos fueron caracterizados y ensayados en adsorción de CO₂. La Tabla 1. resume los reactivos utilizados y las etapas seguidas para la obtención de las muestras, así como los valores de S_{BET} y el volumen de CO₂ adsorbido.

Tabla 1. Datos de síntesis y propiedades de los sólidos sintetizados

NOMBRE	Tto.	T (°C)	Fuente de Al ³⁺	t (min)	S _{BET} (m ² /g)	V _{CO₂} (mmol/g)
CAU23-CR-RF-3	RF	100	NaAlO ₂ +AlCl ₃	180	1040	0.97
CAU23-CR-MW-90	MW	125	NaAlO ₂ +AlCl ₃	90	1079	1.08
CAU23-SC1:SC2-RF-3	RF	100	Escoria	180	886	0.85
CAU23-SC1:SC2-MW-90	MW	125	Escoria	90	648	0.80
MIL53-CR-MW-5	MW	125	NaAlO ₂ +AlCl ₃	5	135	0.23
MIL53-SC1:SC2-MW-5	MW	125	Escoria	5	55	0.17
MIL53-SC3-MW-5	MW	125	Escoria	5	40	0.20

*SC1, SC2, SC3: Disoluciones de Al(III) extraídas de la escoria en diferentes condiciones.

Los difractogramas de rayos X confirman la obtención de sólidos con la estructura deseada (Figura 1.). Los valores de superficie específica indican que los compuestos de la serie CAU presentan una mayor área superficial, además de los mejores resultados de adsorción (Tabla 1). Los resultados confirman la posibilidad de valorizar residuos industriales como fuente de aluminio; asimismo, se constata que la utilización de la energía MW acelera la síntesis.

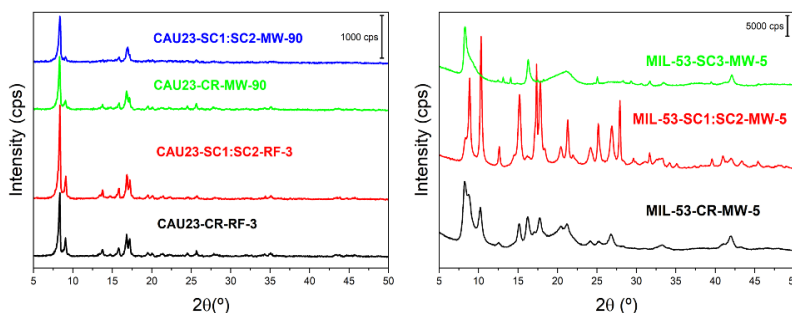


Figura 1.-PXRD de las muestras

Agradecimiento: Agencia Estatal de Investigación - PID2023-146935OB-C21 y-C22. PRM agradece al MICIU el contrato predoctoral FPU24/01500.

Referencias

- [1] A. Jiménez; V. Rives, M.A. Vicente; A. Gil, A. J. *Environ. Chem. Eng.* **2022**, *10*.
- [2] D.Lenzen; J. Zhao; S.J. Ernst, M. Wahiduzzaman, A. Ken Inge, D. Fröhlich, H. Xu, H.J. Bart, C. Janiak, S. Henninger, *Nat. Commun.* **2019**, *10*.

Mejora de propiedades piezoeléctricas mediante heteroestructuras laminadas de materiales cerámicos

A. Rodríguez¹, X. Vendrell¹, J. García²

¹ Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Universitat de Barcelona, 08028 Barcelona, España, andres.rodriguez@ub.edu

² Departament de Física, Universitat Politècnica de Catalunya, 08034 Barcelona, España

Las cerámicas piezoeléctricas se emplean habitualmente como actuadores, sensores y transductores debido a su capacidad de convertir energía mecánica en energía eléctrica y viceversa.^[1] Usualmente, la mejora de su respuesta en deformación y de sus propiedades electromecánicas se aborda mediante modificaciones composicionales; sin embargo, los avances obtenidos a través de nuevas formulaciones son cada vez más limitados y complejos de alcanzar.^[2] Paralelamente, la creciente demanda de sistemas de conversión energética más eficientes impulsa la búsqueda de estrategias alternativas para optimizar el rendimiento funcional de estos materiales.^[3]

En este contexto, el presente trabajo explora el diseño y la fabricación de heteroestructuras laminadas másicas (*bulk*) obtenidas a partir de polvos comerciales microparticulados de diferentes composiciones basadas en la solución sólida de $\text{Pb}(\text{Ti}_{1-x}\text{Zr}_x)\text{O}_3$, seleccionadas por presentar respuestas electromecánicas diferenciadas. Las muestras se conformaron en arquitecturas multicapa con espesores controlados, con el objetivo de analizar la influencia de la estructura laminar y de la combinación de materiales sobre la respuesta funcional resultante.

Los resultados muestran que las heteroestructuras laminadas presentan valores de deformación máxima comparables a los del material constituyente de mayor respuesta piezoeléctrica, junto con una reducción significativa de las pérdidas asociadas. Además, las configuraciones multicapa con inhomogeneidad geométrica entre capas exhiben una mejora notable del acoplamiento electromecánico, favoreciendo así una conversión más eficiente entre energía mecánica y eléctrica.

En conjunto, las cerámicas multicapa desarrolladas muestran una mejora de la respuesta piezoeléctrica y de las propiedades electromecánicas, superiores a los de los materiales constituyentes. Este comportamiento no puede explicarse mediante un promedio de propiedades de los constituyentes, lo que pone de manifiesto el papel determinante de la arquitectura multicapa en la respuesta funcional del sistema. Estos resultados establecen una estrategia práctica para el diseño de materiales piezoeléctricos en *bulk* de alta eficiencia, especialmente orientados a aplicaciones de conversión de energía, mediante la combinación arquitectónica de materiales con diferentes composiciones.

Referencias

[1] Berlincourt, D., *J. Acoust. Soc. Am.*, **1981**, 70(6), 1586-1595.

[2] Sahu, R. K., Asthana, S. J., *Alloys Compd.*, **2025**, 1010, 178227.

[3] Pradeesh, E. L., Udhayakumar, S., Vasundhara, M. G., Kalavathi, G. K., *Microsyst. Technol.*, **2022**, 28(8), 1797-1830.

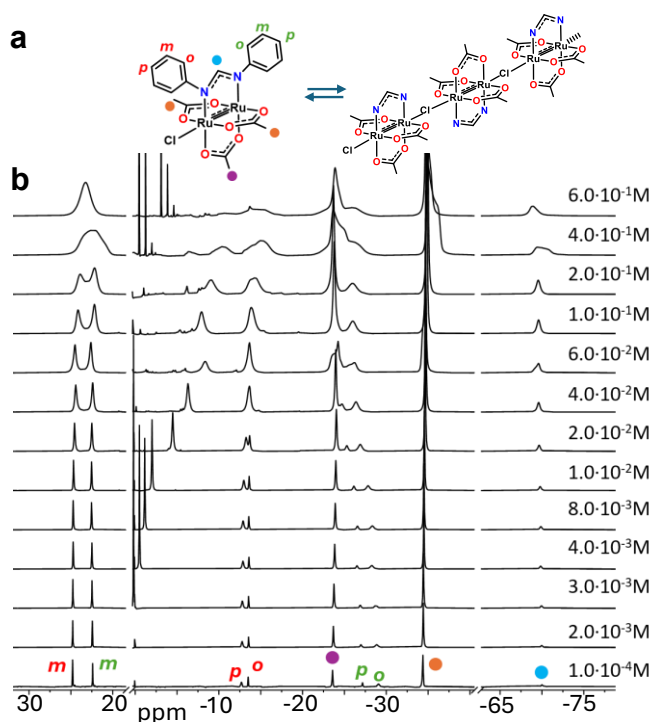
Polímeros Supramoleculares Paramagnéticos basados en Complejos de Dirrutenio

Lourdes del Álamo¹, Santiago Herrero^{1,2}, María José Mayoral¹

¹MatMoPol, Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, mj.mayoral@ucm.es

²Instituto de Tecnología del Conocimiento, Universidad Complutense de Madrid

La química supramolecular estudia la organización espontánea de componentes moleculares mediante interacciones no covalentes, lo que confiere a estos sistemas un carácter dinámico y capacidad de respuesta frente a estímulos externos [1]. La incorporación de centros metálicos amplía notablemente las propiedades que pueden combinarse en dichos materiales, introduciendo funcionalidades ausentes en sistemas puramente orgánicos [2]. Entre ellas, el comportamiento magnético permanece aún poco explorado, pese a su potencial para generar propiedades de interés y funcionalidades basadas en el espín y fenómenos cooperativos, útiles, por ejemplo, en tecnologías cuánticas. Así, los materiales **metalo-supramoleculares magnéticos** representan una prometedora vía para expandir las aplicaciones de los ensamblajes supramoleculares más allá de las propiedades ópticas y electrónicas convencionales.



En este trabajo, describimos la formación de polímeros supramoleculares paramagnéticos a partir de **unidades monoméricas de dirrutenio** (Fig. 1a) [3]. Nuestros estudios de RMN demuestran la formación de agregados lineales en disolución (Fig. 1b) cuyas propiedades magnéticas corroboran que el carácter paramagnético del monómero se transfiere con éxito al polímero supramolecular, dando lugar a un **material magnéticamente activo**.

Figura 1.- a) Especies monomérica y agregada de dirrutenio. b) Experimento de ¹H-RMN en CDCl₃.

Referencias

- [1] U.S. Schubert, G.R. Newkome, A. Winter. *Supramolecular Polymers and Assemblies. From Synthesis to Properties and Applications*. Wiley-VCH, **2021**.
- [2] M. R. Stühler, A. J. Plajer, *Polym. Chem.*, **2025**, *16*, 2799-2810.
- [3] M. Cortijo, R. González-Prieto, S. Herrero, J.L. Priego, R. Jiménez-Aparicio, *Coord. Chem. Rev.*, **2019**, *400*, 213040.

A dual-emissive Eu/Tb molecular material for anion sensing in water

P. Oreiro-Martínez¹, J. Corredoira-Vázquez^{1,2}, C. Díaz-Fontenla³, M. Fondo¹,
J. Sanmartín-Matalobos^{1,2}

¹ Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Spain. E-mail: paulaoreiro.martinez@usc.es

² Instituto de Materiais (iMATUS), Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Spain.

³ Department of Chemistry and Biomolecular Sciences, University of Ottawa, 10 Marie Curie, Ottawa, Ontario K1N 6N5, Canada

In recent decades, the selective detection of anions in water has attracted considerable attention due to their significant impact on both human health and ecosystem integrity [1]. In this context, lanthanoid-based complexes have emerged as promising platforms owing to their unique photophysical properties [2]. Heterometallic Eu/Tb complexes are attractive as ratiometric systems, as the distinct response of each lanthanoid emission band enables quantitative analysis *via* the Eu/Tb intensity ratio, thereby mitigating the non-linearity of absolute emission intensity with concentration. To this end, our group has previously reported macrocyclic ligand-based complexes that efficiently sensitize lanthanoid emission [3–4]. In this work, we present the synthesis and structural/optical characterization of the heterometallic complex $\{Eu_{0.9}Tb_{0.1}(L^{N6,en,r})(OAc)_2\}BPh_4 \cdot 0.5CHCl_3$ (**1**·0.5CHCl₃), and its study as a selective ratiometric luminescent sensor for anions in aqueous media (Figure 1).

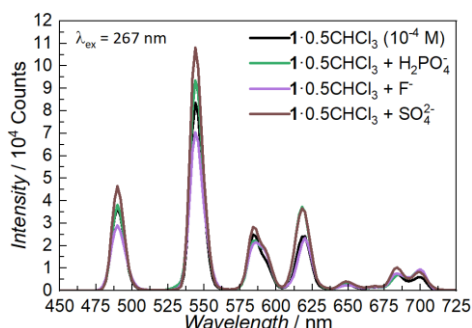


Figure 1. Emission spectra of **1**·0.5CHCl₃ and its variation in the presence of a series of anions.

Acknowledgements

This work was supported by project PID2024-155748NB-I00, funded by MICIU/AEI/10.13039/501100011033 and by FEDER, EU, and by project 2025-PU019, funded by Universidade de Santiago de Compostela. J.C.V thanks Xunta de Galicia for his postdoctoral fellowship (ED481D-2025/006). P. O. M. thanks the Spanish Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades for her predoctoral fellowship (FPU23/02925).

References

- [1] F. Yazdi, M. Anbia, M. Sepehrian, *Carbohydr. Polym.*, **2023**, 320, 121230 (1-37).
- [2] S. E. Bodman, S. J. Butler, *Chem. Sci.*, **2021**, 12, 2716-2734.
- [3] J. Corredoira-Vázquez, C. González-Barreira, J. Sanmartín-Matalobos, A. M. García-Deibe, M. Fondo, *Int. J. Mol. Sci.*, **2024**, 25, 6802 (1-17).
- [4] J. Corredoira-Vázquez, C. González-Barreira, A. M. García-Deibe, J. Sanmartín-Matalobos, M. A. Hernández-Rodríguez, C. D. S. Brites, L. D. Carlos, M. Fondo, *Inorg. Chem. Front.*, **2024**, 11, 1087-1098.

Hybrid Ironporphyrin/TiO₂–Kaolinite Photocatalysts for Selective Degradation of Emerging Contaminants

L. O. Garcia¹, V. Lima¹, M. V. do Prado¹, E. J. Nassar¹, L. Marçal¹, E. H. de Faria¹, K. J. Ciuffi¹,
A. Gil², S. Korili², R. Trujillano³, M. A. Vicente³

¹ Universidade de Franca (UNIFRAN), Franca-SP, Brazil, e-mail: katia.ciuffi@cruzeirosul.edu.br

² INAMAT-Departamento de Ciencias, Universidad Pública de Navarra, 31006 Pamplona, Spain

³ GIR-QUESCAT, Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Salamanca, 37008 Salamanca, Spain

Non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs), particularly ibuprofen and acetylsalicylic acid (ASA), as well as endocrine-disrupting compounds such as bisphenol A (BPA), are frequently detected in aquatic environments due to their high consumption rates and incomplete removal by conventional treatment processes [1]. In this context, hybrid photocatalytic systems integrating semiconductor domains and biomimetic catalytic centers have emerged as promising alternatives for environmentally relevant oxidation processes. This study reports the development of multifunctional hybrid photocatalysts based on iron-containing titania-modified kaolinite systems synthesized via sol–gel methodology. The Brazilian São Simão deposit represents a significant source of ball clay-type kaolinite [2], we have previously demonstrated its capacity for intercalation and interlayer grafting with diverse molecular species [2,3]. Notably, kaolinite distinguishes itself from other phyllosilicates by its robust interlayer cohesive forces, alongside superior physical and chemical stability. Two distinct catalytic architectures were investigated: (i) Ti-containing kaolinite systems with inorganic Fe-species (KaFeTi) and (ii) hybrid materials containing immobilized tetrakis(pentafluorophenyl) iron(III) porphyrin covalently anchored onto aminopropyl-functionalized TiO₂-kaolinite matrices (KaTi400-APTES-FeTFPP). The synthetic strategy enabled homogeneous TiO₂ dispersion over the layered aluminosilicate structure while preserving the layered morphology of the support. The materials were characterized by X-ray diffraction (XRD), FTIR, SEM, UV–Vis diffuse reflectance spectroscopy, and band gap analysis. UV-Vis studies demonstrated that the FeP-containing systems exhibit multiple electronic transitions and additional intermediate electronic states compared with TiO₂-only materials. Rather than behaving as conventional semiconductors with simple band gap narrowing, the hybrid materials displayed electronically coupled interfaces capable of sustaining multiple excitation and charge-transfer pathways. Photocatalytic studies demonstrated efficient degradation of ibuprofen, ASA and BPA under UV–visible irradiation. The FeP-containing hybrid material exhibited superior catalytic performance, promoting approximately 90% BPA degradation after 24 h of irradiation, even with adsorption values below 3%, indicating that the process is predominantly governed by photoinduced interfacial reactions rather than surface adsorption. In the case of ibuprofen and ASA, the catalytic system promoted oxidation pathways resembling biomimetic cytochrome P450 transformations, favoring the formation of hydroxylated and carboxylated intermediates prior to progressive mineralization. The results demonstrate that modulation of the iron chemical environment plays a decisive role in controlling the electronic structure and photocatalytic behavior of hybrid systems. The developed materials represent a promising strategy for the selective degradation of emerging contaminants and contribute to the design of intelligent multifunctional catalysts for green environmental remediation.

References

- [1] Y. Luo, W. Guo, H.H. Ngo, L.D. Nghiem, F.I. Hai, J. Zhang, S. Liang, X.C. Wang. *Sci. Total Environ.*, **2014**, 473-474, 619–641.
- [2] N. Bizaia et al. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2009**, 1, 11, 2667–2678
- [3] M. V. do Prado et al., *Appl. Clay Sci.*, 262, **2024**, 107622

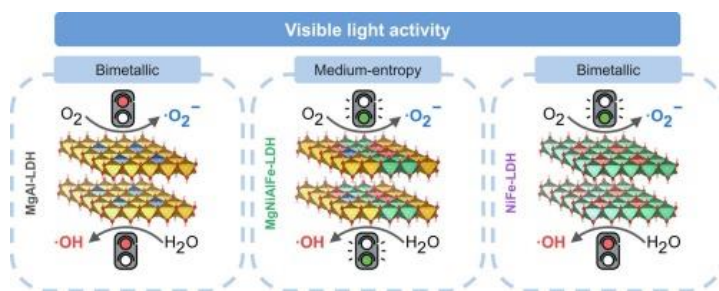
Diseño entrópico de hidróxidos dobles laminares 2D para su empleo como fotocatalizadores eficientes bajo luz solar en eliminación selectiva de gases NO_x

A. Ruz-Luna¹, B. Gámiz¹, L. Marín¹, F. Martín², I. Pavlovic¹, L. Sánchez¹

¹ Departamento de Química Inorgánica, Instituto Química para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Córdoba E-14014, España (luis-sanchez@uco.es)

² Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, Campus de Teatinos, Málaga, E-29071, España

Los óxidos de nitrógeno (NO_x) permanecen como contaminantes urbanos críticos, lo que exige el desarrollo de fotocatalizadores eficientes activados por luz visible para la purificación sostenible del aire. En este trabajo, proponemos una estrategia de diseño innovadora que integra la morfología bidimensional (2D) [1] y la ingeniería de la entropía configuracional en hidróxidos dobles laminares (HDL) [2], logrando una fotocatálisis altamente eficiente bajo luz visible sin recurrir a heterouniones ni a elementos de tierras raras. Mediante un enfoque escalable de coprecipitación-AMOST, sintetizamos una serie de HDL 2D multimetálicos que incorporan Ni, Fe y Zn en la estructura de MgAl-CO₃ para generar sistemas de entropía media y alta. El incremento en la complejidad composicional induce una modulación de la estructura electrónica que consigue reducir el band gap (de 3.94 a 2.4-2.8 eV) y una mayor absorción de luz visible. En lo que respecta a la eliminación fotocatalítica de gases NO_x, los HDL multimetálicos superan al material de origen; destacando el HDL de MgNiAlFe de entropía media que elimina el 48% del NO. Combinando los resultados de las técnicas de PL, EPR, ensayos con scavengers, alineación de bandas XPS/UPS y DRIFTS *in situ*, se revela que el ajuste electrónico impulsado por la entropía favorece la generación cooperativa de radicales ·OH y ·O₂⁻, suprimiendo la recombinación de cargas y promoviendo la oxidación selectiva del NO.



Bajo este enfoque, la ingeniería de la entropía en HDL 2D se establece como una estrategia eficaz y directa para diseñar fotocatalizadores de un solo componente de actividad mejorada en el espectro visible.

Figura 1.- Activación de especies ROS en función de la complejidad composicional

Agradecimientos: este trabajo ha sido financiado por MICIU/PID2024-156242OB-I00/AEI/10.13039/501100011033 y por FEDER, UE.

Referencias

- [1] A. Pastor, D. O'Hare, I. Pavlovic, L. Sánchez et al., *Chem. Eng. J.*, **2022**, 429, 132361
- [2] R. Huang, H. Zhao, Z. Chen, *Nano. Mater. Sci.*, **2026**, 8, 264–283.

Extracción electroquímica de Litio de Baterías Li-ion gastadas mediante LiFePO_4

A. López-Chías, A. Benítez, Á. Caballero, R. Trócoli

Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química. Instituto Químico de Energía y Medio Ambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, 14014 Córdoba, España E-mail: Rafael.trocoli@uco.es

El crecimiento sostenido de la demanda de vehículos eléctricos en los últimos años constituye una de las principales tendencias en la transición hacia modelos de movilidad más sostenibles. En este contexto, se estima que, para 2030, más de 220 millones de vehículos eléctricos estarán en circulación a escala mundial, lo que implicará un aumento considerable en la producción de baterías Li-ion y, en consecuencia, en el volumen de baterías al final de su vida útil [1]. En respuesta a este escenario, la Comisión Europea ha establecido objetivos de sostenibilidad orientados, entre otros aspectos, a la recuperación de al menos el 50 % del litio contenido en baterías gastadas antes de 2027, así como su reutilización en la síntesis de materiales catódicos a partir de 2030 [2]. En este sentido, el reciclaje de baterías Li-ion se presenta como una alternativa económicamente viable y ambientalmente beneficiosa. No obstante, aunque la pirometalurgia y la hidrometalurgia son las rutas de reciclaje más empleadas, la recuperación selectiva de litio sigue siendo compleja, ya que parte de este elemento se pierde durante la extracción de otros metales presentes en los lixiviados, como Co, Ni y Mn [3].

Este trabajo aborda la modificación de un proceso hidrometalúrgico convencional basado en el uso de disoluciones acuosas de HCl , H_2SO_4 y HNO_3 [4] para la lixiviación de metales del material catódico. La recuperación de litio se realiza mediante olivino LiFePO_4 capaz de intercalar selectivamente iones Li^+ en su estructura cristalina, mientras otros metales permanecen en disolución. Además, se estudió la influencia de distintos parámetros operativos, como la naturaleza del agente lixivante y la modificación del pH, sobre la selectividad de recuperación y la estabilidad del material, incluyendo el empleo de recubrimientos de carbones funcionales obtenidos a partir del reciclaje de residuos de cerveza como materia prima. Para ello, se llevaron a cabo medidas galvanostáticas, análisis cuantitativos de los electrolitos mediante espectrometría de masas y caracterización estructural de los electrodos antes y después de su uso. Los resultados muestran que esta tecnología permite recuperar litio con una pureza superior al 98 %. Sin embargo, parámetros como la capacidad suministrada, asociada a la captación de litio, y la reutilización del electrodo dependen notablemente de las condiciones de lixiviación.

Referencias

- [1] K. Hantanasirisaku, M. Sawangphruk, *Global Challenges* 2023, 7, 2200212
- [2] European Commission, COM (2020)798
- [3] Z. Dobó, T. Dinh, T. Kulcsár, *Energy reports*. 2023, 9, 6362-6395
- [4] S. Yasa, O. Aydin, M. Al-bujasim et al. *Journal of Energy Storage* 2023, 73, 109073

Agradecimientos

Esta investigación ha sido financiada por Ministerio de Ciencia e Innovación (MCIN/AEI/10.13039/501100011033/ Proyecto PID2022-142391OA-I00) y Junta de Andalucía (Proyecto ProyExcel_00330) y Unión Europea NextGenerationEU/PRTR. Ayuda RYC2022-037564-I financiado por MCIN/AEI /10.13039/501100011033

¿Intercalación o almacenamiento capacitivo? Analiza mi estructura

F. García-Alvarado¹, A. Kuhn¹, R. Córdoba¹, C. M. Subramaniam¹, I. J. Villar-García¹, J. Goclon³,
A. Sarapulova^{2,4,5}, J. Maibach^{2,6}, S. Dsoke^{2,4,5}, E. García-González⁷, C. Escudero⁸,
V. Martin-Diaconescu⁸, F. Fauth⁸, E. Rodríguez Castellón⁹

¹ Department of Chemistry and Biochemistry, University San Pablo-CEU, CEU Universities, Boadilla del Monte, 28668 Madrid, Spain. flaga@ceu.es

² Institute for Applied Materials (IAM), Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, D-76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Germany

³ Faculty of Chemistry, University of Białystok, Ciołkowskiego 1K 15-245, Białystok, Poland

⁴ Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems, Department of Electrical Energy Storage, Heidenhofstr. 2, 79110 Freiburg, Germany

⁵ Freiburg Materials Research Center (FMF), Stefan-Meier-Straße 21, 79104 Freiburg, Germany

⁶ Department of Physics, Chalmers University of Technology, SE 412 96 Göteborg, Sweden

⁷ Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid 28040, Spain

⁸ CELLS-ALBA Synchrotron, 08290 Cerdanyola del Valles, Barcelona, Spain

⁹ Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, 29071, Málaga, Spain

Los sitios intersticiales de muchos óxidos de metales de transición son adecuados para la inserción de litio, aunque pueden serlo menos para iones de mayor tamaño. Por ello, no todos los materiales anfitriones son apropiados para alojar tanto Li como Na; en consecuencia, la estructura determina el mecanismo predominante de almacenamiento de carga.

