

CENTROS DE INVESTIGACIÓN



CENTRO DE NANOCIENCIA Y TECNOLOGÍAS SOSTENIBLES

1. Constitución de CNATS

La constitución de CNATS como Centro propio de la Universidad Pablo de Olavide se formalizó en Consejo de Gobierno y Consejo Social en julio de 2023. A lo largo del mes de septiembre se constituyó el claustro científico y se elevaron al Rectorado la propuesta de dirección y subdirecciones, y de Comité científico asesor, de acuerdo con lo establecido en su Reglamento. Desde entonces, el Claustro científico de CNATS se ha reunido periódicamente. El Centro se ha estructurado a partir de la distribución de funciones y ha organizado un considerable número de actividades científicas.

2. Jornadas científicas organizadas por CNATS

A lo largo del curso 2023/24, se han organizado desde CNATS las siguientes jornadas científicas, abiertas a toda la comunidad investigadora de la UPO y su entorno:

6 de junio de 2023: **"Nanoscience for sustainable technologies: challenges, opportunities and the role of Southern Europe"**. CNATS "kick-off meeting".

28 de septiembre de 2023: **"1st Workshop on Molecular Simulation of (Crystalline Nanoporous) Materials"**. Ponente: Rocío Semino (París).

19 de octubre de 2023: **"Diffuse Light to Structured Information"**. Ponente: Marina Freitag (Newcastle).

27 de octubre de 2023: **"Spectroscopy and Computational Chemistry: Study of Charge Transport in Organic Electronic Devices"**. Ponentes: Rocío Ponce Ortiz y Carmen Ruiz (Málaga).

24 de noviembre de 2023: **"El mundo nano en medicina"**. Ponente: Pilar López Cornejo (Sevilla).

1 de diciembre de 2023: **“Introducción a la bibliometría: fundamentos, fuentes y herramientas”** .

Ponente: Ángel Delgado (UPO).

24 de enero de 2024: **“Nanobiotechnology: Challenges and opportunities”**. Jornada CNATS-CABD.

Ponentes: personal investigador de CNATS y CABD.

14 de marzo de 2024: **“Nuevas tendencias en técnicas de microscopía electrónica de nanomateriales”**. Jornada CNATS-INMALAB. Ponentes: A.B. Hungria (Cádiz), V. López y A. Fernández (Sevilla).

9 de abril de 2024: **“1st junior CNATS Meeting: Emerging Nanomaterials for Energy Conversion, Environmental and Biomedical Applications”**. Jornada Jóvenes Emergentes. Ponentes: personal investigador pre- y postdoctoral de CNATS.

30 de abril de 2024: **“Tackling the industrial leap for perovskite solar cells”**. Ponente: Trystan Watson (Swansea).

3 de mayo de 2024: **“Dispositivos Nanobiosensores para el diagnóstico precoz y ultrasensible de enfermedades”**. Ponente: Laura Lechuga (Barcelona).

8-10 de mayo de 2024: CNATS en la **Feria de la Ciencia** (Sevilla).

14 de mayo de 2024: **“Simulación Molecular: de átomos a nanomateriales”**. Pint of Science (Sevilla). Ponente: Ana Martín Calvo (CNATS).

17 de mayo de 2024: **“Modulated Techniques to Analyse Photoconversion Devices”** . Ponente: Agustín Álvarez (Amsterdam).

22 de mayo de 2024: **“Contaminación ambiental y sostenibilidad”**. Jornada CNATS y Dep. Sistemas Físicos, Químicos y Naturales. Ponentes: Maite Baeza (Toledo), Rabdel Ruiz (CNATS).

6 de junio de 2024: **“Soft Condensed Matter: Current perspectives and applications for sustainability”**. Ponentes: A. Fernández-Nieves (Barcelona), Ch. Valeriani (Madrid), A. Moncho-Jordá (Granada), M.L. Jiménez (Granada).

20-22 junio de 2024: **“Intelligent characterization of photovoltaic devices from an industrial perspective”**. Curso en la Escuela de Verano de la UPO (Carmona).

26 de junio de 2024: **“La cuarta revolución industrial. Aprendizaje automático: fundamentos y aplicaciones”** Ponentes: J.A. Anta (CNATS), S. Hamad (CNATS), R. Grau-Crespo (Reading), S. Balestra (Sevilla), A. Rojas (CABD), I. Grau-García (Eindhoven).

3. Proyectos de investigación liderados desde CNATS

A lo largo del curso 23/24, CNATS ha liderado diversos proyectos de ámbito europeo, nacional, y autonómico, fuente: <https://investiga.upo.es/unidades/18161/proyectos>). A continuación, se resaltan algunos de los proyectos que están activos, o que han finalizado en 2023/24.

