

Desarrollo de nuevos **sensores químicos** para la detección rápida y selectiva de **dispositivos explosivos improvisados**

Objetivo del proyecto

Síntesis y caracterización de compuestos orgánicos u organometálicos con propiedades luminiscentes orientados hacia la detección precoz, rápida y con equipamiento ligero de dispositivos explosivos improvisados.

Periodo de ejecución

Del año **2020** al **2023**.

Financiación del proyecto

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Participantes del proyecto

Universidad de Burgos, www.ubu.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Justificación del proyecto

Una amenaza en nuestra sociedad moderna depende de los también llamados dispositivos explosivos improvisados. Estos dispositivos se utilizaron con frecuencia en situación de guerra, pero desde hace algunos años se utilizan en escenarios del día a día constituyendo una amenaza para las vidas de un elevado número de personas. Hay métodos para su detección, pero son costosos y de equipamiento pesado, por ello el desarrollo de

sistemas portátiles y de bajo coste puede ser de gran utilidad en la prevención del uso de estos explosivos. En definitiva, es interesante la búsqueda de sensores químicos de alta selectividad y sensibilidad hacia este tipo de especies.

Funciones de SCAYLE

Se ha utilizado la infraestructura de SCAYLE para cálculos mecanocuánticos de los compuestos sintetizados y su interacción con modelos de explosivos. Esta parte del estudio es de gran relevancia para conocer cómo es la interacción entre las especies implicadas, así como el estudio de estados excitados que ayuden a comprender las modificaciones en las propiedades fotofísicas observadas experimentalmente.



Referencia: PID2019-111215RB-I00

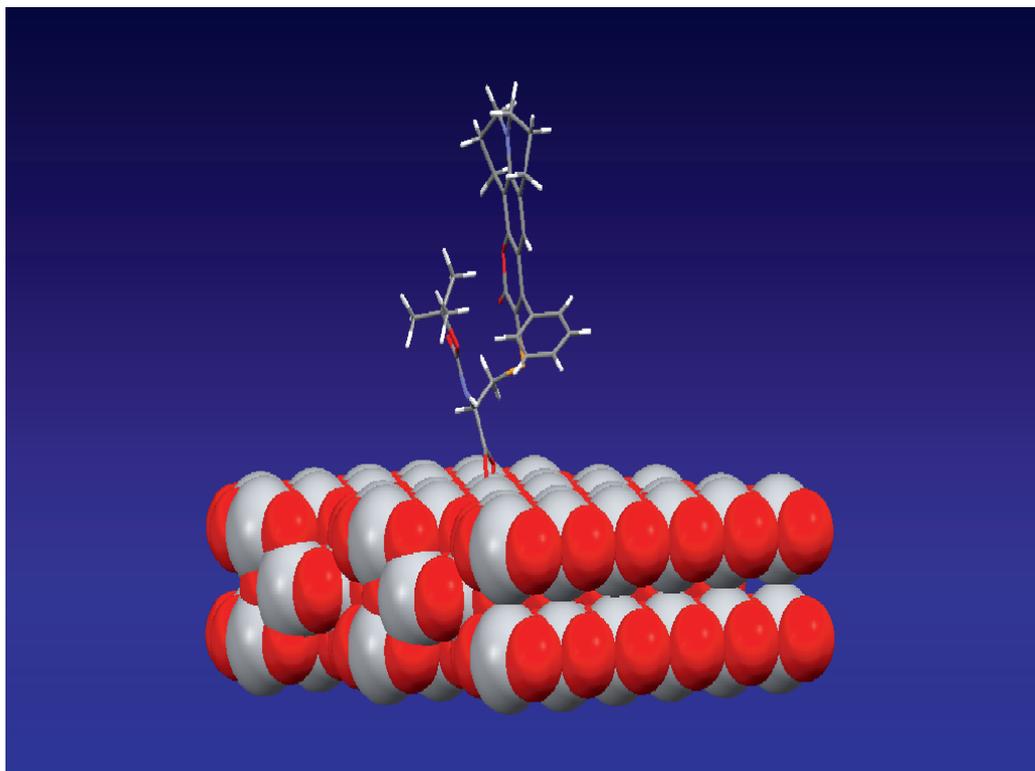
Líder del proyecto

UNIVERSIDAD DE BURGOS.

Profesor Tomás Torroba Pérez

El grupo de trabajo desarrolla nuevos dispositivos moleculares fluorogénicos capaces de detectar contaminación de origen químico o biológico en alimentos y transporte y útiles para la detección de drogas, a través de la investigación básica en nuevos materiales fluorogénicos e investigación transversal en el campo de la defensa química y biológica. Simultáneamente se ha trabajado en la detección de dispositivos explosivos improvisados. El reto específico del grupo es el desarrollo de nuevos métodos para la detección de agentes peligrosos de origen químico o biológico, en especial

toxinas bacterianas, utilizando nuevas sondas fluorogénicas orientadas a la detección e identificación rápida de contaminantes de interés sanitario y medioambiental, así como la detección rápida de explosivos en entornos de alto riesgo. Además, también se trabaja en torno a la síntesis de complejos organometálicos de metales del grupo del platino (en particular Ru, Ir, Rh, Pd, Pt), desarrollando el estudio químico de los compuestos preparados incluyendo propiedades electroquímicas, fotofísicas, anticancerígenas, catalíticas y cálculos mecanocuánticos. Recientemente se encuentra implicado en la búsqueda de nuevos catalizadores para el almacenamiento de hidrógeno por metanación de CO_2 o por conversión de nitrógeno en amoníaco



Modelización de interacción de un derivado carboxilato con el plano 100 de la atanasita. <https://doi.org/10.1039/D1QM01041G>