La estructura de túneles de V_4O_9 es capaz de intercalar litio, desarrollando una capacidad reversible de 160 mAh g⁻¹ a 100 mA g⁻¹ durante 2000 ciclos [1]. Sin embargo, en celdas de sodio, la carga se almacena mediante un mecanismo pseudocapacitivo de redox superficial [2], ya que el Na encuentra dificultades para insertarse en los túneles. Este mecanismo, dilucidado mediante SXRD, XAS, XPS, y las correspondientes características electroquímicas, permite alcanzar una capacidad reversible de 127,7 mAh g⁻¹ a 250 mA g⁻¹ durante 5000 ciclos y mantener 55,9 mAh g⁻¹ al final de 10000 ciclos.

Por otro lado, para iones más grandes, como Na⁺ o K⁺, los óxidos de vanadio laminares pueden ser más adecuados para acomodar estos iones en el espacio interlaminar, aunque la intercalación puede provocar una fuerte distorsión estructural de las capas. Algunas estructuras laminares pueden revertir este reordenamiento drástico, proporcionando así una alta capacidad reversible. Este es el caso del β - V_2O_5 , polimorfo de alta presión, que puede almacenar tanto Li⁺ como Na⁺ mediante un mecanismo de intercalación, dando lugar a múltiples soluciones sólidas. A pesar del acusado reordenamiento estructural, el material consigue almacenar sodio de forma reversible alcanzando una capacidad de ~ 150 mAh g⁻¹.

Referencias

- [1] C. M. Subramaniam, A. Kuhn, E.G. González, O. Guerrero-Pérez, E. Rodríguez-Castellón, F. García-Alvarado, *Catalysis Today*, 2024, 429, 114507.
- [2] M.S. Chandrasekar, A. Kuhn, E. García-González, I.J. Villar-García, V. Martin-Diaconescu, E. Rodríguez-Castellón, F. Fauth, C. Escudero, E. Urones-Garrote, F. García-Alvarado, *Journal of Power Sources*, 2025, 655, 237910.

Understanding Cooperative Reactivity in Iron Systems

N. Hidalgo¹, J. Campos¹

¹ Instituto de Investigaciones Químicas (IIQ), Departamento de Química Inorgánica and Centro de Innovación en Química Avanzada (ORFEO-CINQA). Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) and Universidad de Sevilla, Avda. Américo Vespucio 49, 41092 Sevilla. nereida.hidalgo@iiq.csic.es

The activation of small molecules remains a central challenge in modern chemistry and is essential for the development of sustainable synthetic methodologies. The use of earth-abundant metals for the functionalization of inert substrates offers an attractive alternative to processes that rely on precious metals. Among first-row transition metals, iron has emerged as a particularly promising platform due to its accessibility, rich redox chemistry, and ability to mediate diverse bond activation processes. [1]

Our research focuses on the synthesis, characterization, and mechanistic investigation of iron complexes capable of promoting the activation and functionalization of small molecules. [2] Particular emphasis is placed on understanding how metal-ligand or metal-metal cooperativity and alkali metal cations modulate the structure and reactivity of key intermediates, enabling challenging transformations such as C–N bond formation from dinitrogen and previous C–H activation of hydrocarbons. [3]

By combining synthetic, spectroscopic, structural, and computational studies, we seek to elucidate the factors governing reactivity in these systems and establish structure–reactivity relationships that guide the rational design of new iron-based platforms. These studies provide fundamental insight into the factors governing bond activation and reactivity at iron centers, advancing our understanding of small-molecule transformations.

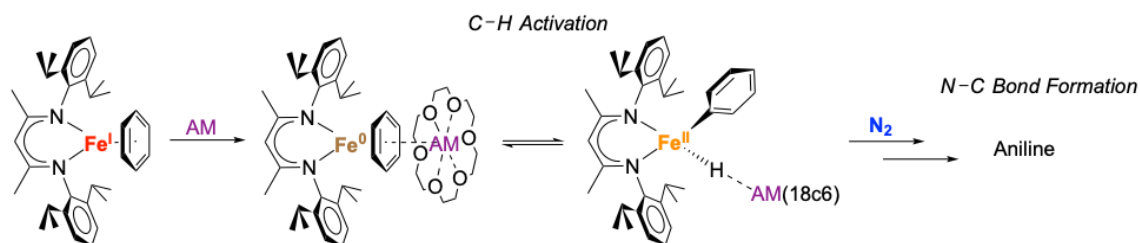


Figure 1.- Representative example of C–N bond formation from inactivated arenes and N₂. AM = Alkali Metals.

References

- [1] Representative reviews: a) Anxolabéhère-Mallart, E.; Bonin, J.; Fave, C.; Robert, M. *Dalton Trans.*, **2019**, 48, 5869-5878. b) Quintard, A. *Chem Eur -J.*, **2021**, 27, 89-105.
- [2] a) Corona, H.; Pérez-Jiménez, M.; de la Cruz-Martínez, F.; M.; Fernández, I.; Campos, J. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, 61, e202207581. b) Jori, N.; Corona, H.; Soto, E.; Fernández, I.; Campos, J., *Chem. Sci.*, **2026**, 17, 9018-9026.
- [3] a) Li, Y.; Hidalgo, N.; Bhutto, S. M.; Chew, N. C.; Mercado, B. Q.; Holland, P.L.; Chen, H., *Inorg. Chem.*, **2025**, 64, 17387-17398. b) Hidalgo, N.; Krajewski, S. M.; Mercado, B. Q.; Holland, P. L., *Chem Sci.* **2026**, 17, 10061-10066.

Progresos hacia baterías Na-S mediante encapsulación de azufre en biocarbón ultramicroporoso

Omar Saad-Molina, Azahara Cardoso-Almoguera, Juan Luis Gómez-Cámer, Almudena Benítez, Álvaro Caballero

Dpto. Química Inorgánica e Ingeniería Química, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, 14071, Córdoba, España. q92samoo@uco.es

La transición energética demanda estrategias sostenibles que combinen la valorización de residuos con sistemas de almacenamiento seguros. En este trabajo se plantea el aprovechamiento de la cáscara de pistacho, cuyo cultivo ha tenido un auge impactante en los últimos años, para la síntesis de un carbón jerárquico (PWC) con alta proporción de microporosidad. Al utilizar este PWC como soporte catódico, puede infiltrarse azufre mediante difusión por fusión, consiguiendo un material con ciclado estable y una eficaz mitigación del efecto lanzadera en sistemas de litio-azufre (Li-S)[1]. Sin embargo, la extrapolación directa de este material a celdas sodio-azufre a T^a ambiente resultó ineficaz, sufriendo una drástica disminución de su capacidad electroquímica debido a la pérdida irreversible de material activo. Para superar esta barrera en la tecnología Na-S, se ha implementado una estrategia de confinamiento avanzado utilizando la red de ultra y supermicroporos del PWC. A la infiltración por difusión por fusión se le integró un tratamiento térmico diseñado para la rotura del anillo de S₈. La ausencia de señales cristalográficas en la difracción de rayos X (DRX) y en la espectroscopía Raman confirmó el encapsulamiento exclusivo de moléculas de azufre de cadena corta (S₂-S₄), una forma que inhibe la formación de especies solubles en el electrolito. Esta encapsulación permite un mecanismo de conversión electroquímica cuasi-sólido. En el estudio electroquímico en celda de Na-S con electrolitos simples de carbonato, el sistema con el azufre confinado superó la degradación observada inicialmente. Las celdas presentan perfiles de voltamperometría cíclica con dobletes reversibles controlados por difusión, una alta eficiencia coulombica y una notable retención de capacidad. Los resultados validan una vía de optimización estructural para transicionar de Li a Na en sistemas Metal-S de bajo coste [2].



Figura 1: Esquema general del trabajo

Agradecimientos

Esta investigación fue financiada por el Ministerio de Ciencia e Innovación de España (MCIN/AEI/10.13039/501100011033) bajo el proyecto PID2023-9521470800B-I00 y por la Junta de Andalucía.

Referencias

- [1] A. Cardoso-Almoguera, et al. *Mater. Today Chem.* **2026**, 53, 103518.
- [2] A. Cardoso-Almoguera, O. Saad-Molina, et al. *Chem. Eng. J.* **2026**, 536, 175732.

Extracción de litio de aguas geotermales mediante un electrodo selectivo de LiFePO_4

M. Ramírez-Prieto¹, R. Trocoli¹

¹ Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, Instituto químico de energía y medio ambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, 14014 Córdoba, España. Email: z32raprm@uco.es

El aumento de la demanda de litio en los últimos años, impulsado principalmente por la expansión de los vehículos eléctricos y los sistemas de almacenamiento energético, ha favorecido la intensificación de los métodos convencionales de extracción, entre los que destacan la obtención a partir de salmueras y minería. Estos métodos presentan grandes desventajas económicas y medioambientales, como el gran consumo de agua y la gran cantidad de residuos tóxicos que generan [1]. Como consecuencia, en los últimos años ha surgido un interés creciente por potenciales fuentes alternativas de litio, como las aguas geotermales. Si bien estas suelen contener concentraciones de litio inferiores a las de las salmueras convencionales (100 - 400 ppm vs. 500 - 2000 ppm) y un ratio Li/Na más bajo (1:275 vs 1:70), presentan relaciones Li/Mg significativamente más altos (0.2 vs 3.33).

En esta comunicación se describe la recuperación de litio mediante bombeo iónico usando fosfato de hierro y litio (LFP) como material selectivo de Li^+ . Se analiza la selectividad de extraer el litio que se encuentra en una concentración de 155 ppm frente al resto de cationes presentes en disolución (Na: 36000 ppm, K: 3200 ppm, Ca: 6900 ppm, Mg: 320 ppm y Sr: 350 ppm) [2] y la influencia de la temperatura de extracción de las aguas geotermales (45-60°C) en la estabilidad y rendimiento del proceso (Figura 1), con el objetivo de analizar la viabilidad de la integración de este proceso de recuperación en los métodos de generación de energía mediante aguas geotermales.

Los materiales y las soluciones de recuperación se caracterizaron estructural y morfológicamente mediante difracción de rayos X, espectrometría de emisión óptica con plasma acoplado inductivamente (ICP-OES) y microscopía electrónica de transmisión.

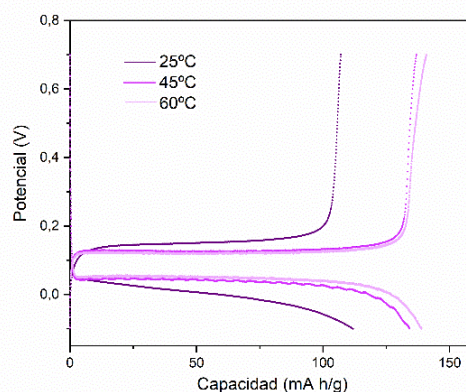


Figura 1. Perfiles de carga y descarga del electrodo de LiFePO_4 en aguas geotermales a 25°C, 45°C y 60°C.

Referencias

- [1] S. Abrishami, M. Gonbadi, Y. Boroumand, M. Golmohammadi, M. Narimani, A. Sarmadi, C. Matthews, H. Estay, M. Khiadani, A. Razmjou, *Separation and Purification Technology*, **2026**, 381
- [2] L. Kölbel, T. Kölbel, L. Herrmann, E. Kaymakci, I. Ghergut, A. Poirel, J. Schneider, *Hydrometallurgy*, **2023**, 221

A Dy³⁺ single-molecule magnet for luminescent and magnetic temperature readout

J. Corredoira-Vázquez^{1,2}, P. Oreiro-Martínez¹, A.M. García-Deibe¹, M. Fondo¹

¹ Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Spain, e-mail: julio.corredoira.vazquez@usc.es

² Institute of Materials (iMATUS), Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Spain

Single-molecule magnets (SMMs) represent a unique class of molecular materials with promising applications in high-density information storage, spintronics, and quantum technologies. However, their implementation in functional devices requires accurate temperature monitoring at the nanoscale, as their magnetic relaxation dynamics are highly temperature dependent. In this context, the development of systems combining magnetic and thermometric functionalities is particularly appealing for next-generation molecular nanotechnologies [1].

Luminescent thermometry has emerged as a powerful, non-invasive strategy for local temperature sensing in molecular materials [2]. Nevertheless, in lanthanoid-based systems, the simultaneous optimization of magnetic and thermometric performance remains a significant challenge because both properties are strongly influenced by the crystal-field splitting of the metal ion.

Herein, we report a dysprosium single-ion magnet (Figure 1) based on an *N*₆ macrocyclic ligand. Its magnetic and luminescent properties are comprehensively investigated, together with its performance as a luminescent, magnetic, and multiparametric thermometer.

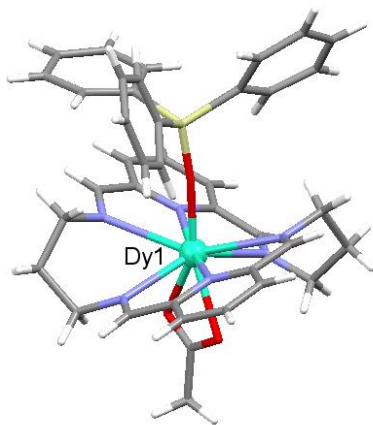


Figure 1. Diagram for the cation {[Dy(L^{N6})(OAc)(OSiPh₃)]}⁺ in 1·0.5CH₂Cl₂.

References

- [1] A. G. Bispo-Jr, *Coord. Chem. Rev.* **2025**, 537, 216685.
- [2] C. D. S. Brites, R. Marin, M. Suta, A.N. Carneiro Neto, E. Ximendes, D. Jaque, L.D. Carlos. *Adv. Mater.* **2023**, 35, 2302749

Simulation of Emission Properties in Real-Sized Lanthanide-Doped Nanoparticles

A. N. Carneiro Neto¹

¹ Department of Inorganic Chemistry, University of Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, 15782, Spain, albano.neto@usc.es

Understanding the interactions that drive luminescence in lanthanide-based materials is challenging because of intricate energy transfer pathways and the difficulty of mapping Ln^{3+} distributions in real-sized nanoparticles. This communication introduces new methods for developing a computational framework that simulates the doping process and maps these interactions across complete, real-sized nanostructures of various shapes, such as spheres, rods (**Figure 1**), and prisms. Using crystallographic data and custom computational codes, it is possible to design precise structural models for different geometries, including core-shell systems, to extract Ln^{3+} - Ln^{3+} distance distributions and their corresponding energy transfer interactions. Additionally, the framework estimates 4f-level population dynamics, allowing estimations of relative intensities and emission quantum yields. This novel modeling approach integrates theories to compute radiative and non-radiative rates, including energy transfer and multiphonon relaxation [1,2]. A data viewer was developed to show the structure and calculated rates concerning the Ln-Ln interactions. This tool is being designed to offer reliable predictions to optimize the performance of Ln^{3+} -doped materials for several applications.

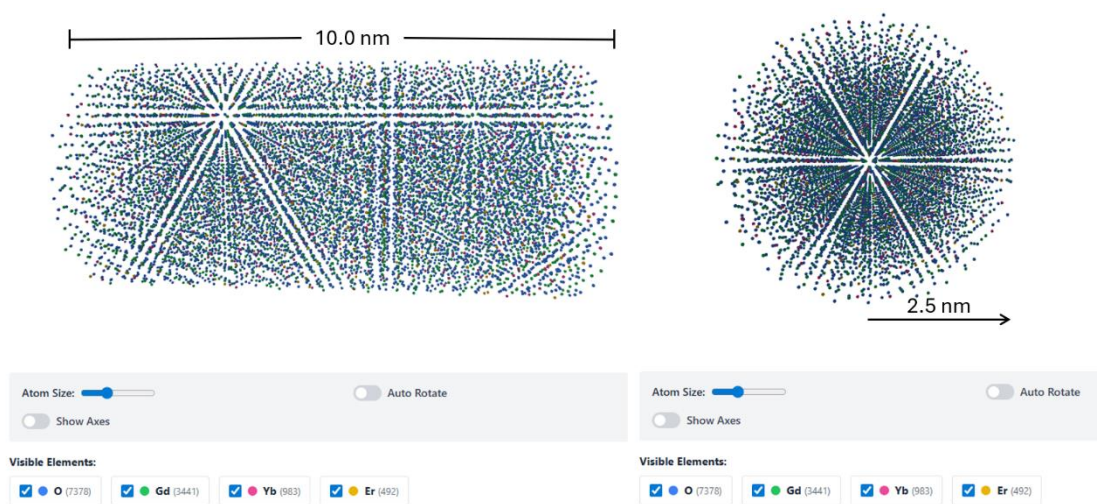


Figure 1. Example of a simulated Gd_2O_3 nanorod co-doped with 20% Yb^{3+} and 10% Er^{3+} . The nanorod is 10 nm in length with a 2.5 nm radius.

References

- [1] X. Qin, A.N. Carneiro Neto, R.L. Longo, et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, **2021**, 12, 1520–1541
- [2] T. Miyakawa, D.L. Dexter, *Phys. Rev. B*, **1970**, 1, 2961–2969

Contribución de materiales mesoporosos a la mitigación del cambio climático

D. Cantador-Fernández^{1,5}, D. Suescum-Morales^{2,5}, J.R. Jiménez³, J.M. Fernández-Rodríguez^{4,5}

¹ Departamento de Mecánica, E.P.S. de Córdoba, Universidad de Córdoba, p12cafed@uco.es

² Departamento de Ingeniería Rural, E.P.S. de Belmez, Universidad de Córdoba, p02sumod@uco.es

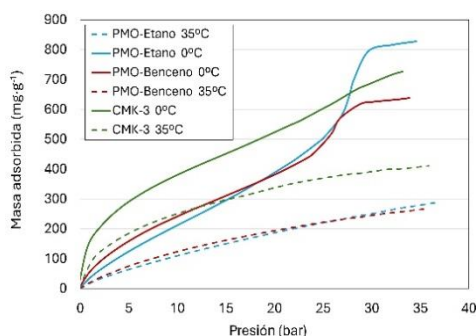
³ Departamento de Ingeniería Rural, E.P.S. de Belmez, Universidad de Córdoba, ir1jiroj@uco.es

⁴ Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, E.P.S. de Belmez, Universidad de Córdoba, um1feroj@uco.es

⁵ Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Campus de Rabanales, Universidad de Córdoba

La creciente concentración de dióxido de carbono (CO₂) en la atmósfera constituye uno de los principales desafíos ambientales del siglo XXI. Desde la Revolución Industrial, el incremento de las emisiones antropogénicas ha contribuido significativamente al calentamiento global. En este contexto, las tecnologías de captura y almacenamiento o utilización de carbono (CCS o CCU) se presentan como estrategias complementarias a la reducción de emisiones, siendo la adsorción mediante materiales porosos una de las alternativas más prometedoras.

La presente comunicación compara el comportamiento de tres adsorbentes mesoporosos para la captura de CO₂: PMO-Etano, PMO-Benceno y CMK-3. Estos materiales fueron caracterizados



mediante DRX, adsorción de nitrógeno (S_{BET}), ATG-ATD, tamaño de partícula y microscopía SEM y TEM. La adsorción de CO₂ se evaluó mediante isothermas a temperaturas de entre 0 y 35 °C y presiones de hasta 34–35 atm, así como mediante la aplicación de modelos matemáticos (Langmuir, Freundlich, Sips, Toth, Dubinin–Radushkevich y Temkin). La estabilidad y regenerabilidad de los adsorbentes se determinó mediante ciclos sucesivos de adsorción-desorción.

Figura 1. Isothermas de adsorción de CO₂.

Los resultados mostraron influencia significativa de las propiedades químicas superficiales y las características texturales en la capacidad de captura. El adsorbente PMO-Etano presentó la mayor capacidad de adsorción a 0 °C y 34 atm (827,8 mg·g⁻¹) [1]. El material CMK-3 mostró una capacidad máxima de 726,7 mg·g⁻¹ en las mismas condiciones [2], mientras que el PMO-Benceno alcanzó 638,2 mg·g⁻¹ [3]. La adsorción se produjo principalmente por fisisorción, caracterizada por interacciones débiles entre las moléculas de CO₂ y la superficie del adsorbente, lo que favorece la reversibilidad del proceso. Además, los ensayos cíclicos evidenciaron una elevada estabilidad estructural y pérdidas mínimas de capacidad tras sucesivos ciclos de adsorción-desorción.

Referencias

- [1] Cantador-Fernandez, D.; Suescum-Morales, D.; Esquivel, D.; Jiménez, J. R.; Fernández-Rodríguez, J. M. J. Environ. Chem. Eng. **2023**, 11, 110582
- [2] Cantador-Fernandez, D.; Otero-Izquierdo, R.; Van Der Voort, P.; Jiménez, J. R.; Fernández-Rodríguez, J. M. Materials **2024**, 17, 3845
- [3] Cantador-Fernandez, D.; Esquivel, D.; Jiménez, J. R.; Fernández-Rodríguez, J. M. Materials **2024**, 17, 2669.

Unraveling Mg^{2+} Storage and Structural Evolution in Layered $\text{H}_2\text{V}_3\text{O}_8$ Cathode for Rechargeable Magnesium-Ion Batteries

A. Toledano-Mencía¹, M. Pokora², J. Goclon², E. García-González³, F. Fauth⁴,
E. Rodríguez-Castellón⁵, P. Díaz-Carrasco¹, F. García-Alvarado¹, A. Kuhn¹

¹ Departamento de Química y Bioquímica, Facultad de Farmacia, Universidad San Pablo-CEU, CEU Universities, Boadilla del Monte, 28668 Madrid, Spain. Email: akuhn@ceu.es

² Faculty of Chemistry, University of Białystok, Ciołkowskiego 1K 15-245, Białystok, Poland

³ Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid 28040, Spain

⁴ CELLS-ALBA Synchrotron, 08290 Cerdanyola del Valles, Barcelona, Spain

⁵ Departamento de Química Inorgánica, Cristalografía y Mineralogía (Unidad Asociada al ICP-CSIC), Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, Campus de Teatinos, 29071 Málaga, Spain

Magnesium-ion batteries (MIBs) are attractive candidates for next-generation energy storage due to the high abundance, low cost, and superior volumetric capacity of magnesium compared with lithium.[1] However, identifying efficient cathode materials remains a major challenge. Among transition metal oxides, $\text{H}_2\text{V}_3\text{O}_8$ is particularly promising because it can host not only lithium [2,3], but also multivalent ions such as Mg^{2+} through multi-electron transfer. In this work [4], the Mg^{2+} storage mechanism in $\text{H}_2\text{V}_3\text{O}_8$ nanofibers is elucidated by combining ex situ characterization of chemically magnesiated $\text{Mg}_x\text{H}_2\text{V}_3\text{O}_8$ with operando X-ray diffraction. DFT calculations identify preferred Mg sites and associated electronic structure changes, and the most stable structural models are validated by high-resolution synchrotron diffraction, which is particularly relevant given the absence of reliable prior structural information for Mg-intercalated compounds. Electrochemical studies reveal a high capacity of 330 mAh g^{-1} at low 5 mA g^{-1} , mainly arising from diffusion-controlled Mg^{2+} intercalation, as supported by cyclic voltammetry. Favorable rate capability is preserved at higher current densities due to an increased contribution from surface-controlled (pseudo)capacitive processes. These findings provide new insights into the structural and electrochemical mechanisms governing Mg^{2+} storage and support the rational design of high-performance cathodes for MIBs.

Referencias

[1] C. Kuang, W. Zeng, Y. Li, *J. Nanosci. Nanotechnol.*, **2019**, 19, 12-25.

