

Agenda

Todos los seminarios se celebrarán en el Salón de Grados del Módulo 8 de la Facultad de Ciencias, UAM.

0. 27 de septiembre de 2024, 12.30.
Yoanna María Álvarez Ginarte, Universidad de la Habana, Cuba.
1. 11 de octubre de 2024, 12.30
Deseada Díaz Barrero, Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe (KIT)
Monitoring of the synthesis and temporal evolution of tritiated methane mixtures by Raman spectroscopy.
2. 25 de octubre de 2024, 12.30 h
Helmut H. Telle, UAM
Uses of graphene – is it really the wonder material?
3. 29 de noviembre de 2024, 12.30
José Manuel Santos Barahona, UCM
Insight into organic light emitting diodes.

COMIENZO DE LA ACTIVIDAD FORMATIVA TRANSVERSAL

4. 20 de diciembre de 2024, 12.30 → **Inauguración de los Seminarios SemiFiQui**
Juan José Nogueira Pérez. BioQuímica computacional.
5. 30 enero de 2025, 12.30
Enrique Cánovas, IMDEA
Time Resolved THz Spectroscopy: a non-contact electrical probe at the nanoscale with sub-ps resolution.
6. 21 de febrero de 2025, 12.30
Marcelino Agúndez, Instituto de Física Fundamental, CSIC.
7. 28 de marzo de 2025, 12.30
Alexander Zanchet, Instituto de Física Fundamental, CSIC.
8. 25 de abril de 2025, 12.30.
Emma Martín Rodríguez, Departamento de Física Aplicada, UAM
Nanopartículas para imagen óptica más allá de la fluorescencia: tomografía de coherencia óptica (OCT) y otras técnicas basadas en scattering de luz.
9. 30 de mayo de 2025, 12.30.
Inés Corral Pérez, UAM

Resúmenes

27 de septiembre de 2024, 12.30.

Métodos de Cribado Virtual. Aplicaciones al diseño de fármacos.

Yoanna María Álvarez Ginarte. Facultad de Química, Universidad de la Habana, 10400, Cuba. yoanna@fq.uh.cu; alvarezmaria.alvarez1@gmail.com

Resumen

Palabras Claves: Cribado Virtual, QSAR, docking, Dinámica Molecular, péptido β -amiloide, Acetilcolinesteras, Alzheimer.

En el proceso de descubrimiento de un fármaco, el primer paso crítico es la identificación de un compuesto líder. Se considera como compuesto líder a aquella molécula que muestra, de algún modo actividad biológica en la que se esté interesado. Un compuesto líder no es un fármaco, pero si debe constituir el primero en ser investigado. Una vez identificado, comienza el proceso de optimización del líder, cuyo objetivo es mejorar su eficacia terapéutica: incremento de su potencia frente a una diana terapéutica (receptor), selectividad frente a dianas relacionadas, farmacocinética, minimización de su toxicidad y efectos secundarios. Los métodos de cribado virtual se emplean en la etapa de investigación de un nuevo compuesto líder con el objetivo de ahorrar tiempo y recursos experimentales, así como, poder explicar cuáles son las propiedades físico químicas que pueden influir en la respuesta biológica de las nuevas moléculas investigadas. Estas técnicas pueden ser clasificadas según su modelado particular de reconocimiento molecular y el tipo de algoritmo usado en la base de datos seleccionada. Cuando disponemos de la estructura tridimensional del receptor (diana terapéutica), bien obtenida por métodos experimentales (cristalografía de rayos X o RMN) o a través de la construcción de modelos moleculares, podemos abordar el diseño de fármacos sobre la base de esa estructura y definimos así a los llamados métodos directos (basados en la estructura). Si no disponemos de las estructuras, aún podemos utilizar éstas técnicas si obtenemos modelos por homología de suficiente confianza. En caso contrario, el diseño de fármacos se puede conseguir mediante métodos indirectos (basados en ligandos), que se basan en el análisis y comparación de propiedades moleculares y datos de afinidad por el receptor para moléculas conocidas, sin tener en cuenta la estructura de dicho receptor. En este trabajo se exponen varios ejemplos de aplicaciones del cribado virtual en familias de compuestos derivados del naftaleno y del donepezilo. Y se realiza por primera vez un estudio de la naturaleza de las interacciones de estas familias de compuestos con las dianas terapéuticas: péptido β -amiloide (β A) y la enzima acetilcolinesterasa (AChE). El procedimiento descrito, constituye un paso de avance en la búsqueda de una metodología rápida y eficaz para el diseño de posibles nuevos candidatos a fármacos para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer.