Proyectos de ámbito internacional

1. Valorisation of agro-industrial waste to obtain zeolite-based composite materials and their use in environmental remediation and biofuel production (valzeo). HORIZON-MSCA-2021-SE-01.
2. Customizable AI-based in-line process monitoring platform for achieving zero-defect manufacturing in the pv industry (platform zero). HORIZON-CL4-2021-TWIN-TRANSITION-01.
3. Sensores en línea basados en redes organometálicas luminiscentes para la detección óptica de vapores de explosivos y sustancias tóxicas. M-ERA.net.2019-P7106.
4. Indoor photovoltaics with DYE-sensitized solar cells M-ERA.net. PCI2024-153456.

Proyectos de ámbito nacional

1. Nanoestructuras adaptadas a procesos fotoinducidos y sensórica. PID2019-110430 GB-C22.
2. Toma de decisiones en poblaciones bacterianas: señalización integrada en la interfase planctónico/biofilm. PID2021-126121NB-I00.

3. Constituyentes moleculares y precursores de materia orgánica del suelo en materiales volcánicos de la palma evaluados mediante espectrometría de masas de ultra alta resolución. TED2021-130683b-C21.
4. FENIX 4.0: Análisis de viabilidad y pruebas end-user de apps de prevención y gestión de incendios o desastres naturales para conservación de patrimonio cultural mueble e inmueble. PDC2022-133157-I00.
5. Optimización combinada del binomio material dispositivo para energía solar por aprendizaje automático PID2022-140061OB-I00.
6. Diseño de Membranas Optimizadas para procesos de Separación. CNS2022-136163.

Proyectos con empresas

1. Desarrollo de una nueva herramienta no invasiva para el estudio clínico del endometrio: receptividad y funcionalidad (Empresa Pronacera, CTA-CDTI).

4. Publicaciones científicas lideradas desde CNATS

El personal investigador de CNATS ha participado en 55 artículos científicos y 2 capítulos de libro en el curso 2023/24 (este número resulta de computar la mitad de las publicaciones de 2023 y las 29 publicaciones del primer semestre de 2024, fuente: <https://investiga.upo.es/unidades/18161/publicaciones>). A continuación, se resaltan algunas de ellas:

1. Biocompatible metal-organic frameworks as promising platforms to eradicate HIV reservoirs ex vivo in people living with HIV. *Journal of Materials Chemistry B*, Vol. 12, pp. 5220-5237.
2. Exploring the charge carrier dynamics in carbon nanotubes-TiO₂ composites for water photooxidation. *Catalysis Today*, 438.
3. Face-directed assembly of tailored isorecticular MOFs using centring structure-directing agents *Nature Synthesis*, 3, pp. 33.
4. Insight into the Viscoelasticity of Self-Assembling Smectic Liquid Crystals of Colloidal Rods from Active Microrheology Simulations. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 20, pp. 1579-1589.
5. Hydrogen recovery from steam methane reforming using the ITQ-12 zeolite. *Separation and Purification Technology*, 2024, 350, 127895.

6. Halogen-Decorated Metal-Organic Frameworks for Efficient and Selective CO₂ Capture, Separation, and Chemical Fixation with Epoxides under Mild Conditions. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2024, 16, 20626.
7. Remote sensing to assess the risk for cultural heritage: forecasting potential collapses due to rainfall in historic fortifications. *International Journal of Building Pathology and Adaptation*, Vol. 42, pp. 92-113.
8. A Dynamic Proton Bond: $MH^+ \cdot H_2O \rightleftharpoons M \cdot H_3O^+$ Interconversion in Loosely Coordinated Environments. *Journal of Physical Chemistry Letters*, Vol. 14, pp. 1294-1300.
9. Adsorption of Carbon Dioxide in Non-Löwenstein Zeolites. *Chemistry of Materials*, 35, pp. 5222-5231.
10. Deep Learning-Based Energy Mapping of Chlorine Effects in an Epoxidation Reaction Catalyzed by a Silver-Copper Oxide Nanocatalyst. *Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 127, pp. 21534-21543.
11. Enhancement of the intrinsic fluorescence of ZIF-8 via post-synthetic cation exchange with Cd²⁺ and its incorporation into PDMS films for selective sulfide optical sensing. *Materials Today Chemistry*, 28, 101366.
12. Competition between transport and recombination in dye solar cells at low light intensity. *Solar RRL*, 8, 2400149.
13. The dual nature of metal halide perovskites. *Journal of Chemical Physics* 160, 150901.
14. The Boost of Toluene Capture in UiO-66 Triggered by Structural Defects or Air Humidity. *The Journal of Physical Chemistry Letters* 14, 5618-5623.
15. Enhancement of formic acid production from carbon dioxide hydrogenation using metal-organic frameworks: Monte Carlo simulation study. *Chemical Engineering Journal* 467, 143432.
16. Computer simulation study of nutrient-driven bacterial biofilm stratification. *J. R. Soc. Interface*, 21, 20230618.