[2] J. Prado-Gonjal, B. Molero-Sánchez, D. Ávila-Brandé, E. Morán, J.C. Pérez-Flores, A. Kuhn, F. García-Alvarado, *J. Power Sources*, **2013**, 232, 173-180.

[3] A. Kuhn, J.C. Pérez-Flores, J. Prado-Gonjal, E. Morán, M. Hoelzel, V. Díez-Gómez, I. Sobrados, J. Sanz, F. García-Alvarado, *Chem. Mater.*, **2022**, 34, 694–705.

[4] To be submitted.

Acknowledgements

This work was funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033/FEDER,UE (Project PID2022-139039OB-C21) and funded by AEI/10.13039/501100011033/Unión Europea Next Generation EU/PRTR (Project TED2021-129427B-I00).

Avances en almacenamiento térmico latente: materiales renovables, encapsulación avanzada y diseño de interfaces funcionales

Y. E. Milián Rodríguez, C. Aguirado, M. Owais, M. Aretio

Departamento de almacenamiento de energía térmica, Centro Ibérico de Investigación en almacenamiento energético (CIAIE), Polígono 13, Parcela 31, "El Cuartillo", 10004 Cáceres (Extremadura), España, yanio.milian@ciaie.org

El almacenamiento de calor latente mediante materiales de cambio de fase (PCMs) constituye una estrategia clave para mejorar la eficiencia energética, reducir pérdidas térmicas y avanzar hacia sistemas de gestión térmica más sostenibles [1]. En nuestro grupo de investigación se han evaluado: el potencial de PCMs de origen natural, con especial énfasis en aceites vegetales, como alternativas sostenibles a derivados del petróleo; el uso de nanopartículas para el encapsulamiento de PCMs; y la optimización de PCMs basados en hidratos de sales mediante la mitigación de fenómenos de segregación de fase (**Fig. 1**). En conjunto, estas líneas

reflejan una estrategia integral para el desarrollo de PCMs más sostenibles y funcionales, desde la selección del material hasta su encapsulación. Entre los materiales estudiados, el aceite de girasol destacó como candidato para almacenamiento de calor latente, debido a su mayor entalpía de fusión, bajo subenfriamiento relativo, picos de transición estrechos y buena estabilidad tras ciclos térmicos (**Fig. 1a**) [2].

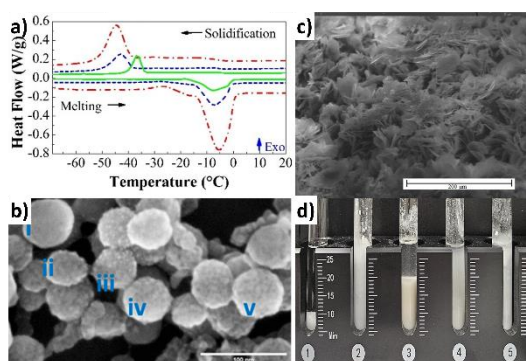


Figura 1.- Principales resultados del grupo de trabajo: a) aceite de girasol a diferentes velocidades de enfriamiento y calentamiento: 1 °C/min (verde), 2 °C/min (azul) y 5 °C/min (roja); b) nanopartículas Janus basadas en SiO₂; c) PCM basado en tetradecilamina (TDA) y MgO; d) segregación de fase en sal de Glauber.

Como frontera tecnológica, las nanopartículas Janus basadas en sílice ofrecen oportunidades para diseñar y encapsular PCMs compuestos más estables, con mejor control interfacial y menor fuga durante el cambio de fase. Otras tecnologías de mejoramiento incluyen el encapsulamiento mediante presión uniaxial para controlar las fugas en PCMs, como la TDA (**Fig. 1c**) y la adición de espesantes y otros aditivos para mejorar la segregación de fase en hidratos (**Fig. 1d**).

Las principales conclusiones apuntan a que el futuro del almacenamiento de calor latente dependerá de combinar la sostenibilidad del material activo, el control de la composición, la estabilidad cíclica, la mejora de la conductividad térmica, la reducción del subenfriamiento y estrategias avanzadas de encapsulación o estabilización estructural.

Referencias

- [1] Y.E. Milian, S. Ushak, *Materials Chemistry and Physics*, **2021**, 273, 125089.e
- [2] C. Aguirado, M. Owais, S. Ushak, ..., Y.E. Milian, *J. En. Storage*, **2026**, 154, 121123

Discovery and decoding of the breathing-caloric effect in pillared cyanonickelate PICNIC-60

P. Dafonte-Rodríguez, Ángel Ferradanes-Martínez, Alberto García-Fernández,
Socorro Castro-García, María Antonia Señarís-Rodríguez, Juan Manuel Bermúdez-García,
Manuel Sánchez Andújar

CICA – Centro Interdisciplinar de Química e Bioloxía and Departamento de Química, Facultade de Ciencias, Universidade da Coruña,
Campus de Elviña 15701, A Coruña, Spain. pedro.dafonte.rodriguez@udc.es

Since their discovery, metal-organic frameworks (MOFs) have demonstrated potential applications ranging from gas separation to drug delivery, thanks to their porous structure.^[1] We have recently reported a new application of MOFs that exhibit phase transitions induced by CO₂ adsorption/desorption. These transitions, involving reversible changes between distinct pore states, give rise to pronounced caloric effects under moderate pressure variations, making them highly attractive for sustainable and environmentally friendly cooling and heating applications.^[2,3] We term this phenomenon the “breathing-caloric effect”, as it is intrinsically linked to the breathing behavior of flexible MOFs.^[2]

In this work, we unveil the breathing-caloric effects of the Ni(bpene)[Ni(CN)₄] (bpene = 1,2-bis(4 pyridyl)ethylene)) MOF, formerly named as PICNIC-60. This MOF has previously been reported to have a breathing-like phase transition associated with the absorption/desorption of different gases.^[4] We conducted variable pressure and variable temperature differential scanning calorimetry (VP and VT-DSC) under CO₂. Remarkably, we found that the material experience colossal entropy changes ($\Delta S \sim 460 \text{ J K}^{-1} \text{ Kg}^{-1}$ at $T \sim 303 \text{ K}$ under 30 bar), comparable to cutting-edge breathing-caloric materials. Using this data, we have constructed the *pressure-temperature* phase diagram of this material. Additionally, we carried out an in-depth analysis of the structural changes experienced by the material by using variable pressure and variable temperature synchrotron X-ray diffraction to rationalize the observed entropy changes.

Acknowledgements: The authors acknowledge financial support from grant PID2021-122532OB-I00 funded by MCIU/AEI/10.13039/501100011033 and ERDF/EU and the projects ED431C 2022/39 and ED431F 2023/33 funded by Xunta de Galicia. This publication is part of the grant RYC2021-033040-I, funded by MCIU/AEI/10.13039/501100011033 and from the European Union NextGenerationEU/PRTR. J.M.B.-G. is grateful for the support provided by the UDC-Inditex InTalent Programme. A.G.-F acknowledges support from a Beatriz Galindo junior fellowship (BG23/00033) from the MCIU. P.D.-R. thanks fellowship FPU23/00091 granted by MCIU. The authors thank ALBA synchrotron for the beamtime in BL04-MSPD (AV-20250370254).

References

- [1] F. Zohra Zeggai, Z. Ait-Touchente, K. Bachari, A. Elaissari, *Chem. Phys. Impact*, **2025**, 10, 100864.
- [2] J. García-Ben, J. López-Beceiro, R. Artiaga, J. Salgado-Beceiro, I. Delgado-Ferreiro, Y. V. Kolen'ko, S. Castro-García, M. A. Señarís-Rodríguez, M. Sánchez-Andújar, J. M. Bermúdez-García, *Chem. Mater.*, **2022**, 34, 3323.
- [3] M. Gelpi, J. García-Ben, S. Rodríguez-Hermida, J. López-Beceiro, R. Artiaga, Á. Baaliña, M. Romero-Gómez, J. Romero-Gómez, S. Zaragoza, J. Salgado-Beceiro, J. Walker, C. J. McMonagle, S. Castro-García, M. Sánchez-Andújar, M. A. Señarís-Rodríguez, J. M. Bermúdez-García, *Adv. Mater.*, **2024**, 2310499.
- [4] J. T. Culp, M. R. Smith, E. Bittner, B. Bockrath, *J. Am. Chem. Soc.*, **2008**, 130, 12427-12434.

Producción de ácido bio-adípico mediante la desoxideshidratación de ácido mónico y posterior hidrogenación de ácido mucónico sobre catalizadores de renio y níquel soportados en biocarbón

J. Lozano¹, B. Khezri¹, Y. Cesteros¹

¹ Universitat Rovira i Virgili. Departament de Química Física i Inorgànica, Tarragona, Spain, jennifer.lozano@urv.cat

El ácido adípico (AA), un producto químico industrial clave ampliamente utilizado en la producción de nailon-6,6, se obtiene industrialmente a partir de materias primas derivadas del petróleo y empleando HNO₃ como agente oxidante, lo que genera grandes cantidades de N₂O, un gas de efecto invernadero. Una alternativa más sostenible consiste en la desoxideshidratación catalítica (DODH) de ácidos aldáricos, como el ácido mónico, procedentes de biomasa lignocelulósica, en ácido trans,trans-Mucónico (AM) para su posterior transformación en ácido adípico mediante hidrogenación catalítica [1]. Para llevar a cabo estas reacciones se han empleado mayoritariamente catalizadores de metales nobles soportados [1].

El objetivo de este trabajo es preparar, caracterizar y evaluar el comportamiento catalítico de diversos catalizadores de renio (5 % peso) y níquel (10 % peso) soportados en un carbón activo comercial (CA) y en un carbón mesoporoso ordenado (OMC) obtenido a partir de lignina extraída de cáscaras de almendra [2] en una reacción en tándem (DODH + hidrogenación) para la obtención de AA. Los resultados muestran que el catalizador 5Re/CA presenta un ligero mayor rendimiento a AM que 5Re/CMO, mientras que el catalizador 10Ni/OMC presenta mucha mayor conversión y selectividad a AA que 10Ni/CA (*Figura 1*), lo que se ha relacionado con el mayor carácter reductor del CMO que genera más Re metálico (especie más inactiva en DODH) pero más Ni metálico, que justifica mayor conversión y selectividad AA en la posterior hidrogenación.

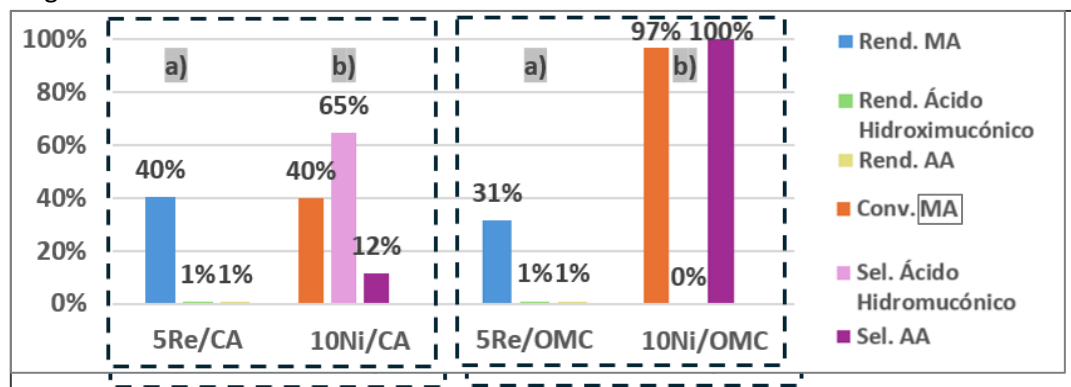


Figura 1. Resultados catalíticos de las reacciones en tándem a) DODH de ácido mónico con 5Re/C y 5Re/OMC a 180°C, 15 bar N₂ y 22 h; b) hidrogenación de la solución resultante en a) con 10Ni/CA y 10Ni/OMC a 100°C, 15 bar H₂ y 2 h.

Referencias

- [1] Y. Li et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 53 (2014) 4200–4204
 [2] A. Casadó et al., *Micropor. Mesopor. Mater.* 372 (2024), 113097.

Agradecimientos - This work was supported by the project PID2023-148363OB-C21 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and ERDF/EU. J. Lozano thanks to URV for the 2022PMF-INV-4 grant.

Influencia de la geometría de coordinación sobre el campo cristalino y la dinámica de espín en complejos de Gd(III)

D. Cabrosi¹, C. Rodríguez-Esteban¹, B. Artetxe³, L. Lezama³, A. Gaita-Ariño⁴, M. Gonidec⁵,
I. Oyarzabal^{1,2}

¹BCMaterials, Centro Vasco de Materiales, Aplicaciones y Nanoestructuras, 48940 Leioa, España.
Email: daiana.cabrosi@bcmaterials.net

²IKERBASQUE, Fundación Vasca para la Ciencia, 48009 Bilbao, España.

³Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco EHU, 48080 Bilbao, España.

⁴Instituto de Ciencia Molecular, Universidad de Valencia, 46980 Paterna, España.

⁵Universidad de Bordeaux, CNRS, Bordeaux INP, ICMCB, UMR 5026, 33600 Pessac, Francia.

Los compuestos basados en iones lantánidos han despertado un creciente interés debido a su potencial implementación en tecnologías cuánticas. Entre ellos, el ion Gd(III) resulta especialmente atractivo por presentar un estado fundamental con $S = 7/2$ y una anisotropía magnética relativamente pequeña, lo que posibilita la manipulación coherente de varios niveles de espín. En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización estructural y magnética del compuesto trinuclear $[\text{ZnCl}(\mu\text{-L})\text{Gd}(\mu\text{-L})\text{ClZn}]\text{PF}_6$ ($\text{H}_2\text{L} = \text{N,N}'\text{-dimetil-N,N}'\text{-bis(2-hidroxi-3-formil-5-bromobencil)etilendiamina}$) (Figura 1). Este sistema exhibe relajación lenta de la magnetización y comportamiento de qubit, ampliando el todavía reducido conjunto de sistemas moleculares basados en Gd(III) que presentan simultáneamente estas propiedades. Además, como parte de un estudio sistemático de las propiedades magnéticas y de la dinámica de espín de compuestos octacoordinados de Gd(III), los resultados obtenidos se comparan con los de un compuesto híbrido orgánico-polioxometalato previamente reportado por nuestro grupo (Figura 1),^[1-3] con el objetivo de analizar la influencia del entorno de coordinación sobre el campo cristalino y la dinámica de espín.

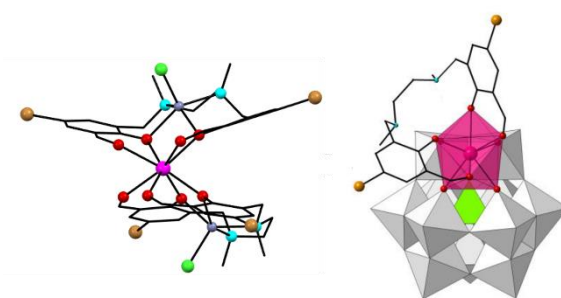


Figura 1. Representación esquemática del catión $[\text{ZnCl}(\mu\text{-L})\text{Gd}(\mu\text{-L})\text{ClZn}]^+$ (izquierda) y del compuesto híbrido orgánico-polioxometalato (derecha). Código de colores: $\{\text{WO}_6\}$, poliedro gris claro; $\{\text{SiO}_4\}$, poliedro verde; Gd, rosa; C, negro; O, rojo; N, celeste; Cl, verde claro; Br, naranja.

Referencias

- [1] E. Ruiz-Bilbao *et al.*, *Inorg. Chem.*, **2022**, 61, 2428. [2] J. Bustamante-Fernández *et al.*, *Dalton Trans.*, **2024**, 53, 13330. [3] C. Rodríguez-Esteban *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett.*, **2025**, 16, 3072.

Revisión de prototipos de baterías térmicas basadas en PCMs macroencapsulados

M. González Cruz¹, D. López Pedrajas¹, K. Mushtaq¹

¹ Centro Ibérico de Investigación en Almacenamiento Energético (CIAE), Avda. Universidad s/n, 10003, Cáceres, España, marcos.gonzalez@ciae.org

La gestión térmica en entornos de alta demanda representa actualmente un desafío crítico. Especialmente, en el caso de los edificios, que son responsables del 30% del consumo de energía a nivel mundial [1], y de los centros de datos, cuya refrigeración exige hasta el 50% de la electricidad de las instalaciones [2]. El agotamiento de los recursos fósiles y la necesidad de descarbonizar estos sectores han posicionado al almacenamiento de energía térmica por calor latente (LHTES) como una tecnología clave. A diferencia de la literatura tradicional, que frecuentemente se limita a la caracterización teórica de materiales de cambio de fase (PCMs) o al diseño de prototipos monolíticos basados en intercambiadores de calor [3], esta investigación adopta un enfoque eminentemente práctico orientado hacia el despliegue comercial.

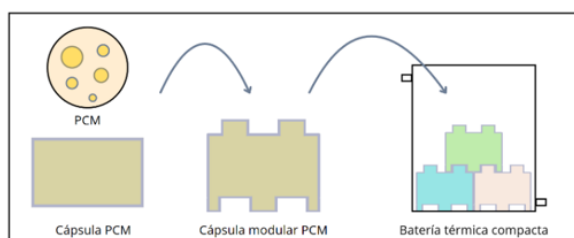


Figura 1.- Esquema conceptual de la batería térmica modular propuesta: transición desde el PCM base hacia cápsulas modulares compactas.

Se han desarrollado exhaustivas bases de datos de PCMs idóneos para aplicaciones de baja temperatura dirigidas al escenario más viable desde el punto de vista comercial, esto es, por debajo de los 100 °C [4]. Posteriormente, se ha analizado el estado de madurez tecnológica del LHTES mediante la recopilación de prototipos operativos recientes y soluciones lideradas por la industria (p. ej., Cowa, i-TES o

kraftBoxx [5]). Este trabajo fundamenta cómo la macroencapsulación avanzada puede resolver operativamente las limitaciones intrínsecas de los PCMs.

El estudio concluye que el salto definitivo hacia la viabilidad técnica y comercial reside en los prototipos de baterías térmicas construidos mediante macroencapsulación modular, es decir, una disposición tipo Lego, tal como se muestra en la Figura 1. Este paradigma estandarizado y escalable reduce los costes, facilita el transporte, adapta la respuesta térmica a cargas fluctuantes y optimiza la recuperación de calor, sentando las bases teóricas y estructurales para el diseño de baterías térmicas de nueva generación.

Referencias

- [1] A. I. Bardales-Cortés, J. Formosa, J. Giro-Paloma, *Polymers*, **2026**, 18, 451
- [2] A.A. Alkrush, M.S. Salem, O. Abdelrehim, A.A. Hegazi, *International Journal of Refrigeration*, **2024**, 160, 246-262
- [3] K. Faraj, M. Khaled, J. Faraj, F. Hachem, C. Castelain, *Energies*, **2022**, 15, 1459
- [4] H. Mehling, M. Brütting, T. Haussmann, *Journal of Energy Storage*, **2022**, 51, 104354
- [5] J. F. Hinojosa, S. F. Moreno, V. M. Maytorena, *Energies*, **2023**, 16, 3078

Multi-objective optimisation of the hydrogenation of muconic acid to adipic acid on supported Ni catalysts

L. Arrieche-Hernández¹, J. Granados-Reyes¹, F. X. Felpin², Y. Cesteros¹

¹ Universitat Rovira i Virgili, Departament of Physical and Inorganic Chemistry, Tarragona, levimanuel.arrieche@urv.cat

² University of Nantes, CEISAM Institute, Nantes (France)

Adipic acid (AA) is one of the most important compounds to the chemical industry due to its role in the production of nylon. It is usually obtained from the partial oxidation of cyclohexane to a cyclohexanol/cyclohexanone mixture and its subsequent oxidation with HNO_3 , but this process also releases large amounts of NO_x linked to atmospheric pollution and global warming [1], making the development of less harmful AA obtention routes a priority research area. The hydrogenation of muconic acid (MuA) derived from biomass [2] is an interesting alternative that could help reduce harmful emissions that stem from AA production with HNO_3 and lessen its reliance on fossil resources simultaneously. While it normally involves noble metals [2], this work will seek to investigate the hydrogenation of MuA to AA on supported Ni catalysts.

SBA-15 and MK-10 were impregnated with $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, calcined and reduced to obtain the catalysts Ni/SBA-15 and Ni/MK-10 with 15 wt% Ni. 3:1 NiAl and 1.5:1.5:1 NiCuAl hydrotalcites were also prepared, calcined and reduced to obtain the catalysts Ni/Al and Ni/Cu/Al. X-Ray Diffraction and H_2 chemisorption showed that all catalysts held metallic Ni and that catalysts prepared from hydrotalcites displayed much higher metallic area than impregnated ones. All

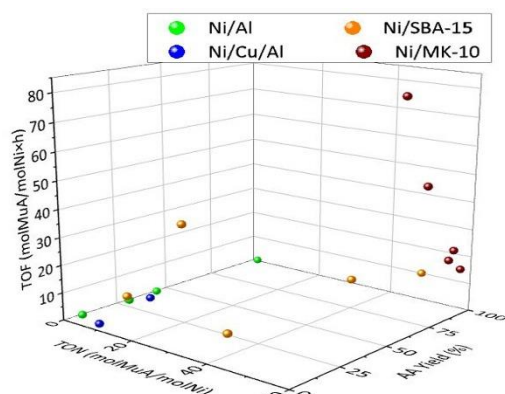


Figure 1. Best AA yields, TON and TOF values achieved with each catalyst in the hydrogenation of MuA to AA

catalysts were used in the multi-objective optimisation of the hydrogenation of MuA with a Bayesian algorithm designed to maximise AA yield, turnover number (TON) and turnover frequency (TOF) at varying time, temperature (25 °C – 100 °C), H_2 pressure (5 bar – 30 bar) and MuA to Ni molar ratio (5 – 50).

Maximum AA yields could be achieved with Ni/Al, Ni/SBA-15 and Ni/MK-10, while the latter two also allowed much higher TON and TOF values as seen in Figure 1. The highest TON (57,5 molMuA/molNi) and TOF (80,9 molMuA/molNi·h) were reached with Ni/MK-10 proving it the best catalyst to maximise each reaction metric under changing conditions. Additionally, Ni/MK-10 could still achieve a very high AA yield while maintaining good TON and TOF values.

[1] S. Dandapat, J. Rao, P. Likhar, S. Roy, T. Baldya, *CatComm*, **2022**, 172, 106555

[2] I. Khalil, G. Quintens, T. Junkers, M. Dusselier, *Green Chemistry*, **2020**, 22, 1517 – 1541

Acknowledgments

This work was supported by Project PID2023-148363OB-C2, funded by MICIU/AEI/10.13039/501100011033 and ERDF/EU. L. Arrieche-Hernández also thanks Generalitat de Catalunya for the grant 2024 FI-1 00418.

Funcionalización de arcillas laminares con fármacos antifúngicos para el tratamiento del eumicetoma

A. Misol^{1,2}, E. Sáez³, M.F. Colom³, M. Darder², P. Aranda²

¹ GIR-QUESCAT, Dpto. Química Inorgánica, Universidad de Salamanca, 37008 Salamanca, España. misol@usal.es

² Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM), CSIC, 28049 Madrid, España

³ Dpto. de Producción Vegetal y Microbiología, Facultad de Medicina. Universidad Miguel Hernández, 03550 Alicante, España

El uso de arcillas e hidróxidos dobles laminares (LDH) como soportes para la liberación controlada de moléculas de interés biológico ha ganado un gran interés gracias a su versatilidad estructural y propiedades superficiales [1]. En trabajos previos, se demostró la exitosa inmovilización e intercalación del antimicótico anfotericina B (AmB) en LDH (Figura 1) y en una arcilla natural de tipo montmorillonita (MMT) [2]. Continuando en esta línea, recientemente se ha abordado la incorporación de AmB en la arcilla, también de tipo esmectita pero en este caso sintética, Laponita® XLG (LAP), la cual es ampliamente utilizada en aplicaciones farmacéuticas. Igualmente, en este trabajo se ha avanzado en el uso de este soporte para la inmovilización de otro potente antimicótico, el itraconazol (ITZ). El objetivo final es el desarrollo de nuevos sistemas para la aplicación en el tratamiento de la micosis subcutánea denominada eumicetoma [3].