Viernes 11 de octubre, 12.30.

Monitoring of the synthesis and temporal evolution of tritiated methane mixtures by Raman spectroscopy

Dra. Deseada Díaz Barrero. Tritium Laboratory of Karlsruhe, Institute Astroparticle Physics Karlsruhe, Institute of Technology

Resumen

Palabras clave: catalysis, small molecules, Raman, dynamics/kinetics

Tritium, the radioactive isotope of hydrogen, is an indispensable reagent for future tokamak-type nuclear fusion reactors (like the International Thermonuclear Experimental Reactor, ITER). It also is the key component for the Karlsruhe Tritium Neutrino mass experiment (KATRIN) at the TLK of the Karlsruhe Institute of Technology, which aims to obtain neutrino masses with higher precision. Using tritium in large quantities, radiochemical reactions take place during their circulation through the system, leading to molecular products, such as water isotopologues, Q₂O, and tritiated methane species, CQ₄ normally accumulating in low concentration (where Q can be protium (H), deuterium (D) and tritium (T)). Raman spectroscopy has become an essential analytical tool for the in-line monitoring of these gaseous mixtures. However, spectroscopic knowledge of tritiated methanes is rather incomplete, due to the very low concentrations used in the investigations to date. For the results presented here the CQ₄ compounds were synthesised in large quantities using a stepwise enrichment procedure based on catalytic isotope exchange reactions to increase the concentrations to more than 20%, as well as the rate of tritiation of the methane molecules. Therefore, several vibrational bands could be identified that had not been observed experimentally so far. The resulting mixtures were composed of the family CT_xH_(4-x), as well as the hydrogen molecular isotopologues H₂, T₂ and HT. The composition of the samples has been evaluated by depolarisation Raman spectroscopy, allowing the semi-quantification through the $\nu_1(Q_1)$ bands of the different species of the isotope-substituted methane family. The spectroscopic data also reveal that the composition of the samples evolve over time. Complementary mass spectrometry measurements showed that several of the observed Raman signals correspond to molecules of up to 5 carbon atoms. Our preliminary analysis indicates that the radiochemical processes produce tritiated hydrocarbons with a predominance of fully tritiated ethylene. Keywords — catalysis, small molecules, Raman, dynamics/kinetics

25 de octubre de 2024, 12.30.

Title: Uses of graphene – is it really the wonder material?

Presenter: **Helmut H. Telle** / Departamento de Física Química Aplicada, UAM

Scientists theorized the potential existence and production of graphene for decades, but it was only in the early 21st century that research into graphene has taken off in earnest, culminating in the award of the Prize in Physics in 2010 for the "... ground-breaking experiments regarding the two-dimensional material graphene ..."

In this talk three key aspects in graphene research and applications will be discussed, namely (i) the fundamental structure and properties of graphene; (ii) the functionalization of graphene and its applications in sensing; and (iii) hydrogenated graphene: its production, characterization and potential uses.

30 de enero 2025, 12.30.

Enrique Cánovas, IMDEA Nanociencia

Time Resolved THz Spectroscopy: a non-contact electrical probe at the nanoscale with sub-ps resolution

In this seminar, I will introduce a powerful method established in our lab at IMDEA Nanociencia named Time Resolved THz Spectroscopy. This tool is capable to interrogate the frequency resolved complex (photo)conductivity of a given sample in the THz range ($1 \text{ THz} = 33 \text{ cm}^{-1}$) and do so in a non-contact fashion and with sub-ps resolution ($>10^{-12} \text{ s}$). To illustrate the strength of the method I will show few examples of research lines conducted in our group, lines where we scrutinize the fate and nature of photo-generated (quasi)particles in semiconductors and their nanostructures; with a particular emphasis on unraveling the nature of charge transport in nanostructured inorganic, organic and hybrid systems.