Los nuevos materiales híbridos resultantes se caracterizaron fisicoquímicamente mediante difracción de rayos X de polvo (XRD), espectroscopía infrarroja (FTIR) y microscopía electrónica de barrido (SEM), determinando la carga de fármaco mediante análisis elemental. Los perfiles de XRD confirmaron la exitosa intercalación de ambos fármacos en el espacio interlaminar de la Laponita, con carga de fármaco cerca del 40% en el caso de AmB y del 20% con el ITZ. Finalmente, se evaluaron sus cinéticas de liberación en un medio PBS a pH 7.4. Los ensayos *in vitro* frente a hongos causantes de eumicetoma, como *Aspergillus flavus*, *Subramaniula thielavioides*, *Madurella mycetomatis* o *Chaetomium atrobrunneum*, demostraron que estos sistemas híbridos mantienen una excelente capacidad de inhibición del crecimiento fúngico, postulándose como candidatos prometedores para el tratamiento controlado y en el tiempo de micosis subcutáneas.

Referencias

- [1] C. Aguzzi, P. Cerezo, C. Viseras, C. Caramella, *Applied Clay Science*, **2007**, 36, 22.36.
- [2] A. Misol, E. Sáez, M.F. Colom, M. Darder, P. Aranda, *Int. J. Pharm.*, **2025**, 683, 126029.
- [3] W.W.J. van de Sande, *PLoS Negl. Trop. Dis.*, **2013**, 7, e2550.

Agradecimientos: Programa Centros de Excelencia Severo Ochoa (subvención CEX2024-001445-S), AEI (PID2022-137889OB-I00), UE (PID2022-137889OB-I00), UMH-GVA, ref. SOLCIF 2022/0005 (COD. 11-134-4-2023-0133).

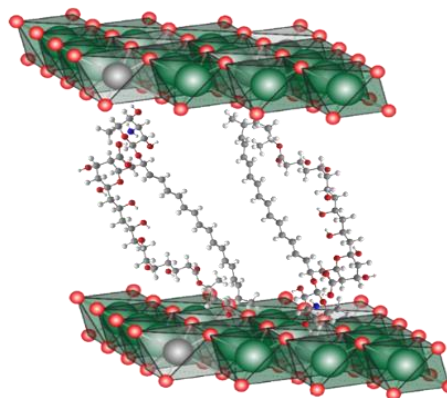


Figura 1. Representación esquemática de la incorporación de AmB en el espacio interlaminar de LDH, adaptada de [2].

Magnetic Nanofluids for Power-to-Heat Applications

Breogán Pato-Doldán¹, Jorge Estébanez², Pelayo García Acevedo^{2,3}, Yolanda Piñeiro^{2,3}, Manuel Juncosa-Gallardo¹, Marlory Isaza-Ruiz¹, José Javier Saiz Garitaonandia⁴, José Rivas^{2,3}, Javier Díez-Sierra¹, Claudia Gómez-Aguirre¹

¹ CIIAE-Centro Ibérico de Investigación en Almacenamiento Energético, Avda. de la Universidad, s/n, 10003 Cáceres, España. breogan.pato@ciiiae.org

² Laboratorio NANOMAG, Departamento de Física Aplicada, iMATUS, Universidade de Santiago de Compostela, España.

³ Instituto de Investigación Sanitaria (IDIS), Santiago de Compostela, España.

⁴ Dpto. Física Aplicada II, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco, Barrio Sarriena s/n, 48940 Leioa, España.

The integration of renewable energy sources requires new technologies capable of efficiently converting electricity into heat (Power-to-Heat, P2H) and storing it with minimal losses. Compared with conventional resistive heating, an innovative strategy based on magnetic hyperthermia and the use of nanofluids [1,2] as active media aims to minimize thermal gradients, reduce fluid degradation, and improve the efficiency of thermal energy storage systems.

To validate this strategy, a nanofluid based on superparamagnetic Fe₃O₄ nanoparticles dispersed in Helisol®, a commercial heat transfer fluid, was developed [3]. The suspension showed good colloidal stability and was evaluated under different alternating magnetic field conditions.

The nanofluid generated heat efficiently and reproducibly under an alternating magnetic field, retaining approximately 90% of its initial heating performance after several weeks. These results demonstrate high operational robustness and position the system as a promising candidate for Power-to-Heat technologies based on the direct conversion of electricity into heat through alternating magnetic fields.

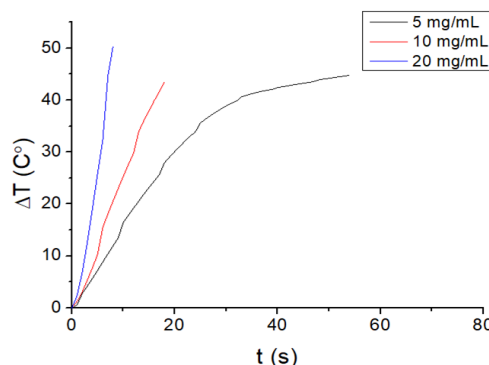


Figure 1.- Time evolution of the temperature during magnetic hyperthermia experiments performed with nanoparticle concentrations of $C = 5, 10$, and $20 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$. For the highest nanoparticle concentration ($20 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$), a temperature rise of 50°C was achieved in less than 10 s.

Acknowledgments. Funded by the Spanish State Research Agency (AEI), HOLMES project, PID2023-150379OB-C22.

References

- [1] R. E. Rosensweig, *J. Magn. Magn. Mater.*, **2002**, 252, 370-374.
- [2] M. D. Nguyen, H. V. Tran, S. Xu, T. R. Lee, *Appl. Sci.*, **2021**, 11, 11301.
- [3] J. Estebanez, P. García-Acevedo, M. Isaza-Ruiz, J. Díez-Sierra, C. Gómez-Aguirre, B. Pato-Doldán, J. J. Saiz Garitaonandia, Y. Piñeiro, & J. Rivas, *Magnetic hyperthermia in Fe₃O₄/HELISOL® nanofluids: A new route for power-to-heat and thermal energy storage applications*. **2026**. Under review. SSRN. <https://doi.org/10.2139/ssrn.6682220>

Laser-triggered reactions between solids

J. Frechilla¹, A. Lahlahi-Attalhaoui², E. Martínez¹, L. A. Angurel¹, J. B. Carda², G. F. de la Fuente¹

¹ INMA (CSIC-Universidad de Zaragoza), María de Luna, 3 50018 Zaragoza, german.delafuente.leis@csic.es

² Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Universitat Jaume I, 12071, Castelló

Traditional solid-state synthesis of high-melting-point oxides is frequently hampered by extreme thermal requirements, excessively long processing times, and, in many cases, contamination arising from multiple milling, pelletising, sintering in contact with physical support media, crushing and repeating the latter steps. Laser induced reactivity between solids offers a transformative approach which enables searching for new phases within the "Energy Landscape of solids" proposed by Schön and Jansen [1]. These reactions may be carried out, for example, in a Laser Induced Zone Melting process [2], where the most critical parameter is usually the solidification rate. The latter enables control of structural order and, in many cases provides conditions for the stabilization of metastable phases [3]. Although the Laser Floating Zone method was originally employed to grow high purity single crystals, this was later applied to other functional textured polycrystalline oxides, such as high T_c superconductors, refractory ceramic eutectics, and other functional materials, with excellent results [4]. Most recent examples also include an interesting variation of the method applicable to reactions between solids in cold crucibles [5-6], where completion of the reaction takes place in minutes. Highlights of the evolution of this attractive synthetic method, from its origins in crystal growth, through texture and structural order control, and the synthetic approach just described, will be briefly discussed.

Acknowledgements.

Projects MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (PID2020-113034RB-I00), MCIN/AEI/(CPP2022-009956), PID2023-146041OB-C21 (funded by MICIU/AEI/10.13039/501100011033 and ERDF/EU) and Gobierno de Aragón (Research group T54_23R). Cátedra de Innovación Cerámica 'Ciutat de Vila-real' (Universitat Jaume I), IVACE (INNEST/2024/420, INNCAD/2025/9), and MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (TED2021-130963B-C22, PID2020-116149GB-I00, PID2020-116719RB-C43).

Referencias

- [1] J. C. Schön, M. Jansen, *Angewandte Chemie International Edition* **1996**, 35, 1286-1304.
- [2] W. G. Pfann, *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers* **1952**, 194, 747-753.
- [3] R. C. De Mattei, R. S. Feigelson, *Journal of Crystal Growth* **1985**, 71, 1-11.
- [4] M. Mora, J. C. Díez, C. I. López-Gascón, E. Martínez, G. de la Fuente **2003**, *IEEE Trans. Appl. Supercon* 13, 3188-3191.
- [5] I. de Francisco, J. A. Bea, A. Vegas, J. B. Carda, G. F. de la Fuente **2015**, *Acta Cryst. B* 71, 95-111.
- [6] V. V. Lennikov, A. Gómez-Herrero, L. A. Angurel, G. F. De la Fuente, L. C. Otero **2024**, *Z. Anorg. Allg. Chem.* 650, e202400078.

Hidrocalumita y compuestos tipo hidrocalumita: Un tipo especial de hidróxido doble laminar

M.A. Vicente¹, A. Jiménez¹, P. Rodríguez–Miguel¹, A. Misol¹, R. Trujillano¹, V. Rives¹, A. Gil²

¹ GIR–QUESCAT, Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Salamanca, 37008 Salamanca. mavicente@usal.es

² INAMAT2, Departamento de Ciencias, Universidad Pública de Navarra, 31006 Pamplona.

Los hidróxidos dobles laminares (HDL), constituyen una familia de materiales de gran versatilidad con aplicaciones consolidadas en catálisis heterogénea, industria química y procesos de remediación ambiental [1]. Dentro de este grupo, la hidrocalumita (un LDH basado en cationes Ca^{2+} y Al^{3+}) es uno de los miembros más singulares desde el punto de vista cristalquímico, presentando diferencias estructurales significativas respecto a los sistemas convencionales de Mg^{2+} - Al^{3+} (hidrotalcita) [2]. En este trabajo se expone una revisión crítica del estado del arte de los compuestos tipo hidrocalumita, evaluando de forma comparativa sus principales rutas de síntesis y sus características distintivas de otros HDL [3]. Se analiza cómo la calcinación controlada de estos precursores laminares conduce a la formación de óxidos metálicos mixtos (OMM) con potenciales aplicaciones en catálisis y fotocatalisis heterogénea, así como en procesos de adsorción [3]. Estas potenciales aplicaciones han sido estudiadas en procesos de descontaminación de aguas y de captura de CO_2 . Finalmente, cabe destacar que estos compuestos pueden ser preparados a partir de residuos industriales, tales como las escorias salinas generadas durante la producción secundaria de aluminio [3].



Esquema 1. Resumen gráfico del trabajo.

Agradecimiento: Agencia Estatal de Investigación - PID2023-146935OB-C21 y PID2023-146935OB-C22.

Referencias

- [1] F. Cavani, F. Trifiro, A. Vaccari, *Catal. Today* **1991**, 11, 173 – 301.
- [2] V. Rives (Ed.), *Layered Double Hydroxides: Present and Future*, Nova Science Publishers, New York, **2001**.
- [3] A. Jiménez, R. Trujillano, A. Gil, V. Rives, M.A. Vicente, *Appl. Clay Sci.* **2025**, 267, 107707.

Revealing the Structural and Electronic Dynamics of Pd(Ag)-Fe_{3-δ}O₄ Catalysts during Deactivation for Low Temperature Partial Oxidation of Methane

Marta Alonso Gómez¹, Elena Montejano-Nares¹, Esther Asedegbega-Nieto¹, Benjamín Solsona², Ruth Sanchis², José M. Conesa³, Francisco Ivars-Barceló¹

¹ Dept. Química Inorgánica y Química Técnica, UNED, Las Rozas, 28232 Madrid, marta.alonso@ccia.uned.es

² Dept. de Ingeniería Química, Universitat de València, C/Dr. Moliner 50, Burjassot, 46100 Valencia, Spain

³ Instituto de Catálisis y Petroleoquímica (ICP-CSIC), C/ Marie Curie, 2, Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain

Methane (CH₄) functionalization is attractive for its abundance; however, its direct partial oxidation to valuable products such as formaldehyde remains challenging because of the strong C–H bond and the tendency for complete oxidation at high temperatures [1]. Achieving this goal requires a fundamental understanding of active catalytic sites and reaction mechanisms to design optimized materials with improved performance. In this study, a multi-technique approach was used to investigate Pd(Ag)-Fe_{3-δ}O₄ nanocomposite catalysts for low-temperature methane partial oxidation. By combining in situ characterization techniques including XAS, GI-XRD, XPS, STEM, EDX, EELS and XES, new insights are gained into the electronic and structural evolution of the catalyst atoms under reaction conditions. High catalytic activities were obtained at 250 and 300 °C (ca. 1.5 and 6 molCH₄ kgcat⁻¹ h⁻¹, respectively) with formaldehyde selectivity (>95%). Catalyst deactivation was found and associated with lattice contraction due to iron oxidation, Pd (and Ag) migration from interstitial sites, and Pd reduction and agglomeration. Although Ag had little effect at 300 °C, the PdAg catalyst exhibited less Pd agglomeration at 250 °C, consistent with its previously reported higher catalytic activity under these conditions [2].

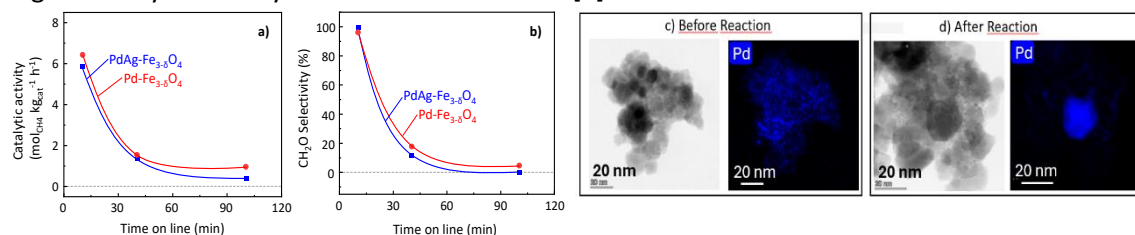


Figure 1. Catalytic activity and selectivity. STEM-HAADF micrographs and STEM-EDX elemental mapping.

References

- [1] M.J.G. Fait, A. Ricci, M. Holena, J. Rabeah, M.-M. Pohl, D. Linke, E.V. Kondratenko, *Catal Sci Technol* **9**, **2019**, 5111–5121.
- [2] B. Martínez-Navarro, R. Sanchis, E. Asedegbega-Nieto, B. Solsona, F. Ivars-Barceló, *Nanomaterials* **10**, **2020**.

Acknowledgments

This work was supported by the Spanish Agencia Estatal de Investigación (AEI) through different actions: the “Ramón y Cajal” excellence program grant (ref.: RYC2020-029470-I/AEI/10.13039/501100011033), the “Consolidación Investigadora” excellence program Next Generation grant (ref.: CNS2022-136177), and the grant for “Proyectos de generación de conocimiento...” (ref. PID2024-163101OB-I00).

Structural and Electronic Dynamics of Pd(Ag)-Fe_{3-δ}O₄ Catalysts during the Direct Conversion of CH₄ and CO₂ into C₂ Oxygenates

Marta Alonso Gómez¹, Elena Montejano-Nares¹, Esther Asedegbega-Nieto¹, José M. Conesa²,
Francisco Ivars-Barceló¹

¹ Dept. Química Inorgánica y Química Técnica, UNED, Las Rozas, 28232 Madrid, franciscoivars@ccia.uned.es

² Instituto de Catálisis y Petroleoquímica (ICP-CSIC), C/ Marie Curie, 2, Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain

Rising atmospheric CH₄ and CO₂ drive climate change, making their catalytic conversion to value-added chemicals an environmental and chemical priority. However, no direct industrial process exists for their simultaneous conversion to oxygenated hydrocarbons. Plasma methods suffer from poor selectivity, while heterogeneous thermocatalysis has mainly yielded acetic acid [1]. Recently, we reported and patented the first direct CH₄/CO₂ conversion to multicarbon oxygenates [2]. In this work, Pd(Ag)-Fe_{3-δ}O₄ nanocomposites are shown to be active for direct CH₄/CO₂ coupling at 250 °C and ambient pressure, producing mainly ethanol and acetic acid while avoiding syngas formation. Peak methane conversions of 10% and 6% were achieved over Pd-Fe_{3-δ}O₄ and PdAg-Fe_{3-δ}O₄, respectively. To unveil the origin of activity and deactivation, in situ characterization techniques including NAP-XPS, GI-XRD and XAS were applied. This approach revealed the main factors responsible for activity loss: progressive PdO reduction under reaction conditions, particularly in the Ag-containing catalyst; Pd agglomeration from 200 °C onward, reducing metal dispersion in both the bulk and surface; and iron oxide lattice contraction above 250 °C, associated with subtle Fe oxidation and Pd withdrawal from interstitial sites. Mitigating these concurrent processes is essential to unlocking the full potential of Pd(Ag)-Fe_{3-δ}O₄ systems for C₂ oxygenate production in low-temperature CH₄/CO₂ coupling.

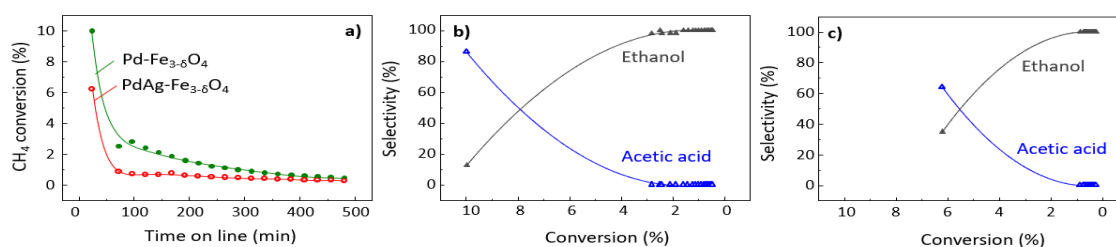


Figure 1. Evolution of CH₄ conversion with time over Pd-Fe_{3-δ}O₄ (●) and PdAg-Fe_{3-δ}O₄ (○) catalysts (a); and selectivity to ethanol (▲) and acetic acid (Δ), respectively.

References

- [1] X. Nie, X. Ren, C. Tu, C. Song, X. Guo, J.G. Chen, *Chem Commun* 56, **2020**, 3983–3986.
- [2] F. Ivars-Barceló, B. Martínez-Navarro, E. Asedegbega-Nieto, E. Montejano-Nares, *Patent ES 2933754*, **2023**.

Acknowledgments

This work was supported by the Spanish Agencia Estatal de Investigación (AEI) through different actions: the “Ramón y Cajal” excellence program grant (ref.: RYC2020-029470-I/AEI/10.13039/501100011033), the “Consolidación Investigadora” excellence program Next Generation grant (ref.: CNS2022-136177), and the grant for “Proyectos de generación de conocimiento...” (ref. PID2024-163101OB-I00).

In Situ Formation of Pigment Phases in Glassy Matrix Films via Laser Zone Melting

Abderrahim Lahlahi-Attalhaoui¹, Santiago Luis Toca Valero¹, Germán F. de la Fuente²,
Juan Bautista Carda¹

¹ Department of Inorganic and Organic Chemistry, Universitat Jaume I, Castellón de la Plana, Spain, alahlahi@uji.es

² Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (CSIC-Universidad de Zaragoza), Zaragoza, Spain

Doped cobalt ferrites (CFO, CoFe_2O_4) are black pigments of considerable interest in ceramic systems, although their conventional production requires high-temperature calcination followed by milling to control particle size. In this work, laser zone melting (LZM) is proposed as an alternative route for the in situ formation and consolidation of CFO spinels directly on the surface, avoiding both pre-synthesis and post-micronization. A precursor layer prepared from milled powders was activated using a high-power nanosecond fiber laser. Irradiance and pulse overlap were systematically varied, identifying an optimal processing window at $O_p \approx 97\%$, with a scanning speed of 2,000 mm/s and an irradiance of 3.49 MW/cm². The resulting coatings exhibited a single-phase spinel, ~ 200 nm particles embedded in a vitreous matrix, and L^* values as low as 30.55. These findings highlight LZM as a promising route toward ceramic industry electrification and decarbonization.

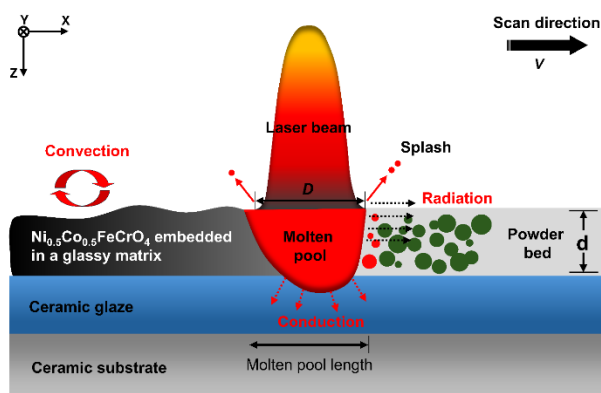


Figure 1. Diagram of the interaction between the laser beam and the powder bed during $\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{FeCrO}_4$ formation.

Acknowledgements.

Cátedra de Innovación Cerámica (Ciutat de Vila-real); (Universitat Jaume I), IVACE (INNEST/2024/420, INNCAD/2025/9), and MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (TED2021-130963B-C22, PID2020-116149GB-I00, PID2020-116719RB-C43).

Projects MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (PID2020-113034RB-I00), MCIN/AEI/(CPP2022-009956), Gobierno de Aragón (Research group T54_23R).

Referencias

- [1] V. V. Lennikov, A. Gómez-Herrero, L. A. Angurel, G. F. de la Fuente, and L. C. Otero-Díaz, Direct Laser Synthesis of Fe_2O_3 Modified TiO_2 , *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 650 (20), e202400078, 2024. <https://doi.org/10.1002/zaac.202400078>.
- [2] M. Mora, F. Gimeno, L. A. Angurel, and G. F. de la Fuente, Laser zone melted $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ thick films on (100) MgO substrate, *Supercond. Sci. Technol.*, 17 (10), 1133–1139, 2004. <https://doi.org/10.1088/0953-2048/17/10/008>.

Diseño de catalizadores selectivos Co@NC para la conversión de CO₂ en CO vía RWGS

A. Rodríguez-Carrillo¹, M. Mercedes Pastor-Blas¹, A. Sepúlveda-Escribano¹

¹ Universidad de Alicante, Departamento de Química Inorgánica – Instituto Universitario de Materiales de Alicante (IUMA).
aymara.rodriguez@ua.es

La reacción de desplazamiento inverso del gas de agua (RWGS) constituye una etapa crucial para la conversión de CO₂ a CO, un intermediario fundamental en procesos como la síntesis de metanol y de Fischer–Tropsch ^[1]. No obstante, la viabilidad industrial de la RWGS se encuentra severamente limitada por la competencia termodinámica de la reacción paralela de Sabatier. Para superar estas restricciones cinéticas y forzar una selectividad total hacia el CO, los soportes de carbono dopados con heteroátomos de nitrógeno (**NC**) emergen como una alternativa sobresaliente gracias a su capacidad para generar sitios ricos en electrones que promueven interacciones fuertes M–N_x ^[2]. En este estudio, para alcanzar una alta dispersión de las partículas de cobalto y minimizar su tamaño en un soporte NC, previamente sintetizado, se llevó a cabo una ruta de síntesis que combina la impregnación húmeda seguida de un tratamiento térmico en dos pasos guiado por un diseño experimental Taguchi L9 (3⁴). El desempeño catalítico de los catalizadores, denominados **Co@NC 1-9**, se evaluó en un rango de temperatura de 450-600 °C a flujo continuo de una mezcla de H₂/CO₂/He (relación molar 4:1, caudal total: 100 mL/min) utilizando una carga de catalizador de 50 mg. Como resultado del diseño, se determinó que una carga metálica de 10 % p/p de Co, acoplada a una temperatura de recocido moderada (T₂ = 450 °C) y un tiempo de sonicación de 60 min, constituye una ruta de síntesis que permite preservar los sitios de anclaje de nitrógeno piridínico y estabilizar clústeres de Co altamente dispersos de ~1.07 nm. El análisis XPS confirmó fuertes interacciones metal-soporte a través de la preservación de especies de N piridínico y la estabilización de múltiples estados de oxidación de cobalto (Co²⁺, Co³⁺ y Co⁰). En general, los catalizadores muestran un aumento en la conversión de CO₂ con la temperatura y una selectividad hacia el CO. El catalizador **Co@NC9** fue el catalizador más activo, alcanzando aproximadamente un 65% de conversión a 600 °C y mostrando un rendimiento notable a temperaturas más bajas y una selectividad hacia CO cercana al 100 %. Además, exhibió un aumento progresivo en la conversión de CO₂ durante la prueba de estabilidad de 72 h a pesar del crecimiento significativo de partículas (~19 nm después de la reacción). Este comportamiento sugiere que la actividad de RWGS puede depender no solo de la dispersión máxima de cobalto, sino también de la reestructuración estructural y electrónica dinámica bajo las condiciones de reacción.

Referencias

- [1] M. González-Castaño, B. Dorneanu, H. Arellano-García. Reaction Chemistry and Engineering 6 (2021) 954-976
- [2] Y. Li, Z. Zhao, W. Lu, H. Zhu Applied Catalysis B: Environmental 324 (2023) 122298

COMUNICACIONES ORAL-FLASH

Encapsulamiento de tetradecilamina en MgO mediante prensado uniaxial para almacenamiento de energía térmica

C. Aguirado¹, S. Rea², Y. E. Milián¹, P. M. Vilarinho²

¹ Departamento de almacenamiento de energía térmica, Centro Ibérico de Investigación en almacenamiento energético (CIIAE), Polígono 13, Parcela 31, "El Cuartillo", 10004 Cáceres (Extremadura), España, cristina.aguirado@ciiae.org

² Departamento de Engenharia de Materiais e Cerâmica, CICECO – Aveiro Institute of Materials, Universidade de Aveiro, Campus Santiago, 3810-193 Aveiro, Portugal

Los materiales de cambio de fase (PCMs) para almacenamiento de energía térmica (TES) presentan como principal inconveniente la fuga del PCM durante la transición sólido-líquido, lo que limita su aplicación práctica [1]. En este trabajo se desarrollaron materiales compuestos estabilizados en forma (SS-PCMs) basados en la encapsulación de tetradecilamina (TDA) en una matriz cerámica de MgO con el objetivo principal de prevenir la fuga de la TDA durante la fusión, mediante prensado uniaxial aplicando 250 MPa durante 10 min a temperatura ambiente. Se emplearon relaciones en peso TDA:MgO de 2:8, 4:6, 6:4 y 8:2 para determinar la máxima cantidad de TDA que puede retener la matriz de MgO. La estabilidad química de la TDA tras el encapsulamiento se confirmó mediante espectroscopia IR y difracción de rayos X,

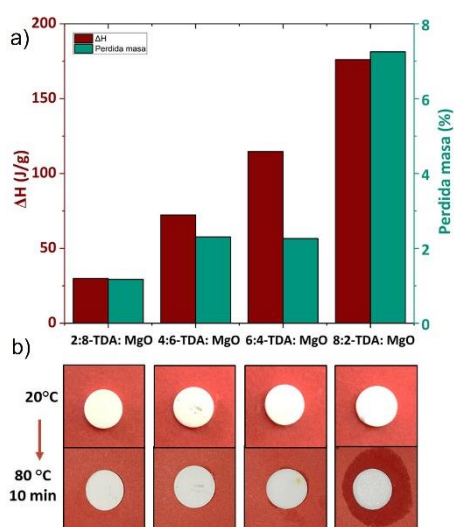


Figura 1. a) Calor latente (ΔH) y b) pérdida de masa tras el ensayo de fugas de los SS-PCMs.

aunque se observaron ligeros cambios en su cristalinidad asociados al tratamiento mecánico. Asimismo, el análisis BET mostró que el MgO presentó una estructura mesoporosa con diámetros de poro entre 18 y 21 nm, favoreciendo la retención del PCM mediante fuerzas capilares [2]. Los resultados térmicos mostraron que la entalpía de fusión aumentó progresivamente con el contenido de TDA, alcanzando un valor máximo de 176.11 J/g para la muestra 8:2-TDA:MgO (Fig. 1a). Las temperaturas de cambio de fase se mantuvieron próximas a las de la TDA pura (~ 36 °C). Las muestras 2:8, 4:6 y 6:4-TDA:MgO no presentaron fugas visibles (Fig. 1b) tras el calentamiento hasta 80 °C (por debajo del 2%, Fig. 1a), mientras que la muestra 8:2-TDA:MgO reveló pérdidas visibles (Fig. 1b) menores a 10%. Estos resultados fueron consistentes con estudios previos

basados en aminas grasas confinadas en matrices porosas para almacenamiento de energía térmica [3]. Los resultados demuestran que el MgO actúa como una matriz cerámica efectiva para minimizar la fuga de TDA, permitiendo obtener SS-PCMs con buena estabilidad del encapsulado y una adecuada capacidad térmica para aplicaciones a baja temperatura.

Referencias

- [1] Z. Jiang, A. Palacios, B. Zou, Y. Zhao, W. Deng, X. Zhang, Y. Ding, *Renew. Sustain. Energy Rev.*, **2022**, 159, 112134
- [2] Y. Hao, X. Shao, T. Liu, B. Li, S. Nie, *Thermochim. Acta.*, **2015**, 604, 45–51.
- [3] X. Cao, S. Wu, L. Yang, J. Cui, C. Wang, A. Li, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.*, **2021**, 225, 111035.

Agradecimientos: Financiado por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades y por la Junta de Extremadura, a través de la Unidad CIIAE.

Na₂SO₄·10H₂O para regulación térmica en biodigestores. Efecto de aditivos orgánicos en la segregación de fase

M. Aretio¹, C. Aguirado¹, Y. E. Milián¹, B. Pato¹, M. D. Robustillo²

¹ Departamento de almacenamiento de energía térmica, Centro Ibérico de Investigación en Almacenamiento Energético (CIIAE), Polígono 13, Parcela 31, "El Cuartillo", 10004 Cáceres (Extremadura), España, miguel.aretio@ciiae.org

² Departamento de Ingeniería Química Industrial y Medio Ambiente. Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales. Universidad Politécnica de Madrid, José Gutiérrez Abascal 2, 28006 Madrid, España

El sulfato de sodio decahidratado (SSD) o sal de Glauber es un material de cambio de fase (PCM) de bajo coste y elevada capacidad de almacenamiento térmico, con temperatura de fusión cerca de 36.1 °C apta para incrementar la eficiencia de producción de biogás, aunque su aplicación se ve limitada por la fusión incongruente, que provoca segregación de fases [1]. En este trabajo se evaluó el efecto de varios aditivos: quitosano, carboximetilcelulosa (CMC) y

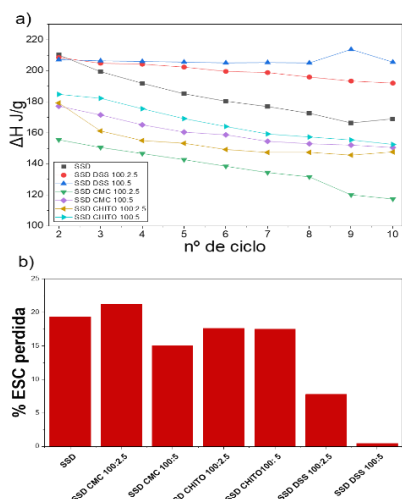


Figura 2. a) Calor latente y b) pérdida de ESC de la sal pura y de las mezclas tras 10 ciclos de calentamiento-enfriamiento.

dodecil sulfato sódico (DSS) sobre la estabilidad térmica de la sal de Glauber como PCM, empleando dos proporciones de mezcla (100:5 y 100:2.5) y ciclos sucesivos de calentamiento-enfriamiento en el rango de -40 a 60 °C. La compatibilidad entre los componentes se estudió mediante espectroscopía infrarroja (FTIR) y difracción de rayos X (DRX), mientras que las propiedades térmicas se evaluaron empleando calorimetría diferencial de barrido (DSC). La conservación de las bandas características en los espectros FTIR y la ausencia de nuevas fases cristalinas en los difractogramas indicaron que la incorporación de los aditivos no produjo reacciones químicas relevantes. Los ensayos mediante DSC mostraron que las formulaciones con CMC y quitosano experimentaron una disminución notable de la entalpía durante el ciclado, con pérdidas de capacidad de almacenamiento energético (ESC) comparables a las observadas para la sal pura. En cambio, las mezclas con DSS presentaron una mayor estabilidad térmica, destacando la formulación SSD/DSS 100:5, que mantuvo una entalpía cercana a 208 J/g tras 10 ciclos (Fig. 1a) y registró la menor pérdida de ESC, del 0,48 % (Fig. 1b). Estos resultados señalan al DSS como el aditivo más eficaz entre los estudiados para mejorar la estabilidad térmica de la sal de Glauber frente a la segregación de fases en ciclos sucesivos de calentamiento-enfriamiento, favoreciendo su aplicación como PCM en el control térmico de biodigestores.

Referencias

[1] V. Ayyagari, A. Shooshtari, M. Ohadi, *Materials*, 2025, 18, 2998.

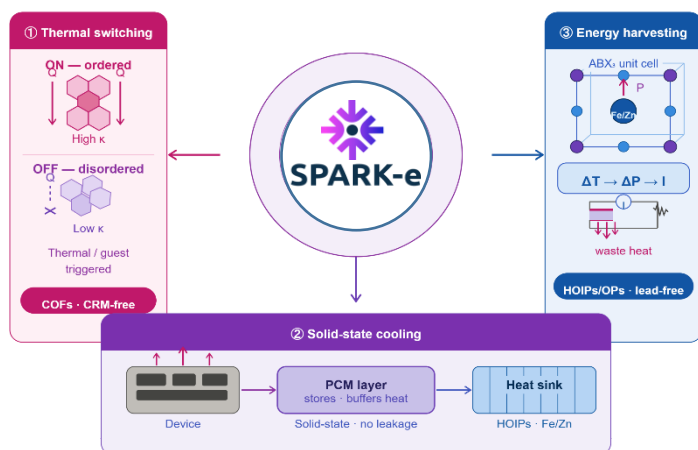
Agradecimientos: Proyecto IBES 2024. Ayudas a grupos de investigación 2024. Grupo FQM030. Expediente GR24184. Actividad cofinanciada al 85 % por la Unión Europea. Fondo Europeo de Desarrollo Regional y Junta de Extremadura. Autoridad de Gestión Ministerio de Hacienda.

Overview of SPARK-e: Solid-State PCMs for Advanced Energy Recovery and Key Thermal Control in Electronics

M. Molina-Muriel¹, A. Abdellattef¹, B. Pato-Doldán¹, Rubén Ramos-Velarde¹, Kashif Mushtaq¹, Aleksandr Shkatulov¹, C. Gómez-Aguirre¹

¹Thermal Energy Storage Department, Iberian Centre for Research in Energy Storage, Polígono 13, Parcela 31, Cuartillo, 10004, Caceres, Spain, manuel.molina@ciiae.org

The relentless miniaturization of electronic components, driven by Moore's Law, is approaching a fundamental physical barrier: heat. As transistor density increases, heat generation per unit area rises accordingly, causing thermal throttling — where devices reduce performance to avoid overheating — along with increased energy losses and shortened device lifetimes. With billions of devices worldwide, addressing this thermal wall at the materials level — designing novel functional materials capable of managing heat at the nanoscale — is a prerequisite for the continuation of computational progress. Solid-state phase change materials (PCMs) stand out as a promising technology to address this challenge, offering both efficient heat dissipation, and opportunities for pyroelectric energy harvesting. Unlike conventional solid-liquid PCMs, solid-state PCMs exhibit negligible volume changes, reduced manufacturing pollution, and longer operational lifetimes, making them ideal candidates for integration into thermal management systems. Within this context, SPARK-e — a European Innovation Council (EIC)-funded project — proposes the design and characterization of hybrid organic-inorganic perovskites (HOIPs) incorporating non-critical metals (such as Fe or Zn), fully organic perovskites, and covalent organic frameworks (COFs), as greener and strategically viable alternatives for wide implementation in electronic devices. The project, led by a multidisciplinary consortium of 10 partners from 7 countries, targets TRL-4 (proof of concept) by 2029 and pursues three main innovation pathways:



- (1) Novel COFs as stimuli-responsive thermal switches for enhanced heat dissipation.
- (2) Solid-state PCMs for enhanced thermal regulation in electronic components.
- (3) Harnessing organic and hybrid perovskite-based PCMs for pyroelectric energy harvesting.

Funded by the European Union. Views and opinions expressed are however those of the author(s) only and do not necessarily reflect those of the European Union or the European Innovation Council and SMEs Executive Agency (EISMEA). Neither the European Union nor the granting authority can be held responsible for them.

Diseño de Nanocomposites de ZnAl-LDH/rGO para Procesos Combinados de Adsorción-Fotocatálisis en la Eliminación de Contaminantes Emergentes en Medios Acuosos

J. F. Romero^{1,2}, E. López-Maya¹, M. G. Álvarez¹

¹ Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Salamanca, grupo GIR-QUESCAT, Pl. Caídos, s/n, 37008, Salamanca, España.

² Universitat Rovira i Virgili, Departament d'Enginyeria Química, Av. Països Catalans, 26, Tarragona, 43007, Spain.
 jorge.fernandez@urv.cat

La creciente presencia de contaminantes emergentes en los recursos hídricos representa un desafío medioambiental crítico debido a su persistencia y ecotoxicidad. Los procesos de oxidación avanzada (POAs), y en particular la fotocatalisis heterogénea, emergen como alternativas eficientes para su remoción [1]. En este contexto, los hidróxidos dobles laminares (LDHs, de sus siglas en inglés *Layered Double Hydroxides*) despiertan un enorme interés por sus características estructurales, su inherente facilidad de síntesis y amplia versatilidad de composición [2]. Debido a su papel multifacético permiten su aplicación como adsorbentes y fotocatalizadores, pudiendo potenciarse sus cualidades mediante la hibridación con grafeno [3].

En este trabajo se reporta el diseño y optimización de materiales híbridos basados en matrices de ZnAl-LDH acopladas sinérgicamente con óxido de grafeno reducido (rGO). La síntesis de la fase laminar hidrotalcita se llevó a cabo mediante el método de coprecipitación con una relación molar fija Zn^{2+}/Al^{3+} de 4. La hibridación *in situ* con láminas de óxido de grafeno (GO), obtenidas previamente a través del método de Hummers-Offeman, se llevó a cabo con relaciones nominales de peso LDH/rGO de 20:1, 10:1 y 5:1.

Los ensayos catalíticos confirmaron la alta eficiencia de los híbridos calcinados en la eliminación de ibuprofeno, con remociones cercanas al 90% (Tabla 1). Se observa un comportamiento sinérgico, donde a menor contenido de rGO (20:1) domina la adsorción previa, mientras que al aumentar la presencia de rGO (10:1 y 5:1) la adsorción decae, pero se potencia la fotocatalisis. Esto se atribuye a que el rGO disminuye la recombinación electrón-hueco, demostrando el potencial de estos nanocomposites en remediación ambiental.

Tabla 1. Resultados más relevantes de las diferentes pruebas de adsorción y fotocatalisis.

Muestra	Masa muestra (g)	[IBP] ₀ (ppm)	IBP adsorbido (%)	IBP fotocatalizado (%)	IBP total eliminado (%)	IBP _{T.E} /cat (mg/g) ^a
Zn:Al-G(20:1)c	0,2515	49,05	68,19	22,86	91,04	133,18
Zn:Al-G(10:1)c	0,2501	49,03	36,63	51,61	88,24	129,73
Zn:Al-G(5:1)c	0,2526	50,18	34,67	54,60	89,27	132,94

^a miligramos totales de ibuprofeno eliminado (adsorbido y fotocatalizado) por gramo de catalizador.

Referencias

- [1] L. Santamaría, M. A. Vicente, S. A. Korili, A. Gil, J. Environ. Chem. Eng., 2020, 8, 104577.
- [2] R. Trujillano, F. M. Labajos, V. Rives, Appl. Clay Sci., 2023, 238, 106927.
- [3] M. G. Álvarez, D. Tichit, F. Medina, J. Llorca, Appl. Surf. Sci., 2017, 396, 821-831.

Elucidating the Structure–Activity Relationships of Ni@MgAl and Co@MgAl Anionic Clay Catalysts for Hydrogen Production via Dry Reforming of Methane

Zoulikha Abdelsadek^{1,2}, Juan P. Holgado³, Ewa Rząd⁴, Klaudia Dyùek⁴, Patrick J. Masset^{4,5}

¹ *Institute of Electrical and Electronics Engineering, University of M'hamed-Bougara, Independence Avenue, 35000, Boumerdès, Algeria.*

² *Laboratory of Sciences of Materials and Chemical Processes (LSMPC), USTHB, B.P. 32 El-Alia, 16111 Bab-Ezzouar, Algeria*

³ *Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla, C. S. I. C.-Universidad de Sevilla, Av. Américo Vespucio, 49, 41092, Seville, Spain. jp.holgado@csic.es*

⁴ *Lukasiewicz Research Network – Krakow Institute of Technology, ul. Zakopiańska 73, 30-418 Kraków, Poland*

⁵ *Technallium Engineering and Consulting, Fliederweg 6, 92449 Steinberg Am See, Germany*

In the present work, Ni- and Co-based hydrotalcite-derived catalysts (Ni@MgAl and Co@MgAl, in which Ni and Co are incorporated into the MgAl anionic clay matrix) were prepared by the solid-phase crystallization (SPC) method under basic conditions (pH = 11). The samples were calcined at a relatively low temperature of 450 °C for 6 h and subsequently reduced under H₂ at 700 °C for 1 h in order to generate the active metallic phases Ni⁰ and Co⁰ in the Ni@MgAl and Co@MgAl catalysts, respectively.

To investigate their structural, textural, physical, and chemical properties, the prepared samples were characterized using atomic absorption spectroscopy (AAS), X-ray diffraction (XRD), Brunauer–Emmett–Teller (BET) surface area analysis, Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), thermogravimetric and differential thermal analyses (TGA/DTA), Transmission and Scanning electron microscopy (TEM-SEM), X-Ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) and H₂ temperature-programmed reduction (H₂-TPR).

The catalysts were subsequently evaluated in the dry reforming of methane (DRM) at a reaction temperature of 700 °C with a heating rate of 4 °C.min⁻¹.

The characterization results demonstrated that both Ni- and Co-based hydrotalcite catalysts exhibited favorable structural, textural, and chemical properties. However, the catalytic tests revealed that the Ni@MgAl catalyst displayed superior performance in hydrogen production, which can be attributed to the presence of the active Ni⁰ phase, its high specific surface area, enhanced basicity, and the good dispersion of the nickel species.

In contrast, the Co@MgAl catalyst showed no catalytic activity under the investigated conditions, which is believed to be due to the absence of an active metallic cobalt phase.

Keywords: anionic clay, hydrogen, greenhouse gases, NiO, CoO, climate change, comparative study, SPC preparation method.

PÓSTER

Tailored porous carbons derived from ZIF-8 for efficient pharmaceutical removal from aqueous media

D.R. Sáenz-García^{1,2}, G. Turnes¹, L.O. Leal², C. Palomino¹

¹Chemistry Department, University of the Balearic Islands, Palma de Mallorca, 07122, Spain. E-mail address: carlos.palomino@uib.es

²Environment and Energy Department, Advanced Materials Research Center (CIMAV) S.C., Chihuahua, 31136, Mexico

The continuous release of pharmaceutical contaminants into aquatic environments represents an increasing environmental challenge due to their persistence, bioactivity, and incomplete elimination in conventional wastewater treatment plants [1]. Adsorption has emerged as one of the most effective and operationally simple strategies for water remediation, particularly when using porous carbon materials with tunable surface chemistry and textural properties. In recent years, metal–organic framework (MOF)-derived carbons have attracted growing interest as advanced adsorbents because their porosity and chemical functionality can be rationally engineered through controlled synthesis and post-treatment processes [2].

In this work, a series of porous carbons derived from ZIF-8 were prepared through thermal carbonization and subsequent surface modifications to investigate the influence of structural and physicochemical properties on pharmaceutical adsorption performance. The materials were extensively characterized by X-ray diffraction, nitrogen physisorption, electron microscopy, XPS, Boehm titration, and contact angle measurements. Ibuprofen was selected as a model pharmaceutical pollutant to assess adsorption behavior under batch conditions.

Among the synthesized materials, the carbon obtained by direct calcination at 1000 °C (C1000ZIF-8) exhibited the best performance, combining high surface area (951 m² g⁻¹) with marked hydrophobicity (contact angle 127°). Adsorption experiments showed a maximum capacity of 62.6 mg g⁻¹, with fast uptake kinetics and strong agreement with the Langmuir and pseudo-second-order models. The adsorbent also demonstrated excellent reusability, maintaining more than 93% of its initial efficiency after ten regeneration cycles. These results support the potential of ZIF-derived porous carbons as efficient and reusable adsorbents for the removal of pharmaceutical contaminants from aqueous media.

The authors acknowledge financial support from the project PID2024–159827OB-I00, funded by the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities, through the State Research Agency MICIU/AEI/10.13039/501100011033/FEDER, EU.

References

- [1] N.S.P. Batucan, L.A. Tremblay, G.L. Northcott, C.D. Mattheaei, *Environ. Adv.*, **2022**, 7, 100164.
- [2] S. Shahzadi, M. Akhtar, M. Arshad, M.H. Ijaz, M.R.S.A. Janjua, *RSC Adv.*, **2024**, 14, 27575.

Valorization of Metallic and Polymeric Residues for the Sustainable Preparation of Metal–Organic Frameworks

D. Ferrera¹, M. del Río¹, C. Palomino¹, G. Turnes¹

¹Department of Chemistry, University of Balearic Islands, Palma de Mallorca, E-07122, Spain. E-mail address: g.turnes@uib.es

The widespread occurrence of emerging contaminants in aquatic environments has become an important environmental challenge due to their persistence, continuous release, and potential risks to ecosystems and human health. These pollutants, which include a broad variety of organic compounds, are frequently detected in wastewater, surface water, and groundwater, even at trace concentrations [1]. Their presence in aquatic systems has raised increasing concern because conventional wastewater treatment plants are often unable to completely remove them, allowing their continuous discharge and accumulation in the environment.

In recent years, advanced porous materials have attracted significant attention as promising platforms for the removal and degradation of emerging contaminants from water. Among them, metal–organic frameworks (MOFs) stand out because of their high porosity, large surface area, and tunable structural and chemical properties, which make them attractive candidates for environmental remediation applications [2]. However, the synthesis of MOFs commonly involves the use of commercial reagents and energy-demanding processes, raising concerns regarding sustainability and large-scale applicability.

In this work, a sustainable and circular-economy-based approach is proposed for the preparation of MOFs using waste-derived precursors obtained from metallic and polymeric residues. The study is focused on optimizing the synthesis conditions in order to obtain highly crystalline materials while reducing the environmental impact associated with their preparation. The prepared MOFs will be characterized using complementary physicochemical techniques to evaluate their crystallinity, morphology, composition, and textural properties. Their potential applicability for the elimination of bisphenol A in water will also be explored, highlighting the valorization of waste as an environmentally friendly strategy for the development of advanced materials for water remediation technologies.

The authors acknowledge financial support from the project PID2024–159827OB-I00, funded by the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities, through the State Research Agency MICIU/AEI/10.13039/501100011033/FEDER, EU.

References

- [1] R. Montes, S. Méndez, J. Cobas, N. Carro, T. Neuparth, N. Alves, M.M. Santos, J.B. Quintana, R. Rodil, *Sci. Tot. Environ.*, **2023**, 885, 163737.
- [2] C. Jeong, M.Z. Ansari, A.H. Anwer, S.H. Kim, A. Nasar, M. Shueb, F. Mashkoor, *Sep. Purif. Technol.*, **2023**, 305, 122416.

Membranas compuestas innovadoras de geopolímero/zeolita/PVA obtenidas mediante electrohilado

M. Schneider^{1,2}, M. Calzado-Delgado³, E. Rodríguez-Castellón², M.O. Guerrero-Pérez³,
 D. Hotza¹, A. DeNoni Junior¹, A. Zrelli⁴, R.F.P.M. Moreira¹

¹Department of Chemical Engineering and Food Engineering, Federal University of Santa Catarina, Florianópolis, Brazil

²Departamento de Química Inorgánica, Instituto Interuniversitario de Investigación en Biorrefinerías I3B, Universidad de Málaga, Málaga, España. E-mail: castellon@uma.es

³Departamento de Ingeniería Química, Escuela de Ingeniería Industrial, Universidad de Málaga, Málaga, España

⁴Research Unit Advanced Materials, Applied Mechanics, Innovative Processes and Environment, UR22ES04, Higher Institute of Applied Sciences and Technology of Gabes (ISSAT), University of Gabes, Gabes, Tunisia

Se fabricaron y caracterizaron sistemáticamente membranas compuestas innovadoras de poli(alcohol vinílico) (PVA)-geopolímero-zeolita 13X mediante electrohilado. La disolución óptima para el electrohilado se preparó mezclando etanol con un 8 % en peso de PVA y un 1 % en peso de polvo inorgánico (geopolímero, zeolita 13X o composites de geopolímero/zeolita con un 20 % o un 30 % en peso de zeolita). La incorporación de los rellenos inorgánicos a la matriz de PVA produjo mejoras significativas en las propiedades térmicas, mecánicas y de adsorción. El TGA mostró una degradación retardada con picos en el DTG que se desplazaron desde 293 °C (MGP) a 313 °C (MZ30), con pérdidas de masa totales entre el 92.7 y el 94.0 %, respectivamente. Las pruebas mecánicas revelaron que el MGP exhibió la mayor resistencia a la tracción (2.81 MPa) y elongación (227.8 %), mientras que el MZ30 presentó una resistencia de 1.72 MPa con una flexibilidad mejorada (62.1 % de deformación) en comparación con el MZ20 (34.9 %). El análisis de fisisorción de nitrógeno a -196 °C indicó áreas superficiales que oscilan entre 2.4 m²/g (MZ) y 24.3 m²/g (MZ30), con diámetros de fibra que abarcan 10.7–44.4 µm. Los estudios de adsorción de gases demostraron que la adsorción de hidrógeno aumentó de 0.01 mmol/g en PVA puro a 0.08 mmol/g en MZ30, y la adsorción de CO mejoró de 0.03 a 0.08 mmol/g. Por el contrario, la adsorción de CO₂ se mantuvo prácticamente sin cambios, con valores entre 0.21 y 0.66 mmol/g, cerca de la de PVA puro (0.66 mmol/g). En la Fig. 1 se muestra una imagen SEM de la muestra MZ30. Estos resultados confirman que, incluso con un bajo contenido de relleno, las membranas híbridas mostraron un rendimiento multifuncional mejorado, lo que las convierte en candidatas prometedoras para procesos de separación, filtración, soportes catalíticos y recubrimientos protectores.

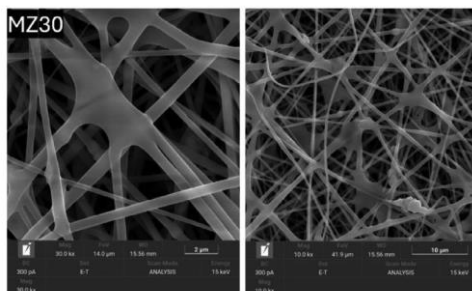


Figura 1. Imagen SEM de la muestra MZ30

Agradecimientos: se agradece el apoyo financiero del proyecto PID2021-126235OB-C32. MCIN/AEI/10.13039/501100011033/ y fondos FEDER, Fundación UNICAJA y Erasmus+ / H2EXCELLENCE.

ZIF-8@COF Composite as a Dual-Selective Adsorbent for Environmental Remediation

M. del Rio¹, G. Turnes¹, C. Palomino¹

¹ Department of Chemistry, University of Balearic Islands, Palma de Mallorca, E-07122, Spain. Email: mateo.delrio@uib.cat

The presence of emerging contaminants (ECs) in aquatic environments poses a growing threat to ecosystems and human health. Conventional water treatment technologies often fail to achieve efficient and selective removal of multiple pollutants simultaneously, highlighting the need for advanced adsorbent materials with tailored properties [1].

Herein, we report the synthesis of a novel composite material integrating ZIF-8 [2], a zeolitic imidazolate framework with well-defined microporous structure and hydrophobic character, with a spherical covalent organic framework (COF). The composite was synthesized via a two-step approach. First, a ZnO dispersion in ethanol was introduced during the COF synthesis [3], allowing the in-situ incorporation of ZnO nanoparticles within the spherical COF matrix. Subsequently, the ZnO precursor was converted into ZIF-8 through a post-synthetic transformation in the presence of 2-methylimidazole, yielding the ZIF-8@COF composite while preserving the structural integrity of the COF framework. The composite was thoroughly characterized by powder X-ray diffraction (PXRD), Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), N₂ adsorption-desorption (BET), transmission electron microscopy (TEM), and thermogravimetric analysis (TGA), confirming the successful integration of both components and the preservation of their individual structural features.

The adsorption performance was evaluated towards ciprofloxacin (CIP), a widely used fluoroquinolone antibiotic, and bisphenol S (BpS), an emerging endocrine-disrupting compound. The composite exhibited selective uptake of CIP by the ZIF-8 component, while BpS was preferentially adsorbed by the COF framework.

These results demonstrate that the rational combination of MOF and COF platforms enables synergistic and selective dual-pollutant removal, offering a promising strategy for the design of next-generation adsorbents in water remediation.

References

- [1] O. M. Rodríguez-Narvaez, J. M. Peralta-Hernandez, A. Goonetilleke, E. R. Bandala, *Chem. Eng. J.*, **2017**, 323, 361-380
- [2] H. Wang, X. Pei, M. J. Kalmutzki, J. Yang, O. M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.*, **2022**, 55, 707-721.
- [3] W. Ma, Q. Zheng, Y. He, G. Li, W. Guo, Z. Lin, L. Zhang, *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, 141, 18271-18277.

A luminescent heteronuclear Eu/Tb molecular sensor for environmental anion monitoring

P. Oreiro-Martínez¹, A. Agrafojo-Parada¹, J. Sanmartín-Matalobos^{1,2}, J. Corredoira-Vázquez^{1,2}, M. Fondo¹

¹ Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Spain, e-mail: jesus.sanmartin@usc.es

² Institute of Materials (iMATUS), Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Spain

Lanthanoid-based luminescent molecular materials have attracted considerable attention as sensors due to their sharp emission bands, long excited-state lifetimes, and high sensitivity to changes in the coordination environment [1]. In particular, hetero-lanthanoid Eu³⁺/Tb³⁺ systems are especially appealing for ratiometric sensing because their characteristic red and green emissions enable self-calibrated responses with enhanced sensitivity and reliability.

Among the different sensing approaches, anion recognition in aqueous media remains a major challenge, given that examples of Ln³⁺ complexes with high selectivity for a target anion are still rare [1,2]. In this context, dual-emissive Eu/Tb molecular platforms provide an attractive strategy for the selective and sensitive detection of potential contaminant anions through modulation of the relative lanthanoid-centered emissions.

Based on these premises, we report a water-soluble Eu/Tb luminescent molecular material and investigate its potential as a ratiometric sensor for anion detection in aqueous media (Figure 1).

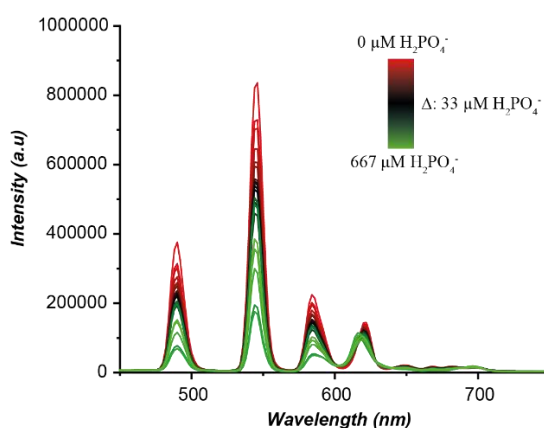


Figure 1.- Variation of the emission spectrum of the mixed Eu/Tb complex with dihydrogen phosphate concentration.

Acknowledgements

This work was supported by project PID2024-155748NB-I00, funded by MICIU/AEI/10.13039/501100011033 and by FEDER, EU, and by project 2025-PU019, funded by Universidade de Santiago de Compostela. J.C.V thanks Xunta de Galicia for his postdoctoral fellowship (ED481D-2025/006). P. O. M. thanks the Spanish Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades for her predoctoral fellowship (FPU23/02925).

References

- [1] S. E. Bodman, S. J. Butler, *Chem. Sci.*, **2021**, *12*, 2716–2734.
- [2] G. Picci, R. Montis, A. M. Gilchrist, P. A. Gale, C. Caltagirone, *Coord. Chem. Rev.*, **2024**, *501*, 215561.

Transporte protónico y química de defectos en niobatos complejos relacionados con la estructura weberita

M. González-Rodríguez¹, S. Bdey¹, Jorge Casanova¹, D. Arenas-Esteban¹, S. N. Savvin², D. Ávila³, A. Mújica⁴, S. Radescu⁴, P. Núñez¹

¹ Departamento de Química, U.D. Química Inorgánica e Instituto de Nanociencia y Nanomateriales, Universidad de La Laguna, 38200 La Laguna, Tenerife, España. pnunez@ull.edu.es

² Institut Laue-Langevin, 71 avenue des Martyrs, CS 20156, 38042 Grenoble Cedex 9, France.

³ Departamento de Química Inorgánica, Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias, s/n, 28040 Madrid, España.

⁴ Departamento de Física, Universidad de La Laguna, 38200 La Laguna, Tenerife, España.

El desarrollo de electrolitos de altas prestaciones para celdas de combustible de óxido sólido de temperatura intermedia (IT-SOFCs) requiere estrategias innovadoras de diseño de materiales que combinen estabilidad estructural con un transporte iónico optimizado. Este trabajo presenta un estudio comparativo integral sobre dos fronteras distintas de los óxidos conductores de protones de niobatos de tierras raras con estructura tipo weberita y de composición $\text{Ln}_3\text{NbO}_{7-d}$ —incluyendo la matriz de entropía media $(\text{SmEuGd})_{1-x}\text{Ca}_x\text{NbO}_{7-d}$. Todos los materiales se sintetizaron usando rutas químicas avanzadas, principalmente el método de liofilización de precursores, asegurando una homogeneidad composicional excepcional y una alta densificación tras la sinterización a altas temperaturas.

La difracción de rayos X y de neutrones en polvo combinado con el refinamiento Rietveld, dio lugar a diferentes grupos espaciales relacionados. La sustitución aliovalente con Ca^{2+} genera ciertas modificaciones, incluido un cambio del grupo espacial. Se estabiliza una red de tipo weberita monofásica en Cmmm (#63) para el sistema de entropía media, e induce una transformación de simetría controlada de Pnma a Cmcmm en los análogos basados en lantano. Las propiedades estructurales se validaron experimentalmente y se complementaron con cálculos de la Teoría del Funcional de Densidad (DFT) para mapear las rutas de migración teóricas y las energías de activación de las vacantes de oxígeno y los protones.

La espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS) bajo atmósferas secas y humidificadas (Aire , O_2 , Ar e H_2 al 5% en Ar) confirmó que la química de defectos y el desorden estructural actúan sinérgicamente para mejorar el rendimiento eléctrico. Los niobatos dopados con Ca(II) exhiben un aumento significativo en la conductividad protónica, alcanzando valores de hasta $7.15 \times 10^{-5} \text{ S cm}^{-1}$ a 823 K en condiciones húmedas para las composiciones de entropía media, impulsadas por la generación de vacantes de oxígeno. Este estudio integrado subraya el potencial de ajustar la entropía configuracional, la simetría cristalina y el dopaje aliovalente como vías robustas para diseñar la próxima generación de cerámicas funcionales conductoras de protones para la conversión de energía limpia.

Referencias

[1] M. González-Rodríguez, S. Savvin, D. Ávila, P. Núñez, *Ceramics International*, 52 (2026) 3545-53

Pushing the energy barrier in air stable Dy³⁺ single-ion magnets

M. Fondo¹, A. Iglesias-Fernández¹, J. Corredoira-Vázquez^{1,2}, Ana M. García-Deibe¹

¹ Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Spain, e-mail: ana.garcia.deibe@usc.es

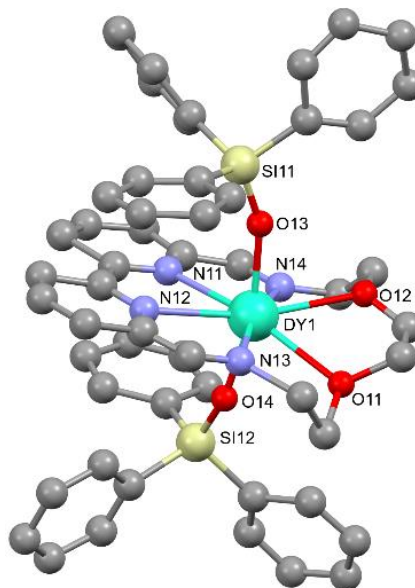
² Institute of Materials (IMATUS), Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Spain

Air-stable Dy³⁺ single ion magnets (SIMs) are at the forefront of molecular magnetism research [1], owing to their remarkable potential for high-density information storage and quantum technologies. Among them, hexagonal bipyramidal (hbp) complexes based on hexadentate macrocycles with auxiliary axial anionic oxygen donors stand out for exhibiting the highest blocking temperatures [2] and anisotropic energy barriers [3] reported to date.

These studies have revealed some key magnetostructural design principles, as for oblate ions, such as Dy³⁺, high magnetic performance requires not only a strong axial crystal field but also a minimized equatorial field. In this regard, macrocyclic ether-based ligands are especially attractive because of their weak equatorial charge donation, although often allowing quantum tunneling of the magnetization, thus limiting the attainable blocking temperature [3].

On this basis, herein we report the mixed imine–ether macrocyclic complex [DyL^{N4O2}(OSiPh₃)₂](BPh₄) (**1**) with triphenylsilanolate apical ligands (Figure 1), designed to enhance the energy barrier relative to flexible N₆ macrocycle systems [1]. Thus, compound **1** is a high-performance SIM, displaying an effective energy barrier close to that of the air-stable Dy³⁺ SIM with the highest hysteresis-based blocking temperature (40 K) [2].

Figure 1.- Balls and sticks diagram for one of the six [DyL^{N4O2}(OSiPh₃)₂]⁺ cations found in the unit asymmetric unit of complex **1**. H atoms, as well as BPh₄[−] counterion, are omitted for clarity.



Referencias

- [1] P.-B. Jin, Q.-C. Luo, Y.-Z. Zheng, *Acc. Chem. Res.*, **2026**, 59, 221-233.
- [2] J. Corredoira-Vázquez, C. González-Barreira, M. Fondo, A. M. García-Deibe, J. Sanmartín-Matalobos, S. Gómez-Coca, E. Ruiz, C. D. S. Brites, L. D. Carlos, *Inorg. Chem. Front.*, **2025**, 12, 5506-5516.
- [3] W.-J. Xu, Q.-C. Luo, Z.-H. Li, Y.-Q. Zhai, Y.-Z. Zheng, *Adv. Sci.*, **2024**, 11, 2308548.

Hidróxidos dobles laminares de alta entropía con relaciones M^{2+}/M^{3+} variables para la eliminación fotocatalítica de NO_x bajo luz visible

C. Díaz-Torres, B. Gámiz, I. Pavlovic, L. Sánchez

Departamento de Química Inorgánica, Instituto Química para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA), Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Córdoba E-14014, España (bgamiz@uco.es)

La fotocatalisis es una herramienta útil para mitigar los problemas medioambientales de calidad del aire asociados a contaminantes como los óxidos de nitrógeno (NO_x). En este contexto, fotocatalizadores como los hidróxidos dobles laminares (HDL) se estudian por su gran versatilidad composicional y la posibilidad de formar sistemas con propiedades electrónicas modulables. Sin embargo, su limitada absorción de luz en la región del visible restringe su eficiencia fotocatalítica, lo que motiva el desarrollo de estrategias para mejorar su rendimiento [1]. Los HDL pueden modificarse para obtener estructuras de alta entropía, mediante la incorporación de cinco o más elementos en proporciones casi equimolares, aumentando el desorden configuracional y favoreciendo las interacciones sinérgicas entre los diferentes cationes. Como resultado, es posible modular la estructura electrónica, lo que aumenta la disponibilidad de sitios activos y mejora el rendimiento fotocatalítico bajo luz visible [2,3].

En este trabajo se sintetizaron HDL de alta entropía con relaciones M^{2+}/M^{3+} variables (2, 3 y 4) utilizando Mg, Ni, Co y Zn como cationes divalentes y Al y Fe como trivalentes. Los materiales se prepararon mediante coprecipitación y se caracterizaron mediante difracción de rayos X (DRX), espectroscopia de reflectancia difusa (ERD) y fotoluminiscencia (FL), entre otras técnicas.

Los ensayos de laboratorio indicaron que los HDL de alta entropía desarrollados son eficaces para la eliminación fotocatalítica de gases NO_x bajo luz visible, siendo la muestra con relación M^{2+}/M^{3+} de 4 la que mostró el mejor rendimiento ($\approx 40\%$). Este estudio demuestra que una adecuada relación composicional dentro de un desorden configuracional mejora la absorción de la luz visible y facilita una mejor separación de los portadores de cargas.

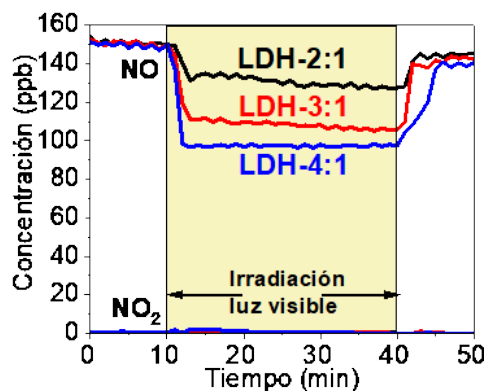


Figura 1.- Perfiles de concentración de NO_x obtenidos bajo luz visible.

Agradecimientos: este trabajo ha sido financiado por MICIU/PID2024-156242OB-I00/AEI/10.13039/501100011033 y por FEDER, UE. C.D-T agradece al Ministerio de Universidades su beca FPI (PREP2024-003346).

Referencias

- [1] D. Barreca, B. Gámiz, C. Maccato, L. Sánchez, *Nanoscale*, **2025**, 17, 21895.
- [2] Z. Jin, Z. Cao, L. Jin, S. Ding, K. Xi, *Nano-Micro Lett.* **2026**, 18, 200
- [3] A. Ruz-Luna, B. Gámiz, L. Marín, F. Martín, I. Pavlovic, L. Sánchez, *Appl. Catal. B: Environ. Energy*, **2026**, 398, 127003

Efecto de la reducción de tamaño de partícula de Hidróxidos Dobles Laminares (LDH) aplicados como fotocatalizadores para la purificación de aire

Laura Marín¹, Antonio Ruz-Luna¹, Ivana Pavlovic¹, Beatriz Gámiz¹, Luis Sánchez¹

¹ Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, Instituto de Química para la Energía y el Medio Ambiente, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, Córdoba E-14014. b32matol@uco.es

Debido a la importancia que tiene en la sociedad actual la calidad del aire, junto con las normativas acerca de los niveles permitidos de contaminantes atmosféricos y las secuelas que tiene su exposición para los seres humanos y medio ambiente; se están desarrollando y estudiando diferentes vías para reducir la concentración de estos compuestos en la atmósfera, de manera que se pueda proteger el medio ambiente y la salud humana. En este punto, la fotocatálisis se presenta como una solución prometedora para la eliminación de contaminantes atmosféricos como los óxidos de nitrógeno (NO_x).

Los hidróxidos dobles laminares (HDL) como fotocatalizadores son una opción económica con propiedades ventajosas para su uso en eliminación de NO_x [1]. En los últimos años se ha dedicado gran interés en el desarrollo de sistemas cero dimensionales (0D), por sus propiedades fisicoquímicas únicas, así como por incrementar la superficie activa, aumentando la eficiencia de procesos fotocatalíticos [2].

Según lo anterior, este estudio se establece como una prueba de concepto al objeto de conocer el efecto de la dimensión nanométrica de estructuras HDL para su uso como fotocatalizadores. Mediante diversas aproximaciones se estudió como el proceso de síntesis influye en la disminución del tamaño de partícula del sistema MgAlFe, así como su influencia en la eficiencia para la eliminación fotocatalítica de los gases NO_x.

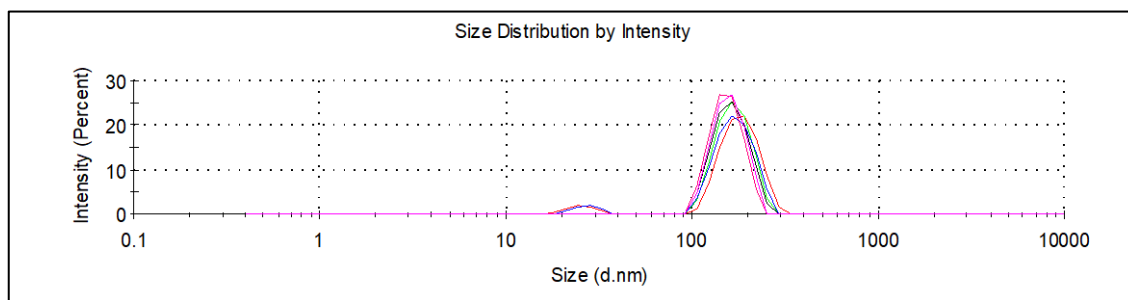


Figura 1.-Distribución de tamaño de partícula del HDL MgAlFe.

Agradecimientos: este trabajo ha sido financiado por MICIU/PID2024-156242OB-I00/AEI/10.13039/501100011033 y por FEDER, UE.

Referencias

- [1] L. Marín, P. Kenyon, D. O'Hare, F. Martín, I. Pavlovic, L. Sánchez, A. Pastor, *Chem. Eng. J.*, **2025**, 525, 170257
- [2] T. Edvinsson, *Soc. Open Sci.*, **2018**, 5 (9), 180387

Análisis del comportamiento mesomórfico de nuevos compuestos de coordinación de Pd(II) basados en ligandos de tipo pirazol

N. Ahijón-Díaz¹, C. Cuerva¹, L. Abad Galán¹

¹ MatMoPol, Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Ciudad Universitaria, E-28040, Madrid, España; nahijon@ucm.es

Los metalomesógenos constituyen una familia de materiales funcionales que ofrecen las capacidades de autoorganización propias de los cristales líquidos, reforzadas además por la presencia de los centros metálicos.¹ En este contexto, se han diseñado y sintetizado varias especies de compuestos de coordinación de Pd(II) utilizando compuestos de tipo pirazol como ligandos, que han sido funcionalizados estratégicamente con grupos pirazina y alquiloifenilo con un número de cadenas variable. Los estudios térmicos llevados a cabo por microscopía óptica de luz polarizada y calorimetría diferencial de barrido muestran que los nuevos compuestos presentan mesofases con amplios rangos de estabilidad, en algunos casos incluso



Figura 1.- Microfotografía de la mesofase Col_h del compuesto de coordinación de Pd(II) tomada a 294 °C durante el ciclo de enfriamiento.

superiores a 300 °C e incluyendo temperatura ambiente (Figura 1). Además, el control del modo de coordinación de los ligandos al centro metálico, así como la propia naturaleza de este, ha permitido modular el comportamiento de autoensamblado en la mesofase, permitiendo obtener mesofases de naturaleza esméctica o columnar. Los resultados obtenidos en este trabajo abren una nueva vía de estudio para el desarrollo de materiales funcionales con propiedades cristal líquido y aplicabilidad en el campo de la energía.²

Referencias

[1] Cuerva, C., Cano, M., & Schmidt, R. (2023). Improving the mesomorphism in bispyrazolate Pd(II) metallomesogens: an efficient platform for ionic conduction. *Dalton Transactions*, 52(15), 4684-4691.

[2] Cuerva, C., Caro-Campos, I., Cano, M., Rodríguez-Castellón, E., Kuhn, A., García-Alvarado, F., & Schmidt, R. (2025). Lithium-Ion Conduction in Liquid-Crystalline Columnar Pd(II) Nanoassemblies. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 17(30), 42915-42924.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por la Comunidad de Madrid a través del proyecto PR17/24-31905 (Proyecto: MetaBatt, Línea A: Doctores emergentes). Acción financiada por la Comunidad de Madrid a través del Convenio Plurianual para la regulación del marco de cooperación en el Sistema Regional de Investigación Científica e Innovación Tecnológica suscrito entre la Comunidad de Madrid y la UCM, en el marco del VI PRICIT (Plan Regional de Investigación Científica e Innovación Tecnológica para el periodo 2022-2025).

Síntesis de nanopartículas de FeCo por el método de poliol asistido por microondas

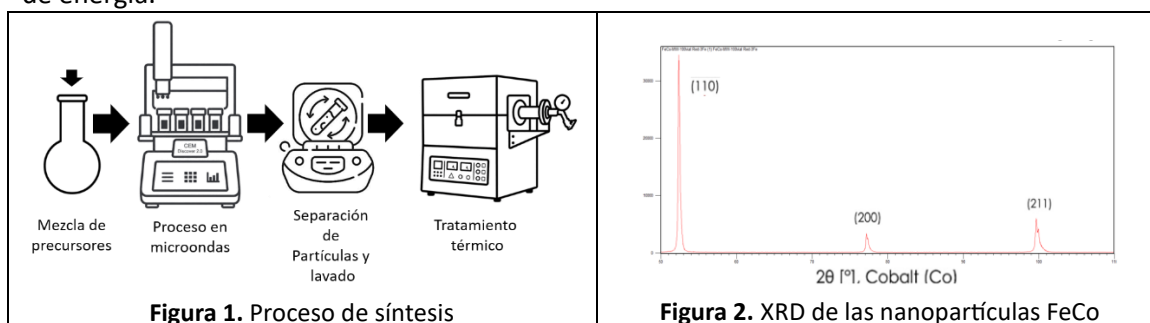
Manuel Juncosa¹, Marlory Isaza-Ruiz¹, Javier Díez¹, Claudia Gómez¹, Cristina Prieto², Breogán Pato¹

¹ CIAE-Iberian Centre for Research in Energy Storage, Av de la Universidad, 10003 Cáceres, Spain. manuel.juncosa@ciae.org

² Department of Energy Engineering, Universidad de Sevilla, 41092 Sevilla, Spain

Las nanopartículas de aleaciones FeCo han atraído un creciente interés debido a sus destacadas propiedades magnéticas y su potencial aplicación en tecnologías avanzadas [1]. Diferentes métodos de síntesis se pueden encontrar en la literatura [2]. En este trabajo se sintetizaron nanopartículas de FeCo con composición nominal Fe_7Co_3 mediante el método de poliol asistido por microondas, empleando cloruro de hierro (II) tetrahidratado ($\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$) y acetilacetonato de cobalto ($\text{Co}(\text{acac})_2$) como precursores metálicos y etilenglicol como solvente y agente reductor. La síntesis asistida por microondas permitió una transferencia rápida y uniforme de energía, favoreciendo la nucleación y crecimiento de las nanopartículas en tiempos reducidos respecto a los métodos convencionales.

Posteriormente, el material obtenido fue sometido a un tratamiento térmico a 500 °C durante una hora bajo atmósfera reductora de N_2/H_2 (90/10), con el fin de promover la formación de la aleación y mejorar su cristalinidad. La caracterización estructural mediante difracción de rayos X (XRD) confirmó la formación de la fase FeCo, mientras que los análisis morfológicos revelaron partículas con tamaño promedio cercano a 50 nm. Los resultados evidencian que la combinación del método poliol con calentamiento por microondas constituye una ruta de síntesis eficiente y reproducible para la obtención de nanopartículas FeCo de composición controlada. Estas características posicionan a los materiales desarrollados como candidatos prometedores para futuras aplicaciones en sistemas de conversión y almacenamiento térmico de energía.



Referencias

- [1] Mehdi Zamanpour, Yajie Chen, Bolin Hu, Kyler Carroll, Zachary J. Huba, E. E. Carpenter, Laura H. Lewis, and Vincent. G. Harris, J. Appl. Phys., 2012, 111, 07B528
- [2] Andreas Sergides, Catherine Amiens, Sergio Gómez-Graña, Antonios Makridis, Liudmyla Storozhuk, Stefanos Mourdikoudis, Nguyen Thi Kim Thanh. Nanoscale, **2025**, 17, 17110

Desarrollo de materiales catódicos sostenibles basados en MnO_2 para baterías de zinc

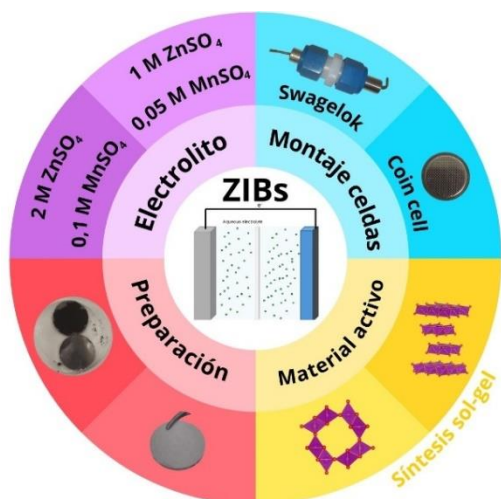
Verónica López López, Inmaculada Álvarez Serrano, María Luisa López García

¹ Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, Spain. marisal@ucm.es

Las baterías acuosas de ion zinc (AZIB) se postulan como una alternativa segura, económica y sostenible a las baterías de ion litio para aplicaciones de almacenamiento de energía (1,2). En este trabajo, dos polimorfos del dióxido de manganeso ($\alpha\text{-MnO}_2$ y $\delta\text{-MnO}_2$) se sintetizaron mediante un método sol-gel para su posterior evaluación como material activo en AZIBs.

Estos materiales activos se combinaron con *carbon black* (CB) y nanotubos de carbono (CNT) como aditivos conductores, y alginato de sodio o carboximetilcelulosa (CMC) como aglutinantes.

Los resultados muestran que, en los ciclos iniciales, la capacidad del $\delta\text{-MnO}_2$ aumenta hasta estabilizarse, mostrando una mayor capacidad que $\alpha\text{-MnO}_2$. El electrolito 1 M ZnSO_4 /0,05 M MnSO_4 se elige como el más adecuado buscando minimizar la corrosión del ánodo y la deposición de sulfatos. Las celdas tipo botón (*coin cells*) proporcionaron una capacidad ligeramente superior a las celdas *Swagelok*. La composición 62:26:5:7 (MnO_2 :CB:CNT:CMC), denominada 62-CNT, fue la que mejor capacidad presentó ($210 \text{ mA}\cdot\text{h}\cdot\text{g}^{-1}$). En ciclados de larga duración, el cátodo de $\alpha\text{-MnO}_2$ mostró una pérdida gradual de capacidad, alcanzando 341 ciclos, mientras que el de $\delta\text{-MnO}_2$ presentó mayor capacidad ($220 \text{ mA}\cdot\text{h}\cdot\text{g}^{-1}$) aunque aguantó un menor número de ciclos.



Por último, un cátodo de $\alpha/\delta\text{-MnO}_2$ (1:1) con composición 62-CNT alcanzó la capacidad más alta ($325 \text{ mA}\cdot\text{h}\cdot\text{g}^{-1}$), aunque dejó de funcionar en el ciclo 43. Al ciclar otro cátodo con la misma composición a mayor velocidad, se mantuvo una capacidad en torno a $300 \text{ mA}\cdot\text{h}\cdot\text{g}^{-1}$ durante 300 ciclos. Estos resultados sugieren un efecto sinérgico entre ambas fases y esta elevada capacidad se logró utilizando un aglutinante ecológico e hidrosoluble de CMC, en lugar del PVDF convencionalmente empleado.

Figura 1.-Resumen gráfico.

Referencias

- (1) Alawi, M. J., Gamal, H., Rashad, M., Alziyadi, M. O., & Shalaby, M. S. (2025). Journal of Alloys and Compounds, 1012, 178455. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2025.178455>
- (2) Álvarez-Serrano, I., Almodóvar, P., Giraldo, D. A., Llopis, F., Solsona, B., & López, M. L. (2022) *Advanced Materials Interfaces*, 9(5), 2101924. <https://doi.org/10.1002/admi.202101924>

Rapid and efficient microwave-assisted synthesis of β -diketonate lanthanide complexes for luminescent thermometry applications

Isabel García Santos¹, Claudia Fernández-Blanco¹, Julio Corredoira-Vázquez^{2,3}, Matilde Fondo²

¹ Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Farmacia, Universidade de Santiago de Compostela, isabel.garcia@usc.es

² Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química, Universidade de Santiago de Compostela

³ Instituto de Materiales (iMATUS), Universidade de Santiago de Compostela

Microwave irradiation is a rapid, efficient, and sustainable synthetic strategy that enables the preparation of purer products in higher yields, making it highly suitable for the synthesis of β -diketonate lanthanide complexes. Microwave-assisted synthesis emerges as an efficient alternative to conventional methods, which often hinder the isolation of pure products, lead to the formation of multiple species, and frequently result in poor reproducibility.

β -Diketone ligands are well-known sensitizers of lanthanide ions through the antenna effect, particularly europium(III), and consequently β -diketonate lanthanide complexes have emerged as promising materials for luminescent thermometry [1].

In this work, a microwave-assisted method was optimized for the synthesis of lanthanide complexes containing 1,10-phenanthroline (phen) and β -diketone ligands. Specifically, the synthesis, characterization, and photophysical study of the complexes [Eu(hfa)₃(phen)(H₂O)]·0.5phen·H₂O (**1**), where hfa = hexafluoroacetylacetonate (Figure 1), and [Eu(tta)₃(phen)]·H₂O (**2**), where tta = 2-thenoyltrifluoroacetone, are presented. The latter complex had previously been synthesized using a conventional method [2]. The results obtained allow evaluation of the influence of the synthetic method on the structural and luminescent properties of these compounds and their potential application as luminescent thermometers in the physiological temperature range.

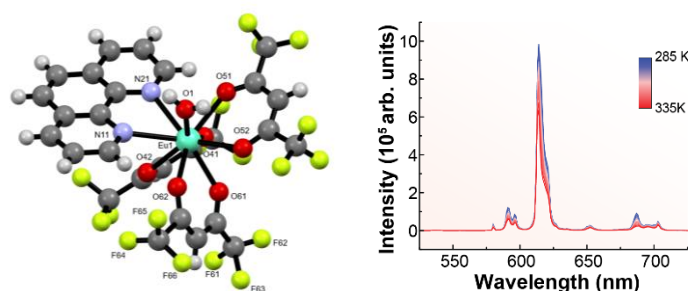


Figure 1.- (Left) Molecular structure of **1**, with solvate molecules omitted for clarity. (Right) Luminescence emission spectra of **1** recorded in the 285-335 K temperature range under excitation at 380 nm.

References

- [1] C. D. S. Brites, R. Marin, M. Suta, A.N. Carneiro Neto, E. Ximendes, D. Jaque, L.D. Carlos. *Adv. Mater.* **2023**, *35*, 2302749
- [2] O. Essahili, M. Ouafi, M. Ilouk, O. Lakbita, C. Duhayon, L. Mahi, O. Moudam. *ChemistryOpen*, **2024**, *13*, e202300192

Pressure-assisted electrocaloric response in thiourea under low electric field in the cryogenic region

J.M. Bermúdez-García¹, S. Yáñez-Vilar², Á. Ferradanes-Martínez¹, A.L. Llamas-Saiz³,
 M. Sánchez-Andújar¹, S. Castro-García¹, M.A. Señarís-Rodríguez¹, J. Mira²

¹ CICA – Centro Interdisciplinar de Química e Bioloxía and Departamento de Química, Facultade de Ciencias, Universidade da Coruña, 15071 A Coruña, Spain. E-mail: angel.ferradanes@udc.es

² Departamento de Física Aplicada and Instituto de Materiais (iMATUS), Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago de Compostela, Spain.

³ Research Infrastructures Area X-ray Unit, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Spain.

Almost 70 years after the discovery of ferroelectricity in thiourea [1], in this work we report for the first time its remarkable electrocaloric response. This molecular ferroelectric exhibits a giant electrocaloric strength ($\Delta S/\Delta E = 1.13 \text{ J cm kg}^{-1} \text{ kV}^{-1}$) combined with a high electrocaloric tunability ($dT_t/dE = 0.7 \text{ K} \cdot \text{cm} \cdot \text{kV}^{-1}$), reaching values comparable to the best-performing bulk electrocaloric materials reported to date [2], while requiring exceptionally low fields. Furthermore, these electrocaloric responses can be further enhanced by the application of external pressure, revealing a multicaloric behavior in this compound. Those outstanding properties are related to a large dielectric dipole, low molecular weight and weak intramolecular interactions within the crystal structure, appearing at temperatures near 170 K, which could be useful for ecofriendly cooling in cryogenic systems.

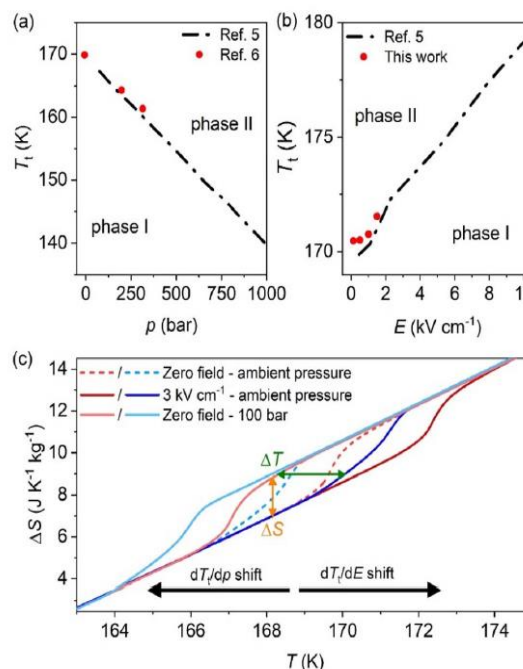


Figure 2. Multicaloric response of thiourea after the application of external pressure and electric field

Acknowledgments

The authors acknowledge financial support from grant PID2021-122532OB-I00 funded by MCIU/AEI/10.13039/501100011033 and ERDF/EU and the projects ED431C 2022/39 and ED431F 2023/33 funded by Xunta de Galicia. This publication is part of the grant RYC2021-033040-I, funded by MCIU/AEI/10.13039/501100011033 and from the European Union NextGenerationEU/PRTR. J.M.B.-G. is grateful for the support provided by the UDC-Inditex InTalent Programme.

References

- [1] A. L. Solomon, Phys. Rev., **1956**, 104, 1191
- [2] J. J. Wang, D. Fortino, B. Wang, X. Zhao and L. Q. Chen, Adv. Mater., **2020**, 32, 1–6

Unveiling giant barocaloric effects in crystalline molecular rotors

P. Dafonte-Rodríguez¹, Carmen de Cabo Rodríguez¹, María Gelpi¹, Julian Walker², Charles James McMonagle³, Socorro Castro-García², María Antonia Señaris-Rodríguez¹, Juan Manuel Bermúdez-García¹, Manuel Sánchez-Andújar¹

¹ CICA – Centro Interdisciplinar de Química e Bioloxía and Departamento de Química, Facultade de Ciencias, Universidade da Coruña, Campus de Elviña 15701, A Coruña, Spain. socorro.castro.garcia@udc.es

² Norwegian University of Science and Technology, Department of Material Science and Engineering, Trondheim 7491, Norway.

³ European Synchrotron Radiation Facility, Swiss-Norwegian Beamlines, Grenoble 3843, France.

Crystalline molecular machines have risen as promising platforms to transform controlled molecular motions into macroscopic functionalities such as movement, energy conversion or even signal processing.^[1] Such movements can be induced by stimuli like temperature, light or electric field. The collective movement of the mobile parts (“rotators”) cause large volume changes (ΔV), which are of great interest for barocaloric cooling applications.^[2] However, studies on how the applied pressure influence the structure in the crystalline molecular machines are still recent and scarce in the literature.^[3] We have studied the barocaloric potential of the crystalline molecular rotor $[\text{Zn}(\text{en})_3](\text{ox})$ ($\text{en}=\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$, $\text{ox}=\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$) (Fig. 1a)^[2] performing in-depth calorimetric studies using variable temperature and variable pressure differential scanning calorimetry (VT-DSC and VP-DSC respectively) and powder X-ray diffraction using synchrotron radiation (SPXRD). We have found a large barocaloric tunability $dT/dp \sim 30 \text{ K kbar}^{-1}$ (how much the phase transition temperature shifts under pressure), combined with large values of reversible adiabatic temperature changes ($\Delta T_{\text{rev}} \sim 14 \text{ K}$) and isothermal entropy changes ($\Delta S_{\text{rev}} \sim 60 \text{ J K}^{-1} \text{ Kg}^{-1}$) at a wide temperature span of $\sim 20 \text{ K}$ (Fig. 1b), which suggest that this family of materials are a promising new alternative for solid state cooling.

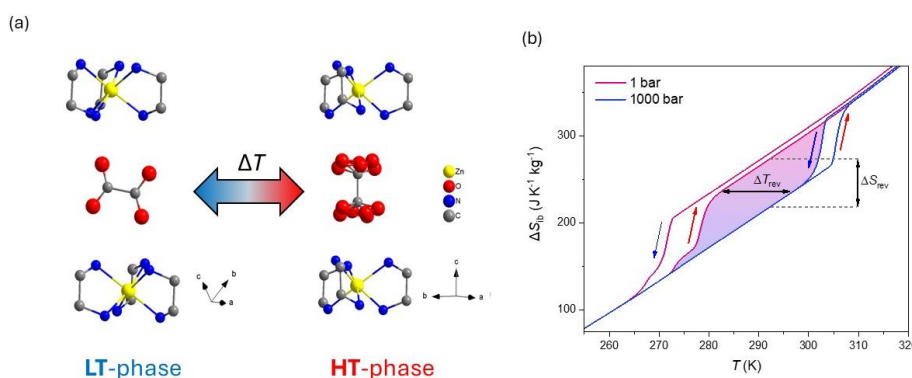


Figure 1. (a) Crystal structure of $[\text{Zn}(\text{en})_3](\text{ox})$. (b) Isobaric entropy changes.

Acknowledgement
 s: Grant PID2021-122532OB-I00 funded by MCIU/AEI/10.13039/501100011033 and ERDF/EU and

the projects ED431C 2022/39 and ED431F 2023/33 funded by Xunta de Galicia. Grant RYC2021-033040-I, funded by MCIU/AEI/10.13039/501100011033 and the European Union NextGenerationEU/PRTR. J.M.B.-G. thanks UDC-Inditex InTalent Programme. P.D.-R. thanks Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades for a FPU predoctoral fellowship (FPU23/0091). M.G. thanks Xunta de Galicia for a predoctoral fellowship (ED481A-2023). The authors thanks the ESRF for the award of beam time (A01-2-1374 and A01-2-1377).

References

- [1] P. Jiang et al., *ACS Nanosci. Au*, **2025**, 5, 6, 428-441.
- [2] ZS. Yao et al., *Nature Chem*, **2014**, 6, 1079-1083.
- [3] B. Fu et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, **2023**, 14, 16, 3891–3897.

Sustainable Tandem Catalysis for the synthesis of amides from levulinic acid using Mechanochemically Prepared Mono and Bimetallic catalytic Systems

C. Stefani¹, F. Zorzetto¹, A. Perosa¹, E. Rodríguez-Castellón², M. Selva¹

¹ Dipartimento di Scienze Molecolari e Nanosistemi dell'Università Ca' Foscari, Via Torino 155, Venezia-Mestre (Italy); e-mail: 888960@stud.unive.it

² Departamento de Química Inorgánica, Cristalografía y Mineralogía, Universidad de Malaga (Spain)

Several 5 wt% Ru-based samples were prepared from bio-based supports, even from biowaste, such as cellulose, commercial chitin, crab shells, and chitin, by extrusion, impregnation, or solution methods followed by calcination at 500 °C under inert atmosphere (N₂). These systems were then explored to catalyse a tandem process involving: i) the reduction of levulinic acid (LA) to gamma valerolactone (GVL), ii) the reduction of nitrobenzene to aniline, and iii) the amidation of GVL by aniline. Different reducing agents such as molecular hydrogen, isopropanol, formic acid, and ammonium formate were used. Gaseous hydrogen proved to be the most effective for the reduction of LA to GVL, while ammonium formate worked best for the reduction of nitrobenzene to aniline. [1]

The crab shell-supported catalyst provided the best results: in the model reaction of nitrobenzene with ammonium formate (3 eq.) the conversion of nitrobenzene and the product (aniline) yield were of 94% and 93% respectively, and were higher than those achieved with a commercial 5% Ru/C sample used as a benchmark (66% and 63%). Also, the chitin supported system yielded good results, superior to those obtained using cellulose support. The comparatively high performance of these samples was ascribed to the content of either nitrogen in chitin and crab-shell and CaCO₃ in the crab shell. Previous studies also by our group have demonstrated that N-doping of carbonaceous catalytic supports can improve interactions between catalytic metal nanoparticles and the support thereby preventing metal leaching and catalyst degradation; [2,3] while CaCO₃ may act as a basic co-catalyst helping to promotion of the reduction reaction.

The characterization of all catalysts will be carried out via a multi-technique approach, including XPS, XRD, SEM, TEM, ICP-MS, and N₂-physisorption, and is currently under progress.

References

- [1] F. Zorzetto, A. Perosa, D. Rodríguez-Padron, M. Selva, *ACS Sustainable Chem. Eng.*, **2025**, 13, 17412–17421.
- [2] F. Zorzetto, D. Ballesteros-Plata, A. Perosa, E. Rodríguez-Castellón, M. Selva, D. Rodríguez-Padrón, *Green Chem.*, **2024**, 26, 5221–5238.
- [3] S. Mao, C. Wang, Y. Wang, *J. Catal.*, **2019**, 375, 456–465.

Síntesis mecanoquímica en seco de hidróxidos dobles laminares (HDL) con diferentes composiciones químicas para la fotodegradación de paracetamol

G. Bento^{1,2}, A. Misol¹, P. Rodríguez¹, K. Eguiluz³, I. Gimenez², R. Trujillano¹

¹ Departamento de Química Inorgánica. Universidad de Salamanca, 37008, Salamanca. raket@usal.es

² Pós-G. em Ciência e Engenharia de Materiais. Universidade Federal de Sergipe, 49.107-230, São Cristóvão-SE, Brasil.

³ Pós-G. em Engenharia de Processos. Universidade Tiradentes, 49.032-490, Aracaju-SE, Brasil.

La mecanoquímica es un método basado en reacciones químicas en estado sólido inducidas por energía mecánica para transformar precursores en productos deseados [1]. Actualmente, representa una metodología eficiente, verde y sostenible para la síntesis de hidróxidos dobles laminares (LDH), generalmente mediante molinos de alta energía [2]. Los LDH son arcillas sintéticas de estructura análoga a minerales naturales y presentan gran versatilidad composicional y de aplicación [3,4]. En este trabajo, se prepararon LDH de MgAl, MgZnAl, MgGaAl y MgZnGaAl mediante molienda en seco en dos etapas, utilizando cantidades estequiométricas de sales para la intercalación de los aniones necesarios para la formación de las estructuras laminares. Todos los sólidos se han caracterizado mediante PXRD, espectroscopia FT-IR, S_{BET} , etc., y se ha ensayado la fotodegradación de paracetamol, mostrando toda actividad fotocatalítica. La Tabla 1 presenta los valores de 2θ , distancia interplanar de las muestras originales, área superficial y disminución de la concentración de paracetamol en la fotodegradación. La Figura 1 confirma, mediante los difractogramas de rayos X, la formación de LDH con estructura tipo hidrotalcita.

Tabla 1. Datos de difracción de rayos X, área superficial y porcentaje de reducción de la concentración de paracetamol.

Muestra	003	006	009	110	S_{BET} (m ² /g)	100-(C/C ₀ ×100)
	$2\theta/d(\text{\AA})$	$2\theta/d(\text{\AA})$	$2\theta/d(\text{\AA})$	$2\theta/d(\text{\AA})$		
MgZnAl-LDH	11.15°/	22.30°/	35.40°/	61.70°/	28.04	49%
MgGaAl-LDH	11°/	22°/	35°/	61.10°/	8.81	34%
MgZnAlGa-LDH	11.60°/	22.70°/	35.65°/	61.15°/	6.41	14%
MgAl-LDH	11.30°/	22.69°/	--	61.13°/	--	--

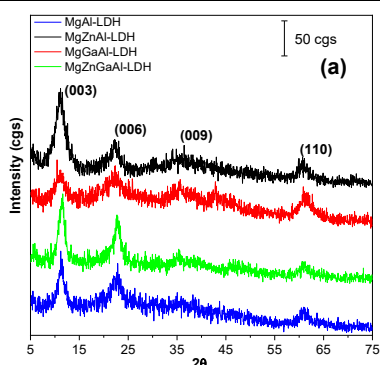


Figura 1.-PXRD de las (a) muestras originales y (b) catalizadores calcinados.

Agradecimiento: Agencia Estatal de Investigación - PID2023-146935OB-C22. PRM agradece al MICIU el contrato predoctoral FPU24/01500.

Referencias

- [1] B. A. Barnard, F.J.W.J. Labuschagné. *Crystals*, **2021**, 11, 276.
- [2] A. K. Hamzat, F. O. Olarinoye, B. O. Yusuf. *J. Energy Inst.*, **2026**, 124, 102358.
- [3] V. Rives. *Layered double hydroxides: Present and Future*. Nova Science Publishers, New York, **2001**.
- [4] K. Wang, T. Wang, Q. A. Islam, Y. Wu. *Chin. J. Catal.*, **2021**, 42, 1944-1975.

Hacia polímeros con azufre covalente como solución eficiente para las baterías Na-S

Jesús M. Blázquez-Moreno, Almudena Benítez, Álvaro Caballero

Dpto. de Química Inorgánica e Ingeniería Química. Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA). Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, 14014, Córdoba, España. Email: alvaro.caballero@uco.es

La alta demanda de almacenamiento energético está impulsando el desarrollo de baterías de sodio-azufre (Na-S) a temperatura ambiente como una alternativa prometedora frente a la tecnología ion-litio, gracias a su alta densidad teórica, bajo coste y la abundancia de sus materiales. No obstante, su comercialización aún se ve obstaculizada por cinéticas de reacción lentas y el perjudicial efecto *shuttle* [1]. Los materiales poliméricos sulfurizados se presentan como una solución eficaz. Durante el proceso de síntesis de estos compuestos, el azufre queda anclado de manera covalente a la cadena polimérica. La fuerte naturaleza de este enlace suprime eficazmente la formación y posterior disolución de polisulfuros de cadena larga, evitando de raíz el efecto *shuttle* y la consecuente pérdida de material activo. Como resultado, la batería opera a través de un mecanismo de conversión cuasi-sólido, garantizando que únicamente se formen intermediarios de reacción de cadena corta como en estado sólido [2]. Este trabajo evalúa dos materiales catódicos avanzados: el poliacrilonitrilo sulfurado (SPAN) y el poliisopreno sulfurado (SPI). Por una parte, el SPAN aporta una gran estabilidad cíclica gracias a su estructura rica en nitrógeno que retiene eficazmente los polisulfuros, aunque limita su contenido de azufre al 36%. Alternativamente, el SPI supera esta restricción al lograr hasta el 50% en peso de S, lo que incrementa la densidad energética global de la batería. Electroquímicamente, ambos materiales demuestran un rendimiento excepcional en el ciclado ultra-largo, superando los 1000 ciclos a velocidades exigentes y proporcionando altas capacidades reversibles de 400 mAh g⁻¹, incluso con elevadas cargas de masa de azufre. Estos resultados confirman el gran potencial de los polímeros sulfurados como materiales catódicos, allanando el camino hacia la viabilidad práctica de las baterías Na-S a temperatura ambiente.

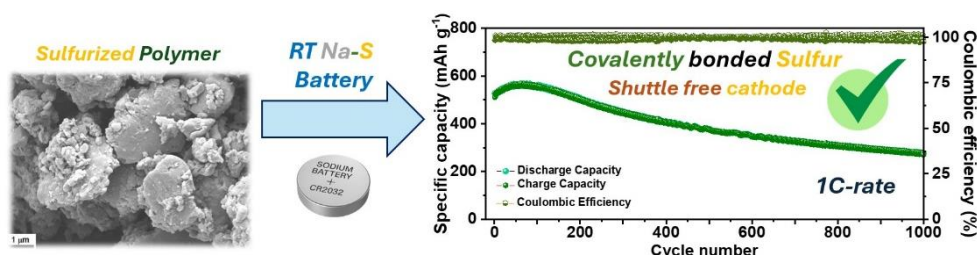


Figura 1. Morfología de un polímero sulfurado y su rendimiento electroquímico en baterías RT Na-S.

Agradecimientos

Investigación financiada por el Ministerio de Ciencia e Innovación de España MICIN/AEI/10.13039/501100011033, y la Unión Europea 'NextGenerationEU/PRTR' (Proyecto PID2023-147080OB-I00 y ayuda RYC2024-050480-I).

Referencias

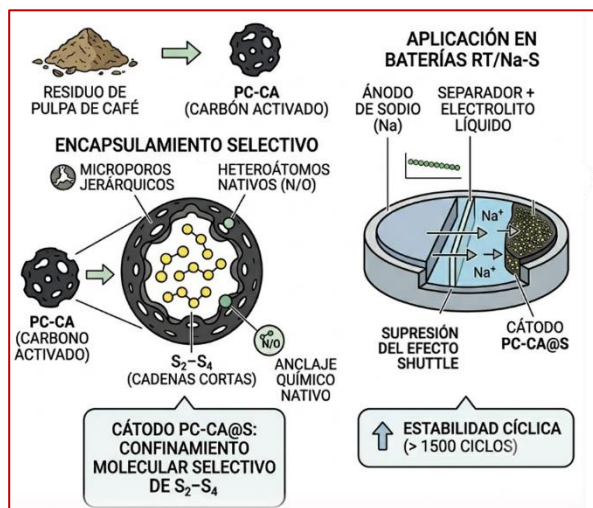
- [1] D. Yadav, Y. Sharma, Small, 2026, 22, 202510392.
- [2] R. Andaveh, Y. Zhao, E. Jin, Z. Zhang, V. Martins, P. Pirayesh, Y. Gan, Y. Yuan, Adv. Funct. Mater., **2026**, 37, e75583

Valorización de pulpa de café como matriz carbonácea microporosa para baterías sodio-azufre a temperatura ambiente

Azahara Cardoso-Almoguera¹, Johanna Serna², José A. Siles³, Alvaro Caballero¹,
Almudena Benítez¹

¹ Universidad de Córdoba, IQUEMA. Dpto. Química Inorgánica e Ingeniería Química, Área de Química Inorgánica (FQM-175), Campus de Rabanales, 14014 Córdoba (España), q62betoa@uco.es ² Universidad Tecnológica de Pereira. Ciencias Agrarias y Agroindustria. Programa de Ingeniería de Procesos Agroindustriales. Pereira, Risaralda, Colombia. ³ Universidad de Córdoba, IQUEMA, ceiA3. Dpto. Química Inorgánica e Ingeniería Química, Área de Ingeniería Química (RNM-271), Campus de Rabanales, 14014 Córdoba (España).

Este trabajo reporta la síntesis simplificada de una matriz microporosa de carbón a partir de pulpa de café (PC) de Colombia, un residuo agroindustrial altamente abundante [1]. A diferencia de los métodos convencionales basados en biomasa que requieren multi-etapas térmicas y una elevada huella química mediante impregnación líquida, este procedimiento emplea directamente una mezcla en estado sólido con una relación optimizada de activante de tan solo 3:1 [PC:KOH, p/p]. El carbón activado resultante (PC-CA) desarrolla una red jerárquica de microporos con un área superficial de 1041 m²/g y retiene de forma nativa heteroátomos (N y O). Esta arquitectura permite confinar eficazmente un 42% de azufre en alótropos de cadena corta (S₂-S₄), eludiendo termodinámicamente la formación de polisulfuros de sodio de cadena larga y suprimiendo el perjudicial efecto "shuttle" (Figura 1) [2].



La caracterización electroquímica de las celdas sodio-azufre a temperatura ambiente (RT/Na-S) integradas con este cátodo (PC-CA@S) demuestra una robustez sin precedentes a largo plazo. A un régimen exigente de 1C, el electrodo ofrece una capacidad reversible y estable de 320 mAh/g, manteniendo una excelente estabilidad cíclica a lo largo de 1500 ciclos. Estos resultados evidencian el enorme potencial de la pulpa de café como una matriz sostenible, económica y altamente eficiente para sistemas de almacenamiento energético de próxima generación.

Figura 1. Esquema general de la investigación

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por Ministerio de Ciencia e Innovación MICIN/AEI/10.13039/501100011033 y la Unión Europea 'NextGenerationEU/PRTR' (Proyectos PID2023-147080OB-I00 y PID2024-156093OB-I00); y por la ayuda 'Ramón y Cajal' (RYC2024-050480-I).

Referencias

- [1] A.M. Chaurra, J.C. Molina, C. Infante, J.C. Wilches, *ACS Food Sci. Technol.*, **2023**, 3(8), 1314-1322.
- [2] A. Cardoso-Almoguera, O. Saad-Molina, J.L. Gómez-Cámer, A. Benítez, A. Caballero, *Chem. Eng. J.*, **2026**, 175732.

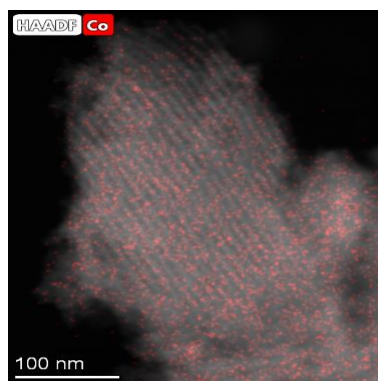
Avoiding the detrimental SMSI effect on a titania support in the Fischer-Tropsch reaction

Alfonso Caballero, Francisco Platero, Juan P. Holgado, Gerardo Colón

Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla. Centro Mixto Universidad de Sevilla-CSIC. Américo Vespucio, 49. 41092 Sevilla. Spain, caballero@us.es

The effect of support mesoporous structuration has been studied for the Fischer-Tropsch synthesis reaction. One of the main drawbacks for this process is related to catalyst deactivation. Within this frame, reductive oxides such as TiO_2 also condition the final catalytic performance due to the occurrence of Strong Metal-Support Interaction (SMSI) effect. In this contribution, mesoporous titania supports were prepared by the surfactant templating pathway, using titanium isopropoxide, and the triblock copolymer P123 as structure-directing agent. The metallic phase was incorporated into the synthesized supports through the incipient wetness impregnation method. Commercial TiO_2 Evonik P90 has been used as reference material.

STEM/HAADF images of the obtained materials (Figure 1) show Co nanoparticles well distributed along the mesopore channels of TiO_2 . These well-ordered mesoporous Co/TiO_2 , with the metal clusters located inside the mesopores, strongly affects the reducibility behaviour of cobalt, also improving the catalytic performance. Although the reduction



pretreatment and reaction induce a drastic structural change of mesopores, the high catalytic performance is maintained.

Thus, we have demonstrated that porous structuration allows to stabilize the metal active sites and therefore to improve the catalytic performance. In that way, the confinement of Co particles within the pores hinders the strong metal-support interaction effect (SMSI), and highly stable metal active sites lead to better performance for Fischer-Tropsch synthesis reaction toward C_5^+ products.

Figura 1.-Co located inside the mesoporous

Authors acknowledge the financial support through grant PID2020-119946RB-I00 and PID2024-160864OB-I00, funded by MCIN/AEI/ 10.13039/501100011033 and FSE+.

2D Hybrid Organic-Inorganic Perovskite Solid-Solid Phase Change Materials for Thermal Management Applications

A. Abdellattef^{1, 2}, A. Nonato¹, S. Castro-García², B. Pato-Doldán¹, C. Gómez-Aguirre¹

¹ Department of Thermal Energy Storage, Iberian Centre for Research in Energy Storage CIAIE, Cáceres 10004, Spain., amira.soliman@ciaie.org

² Department of Chemistry, Faculty of Sciences, Universidad da Coruña, 15071, A Coruña, Spain

Layered manganese-based perovskite solid–solid phase change materials (SS-PCMs) offer a stable, leak-proof approach to cooling high-power microelectronics, confining reversible structural transformations within inorganic sheets. Modulating alkylammonium chain lengths enables precise control over transition temperatures and latent heat enthalpy, offering a scalable pathway for electronic thermal management [1,2]. Here, we report a family of layered perovskites with the general formula $(C_nH_{2n+1}NH_3)_2MnCl_4$ (where $n = 8, 10, 12$), synthesized via the slow evaporation method [3,4].

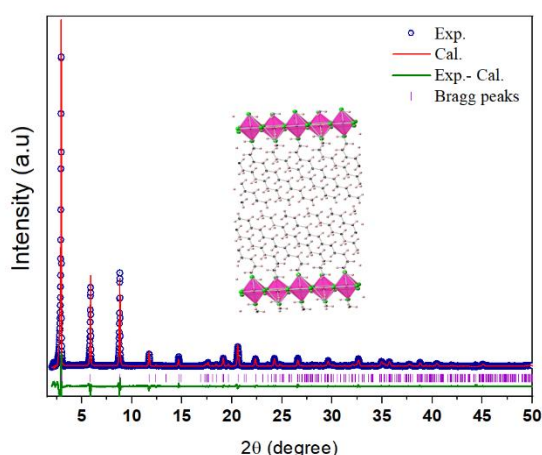


Figure 1.-PXRD of $(C_{12}H_{25}NH_3)_2MnCl_4$

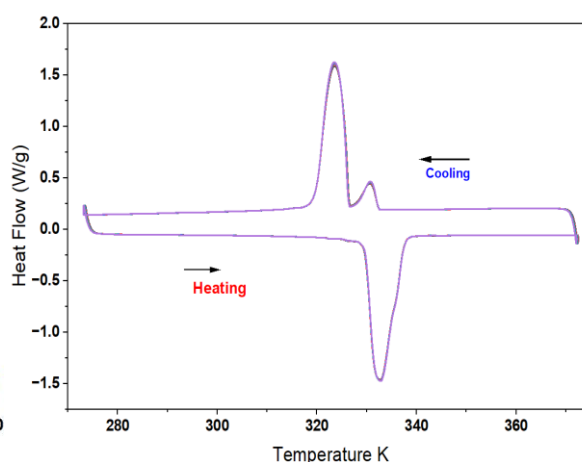


Figure 2.-DSC of $(C_{12}H_{25}NH_3)_2MnCl_4$

References

- [1] A.K. SR, S. Suresh, P. Kalidoss, J. Shelton, P.S. Gavaskar, *Int. J. Thermal Sci.*, 2025, 208, 109409.
- [2] I. Delgado-Ferreiro, Á. Ferradanes-Martínez, D. González-Novo, J. García-Ben, M. Gelpi, J. López-Beceiro, R. Artiaga, J. Walker, C.J. McMonagle, R.J. Dixey, A.E. Phillips, *J. Mater. Chem. A*, 2025, 13, 40179-40191.
- [3] A. Fallahi, G. Guldentops, M. Tao, S. Granados-Focil, S. Van Dessel, *Appl. Therm. Eng.*, 2017, 127, 1427-1441.
- [4] T. Chang, Y. Dai, Q. Wei, X. Xu, S. Cao, B. Zou, R. Zeng, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2023, 15, 5487-5494.

Influencia de la química de precursores en la formación de nanopartículas de ferrita $\text{Fe}_{3-x}\text{Co}_x\text{O}_4$ magnéticamente homogéneas

M. Muñoz-Arias^{1,2}, A. Marigomez-Cajaraville¹, I. Gil del Muro¹, A. Díaz-García²,
I. Castellanos-Rubio¹, L. Lezama¹, M. Insausti¹

¹ Dpto. Química Orgánica e Inorgánica, Facultad de Ciencia y Tecnología, EHU, Barrio Sarriena s/n, 48940, Leioa. maite.insausti@ehu.eus

² Laboratorio de Bioinorgánica, Facultad de Química, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba

La elevada anisotropía magnetocristalina y notable estabilidad química de las nanopartículas (NPs) de ferrita de cobalto se consideran componentes fundamentales para el desarrollo de nanomateriales magnetoeléctricos [1]. No obstante, la optimización de su comportamiento magnetoestrictivo implica combinar un alto contenido de cobalto con una gran uniformidad tanto química como estructural, algo que a día de hoy presenta sus retos a escala nanométrica [2]. En este estudio se ha analizado de forma sistemática cómo influyen la química de los precursores y la cinética de reacción en la formación de NPs del tipo $\text{Fe}_{3-x}\text{Co}_x\text{O}_4$.

Para ello, a partir de la descomposición térmica de los oleatos monometálicos de hierro(III) y cobalto(II), así como de un precursor bimetalico basado en oleato de Fe(III) y Co(II) se han preparado cinco ferritas con contenidos de cobalto de 18 a 35%. Los precursores metálicos se han caracterizado mediante FTIR, UV-vis, TGA y EPR, poniendo en evidencia diferencias sustanciales en los entornos de coordinación de los complejos, de forma que la estructura del precursor juega un papel decisivo en la nucleación y crecimiento de la partícula. La descomposición de los precursores en un medio de reacción con mayor carácter oxidante permitió disminuir la densidad de defectos estructurales y mejorar la coherencia cristalográfica.

Entre los distintos parámetros de síntesis evaluados, la velocidad de calentamiento destacó por su notable influencia sobre la homogeneidad magnética. En particular, el incremento de la velocidad de calentamiento de 3 a 7 °C min⁻¹ dio lugar a una supresión progresiva de una contribución magnética blanda, reduciéndola del 11.3 % al 0.2 %. La caracterización magnética evidenció que todas las muestras están dominadas por una fase de ferrita de cobalto, la cual presenta elevados valores de coercitividad y remanencia características de ferritas ricas en cobalto. Por su parte, las medidas de magnetización ZFC-FC indicaron que únicamente en una de las muestras la fase magnética blanda que aparece se corresponde con una fase de magnetita defectuosa minoritaria. En contraste, la contribución magnética blanda observada en el resto de las NPs se asocia con la presencia de maghemita y/o regiones de ferrita con bajo contenido en cobalto.

Referencias

[1] R. Guduru, P. Liang, J. Hong, A. Rodzinski, A. Hadjikhani, J. Horstmyer, E. Levister, S. Khizroev, 2015, 10 (13), *Nanomedicine.*, **2015**, 10(13), 2051–2061.

[1] K. Poon, G. Singh, *ChemNanoMat*. **2024**, 10 (11).

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado con fondos institucionales del MCIN/AEI/ 10.13039/ 501100011033 y del Gobierno Vasco en el marco de los Proyectos PID2022-136993OB-I00 y IT-1895-26. Agradecemos el apoyo técnico y humano brindado por SGIker (UPV/EHU).

Estrategias post-sintéticas combinadas para el control del tamaño de cristalito en hidróxidos dobles laminares

A. Misol, A. Jiménez, F.M. Labajos, V. Rives

GIR-QUESCAT, Dpto. Química Inorgánica, Universidad de Salamanca, 37008 Salamanca, España. labajos@usal.es

Los hidróxidos dobles laminares (LDH) tipo hidrotalcita despiertan un gran interés por sus aplicaciones como adsorbentes o como catalizadores [1]. Para controlar y homogeneizar su cristalinidad, frecuentemente se emplean tratamientos de envejecimiento hidrotermal; sin embargo, estos sólidos suelen conservar una marcada heterogeneidad morfológica [2]. En este trabajo, se evalúa la molienda mecánica como una estrategia post-sintética complementaria para refinar las propiedades estructurales y texturales de LDH de Zn,Al. Se analiza sistemáticamente cómo influye la historia sintética previa de los materiales, comparando muestras obtenidas por coprecipitación convencional frente a aquellas preparadas en presencia de aminas secundarias, dimetilamina (DMA) o dietilamina (DEA), y posteriormente sometidas a tratamientos hidrotermales, tanto por calentamiento convencional o como asistido por microondas.

Los sólidos resultantes se caracterizaron por difracción de rayos X (PXRD), espectroscopia de infrarrojo (FT-IR), análisis térmicos (TG/DTA), microscopía electrónica de barrido (SEM) y análisis de superficie mediante adsorción-desorción de N₂. Los resultados demostraron que las condiciones de molienda seleccionadas (600 rpm, 30 min) actúan principalmente como un método de refinamiento estructural, reduciendo el tamaño del cristalito sin llegar a provocar la amorfización de la estructura laminar. Este efecto fue especialmente drástico en las muestras sintetizadas con dietilamina (disminuyendo los valores de tamaño de cristal casi tres cuartos del valor inicial), quedando el impacto previo del tratamiento térmico prácticamente anulado. Por el contrario, los tratamientos hidrotermales prolongados en las muestras sintetizadas sin aminas o con DMA otorgaron una mayor robustez estructural (una reducción de apenas un tercio del valor inicial), limitando el impacto de la molienda. Este estudio demuestra que la respuesta mecánica de los LDH está fuertemente determinada por su síntesis previa.

Referencias

- [1] A. Sharma, S. Kumari, S. Sharma et al., *Mater. Today Sustain.*, **2023**, 22, 100399
- [2] D. Tichit, G. Layrac, M. G. Alvarez et al., *Appl. Clay Sci.*, **2024**, 248, 107234

Agradecimientos:

Los autores agradecen la financiación de la "Fundación Samuel Solórzano Barruso" de la Universidad de Salamanca, a través del proyecto FS/7-2025.

De POMOF a carburo: una estrategia sintética para la obtención controlada de carburos de Mo y Mo/W orientados a la reacción RWGS

María Karla López González¹, Mario Caccia², Javier Narciso¹

¹ Instituto Universitario de Materiales (IUMA), Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Alicante, Alicante, mariakarla.lopez@ua.es

² Alfred University, Nueva York, Estados Unidos

La valorización catalítica de CO₂ es clave para el desarrollo de procesos químicos sostenibles. Entre las distintas rutas de conversión, la reacción reverse water-gas shift (RWGS) destaca por producir CO, un intermediario clave para la síntesis de combustibles y productos químicos. Debido a su naturaleza endotérmica y limitada por el equilibrio, requiere catalizadores activos y estables bajo atmósferas reductoras. Los carburos de molibdeno destacan como alternativa a los metales nobles por su carácter electrónico cuasi-noble y su capacidad para activar H₂ y enlaces C=O [1, 2]. La incorporación de W permite acceder a sistemas Mo/W/C con fases como W₂C, de interés por su estabilidad térmica y su posible influencia en la activación de H₂/CO₂ bajo condiciones de RWGS [3]. No obstante, controlar la composición, las fases formadas y la distribución de las especies metálicas durante la carburización continúa siendo un desafío sintético [2], lo que motiva el desarrollo de estrategias basadas en precursores estructuralmente definidos.

En este trabajo se sintetizaron el POMOF (Polyoxometalate-based Metal-Organic Framework) NENU-5 y una variante Mo/W, denominada NENU-5-W, obtenida mediante incorporación directa de ácido fosfotúngstico durante la síntesis. Los precursores fueron transformados mediante tratamientos térmicos en atmósfera reductora [4], evaluando el efecto de la temperatura, la composición gaseosa y la velocidad de calentamiento sobre la formación de fases carburo. La etapa de carburización se identificó como el punto crítico del proceso, ya que pequeñas variaciones en las condiciones de síntesis favorecieron la formación de óxidos residuales, fases metálicas o mezclas de carburos. Los materiales obtenidos fueron caracterizados mediante DRX, SEM y XPS. Los resultados obtenidos ponen de manifiesto que NENU-5 y NENU-5-W pueden emplearse como plataformas sintéticas para dirigir la formación de carburos de Mo y Mo/W a partir de precursores estructuralmente definidos, ofreciendo una estrategia alternativa para el desarrollo de materiales con potencial aplicación en la valorización catalítica de CO₂ mediante la reacción RWGS.

Referencias

- [1] Xu Y, Yang Y, Wu M, *Acta Physico-Chimica Sinica*, **2024**, 40, 2304003
- [2] Tišler Z, Velvarská R, Skuhrovcová L, *Materials*, **2019**, 12, 415
- [3] Juneau M, Yaffe D, Liu R, Agwara JN, *Nanoscale*, **2022**, 14, 16458-66
- [4] Wu HB, Xia BY, Yu L, *Nature Communications*, **2015**, 6, 6512

