

Fallo del I concurso de carteles para alumnos de bachillerato “La Química mejora tu vida”

A finales del pasado mes de noviembre, y con motivo del Año Internacional de la Química que se celebra bajo el lema “Química – nuestra vida, nuestro futuro”, el comité editorial de la revista *Anales de Química* de la RSEQ convocó un concurso de carteles dirigido a equipos de alumnos de Bachillerato, que trabajaran bajo la coordinación de un Profesor o Profesores del Seminario de Física y Química de su Centro. El objetivo del concurso era promocionar el interés de los jóvenes sobre la Química y mejorar la imagen que la Sociedad en general tiene de la Química.

El concurso ha tenido una excelente acogida, con más de 100 propuestas recibidas, y el comité editorial de la revista ha tenido que emplearse a fondo para elegir el cartel ganador. El comité editorial de *Anales de Química* ha valorado especialmente la creatividad, así como el rigor científico, los aspectos artísticos y la originalidad de las propuestas. El veredicto del jurado ha sido el siguiente:

Cartel ganador

Premiado con 1.000 euros, diploma acreditativo, y suscripción por tres años a la revista: IES Pedregal de Irimia, Meira (Lugo).

Finalistas

Premiados con diploma acreditativo y suscripción por dos años a la revista: IES Bovalar (Castellón); IES Comuneros de Castilla (Burgos); Colegio Stella Maris (Almería) e IES Rodríguez Delgado, Ronda (Málaga).

Accésit de participación

Reconocido con diploma acreditativo y suscripción por dos años a la revista, a los colegios Nuestra Señora de Agave (Almería), y Nuestra Señora de las Maravillas (Madrid).

El cartel ganador, junto con los de los finalistas, fueron expuestos en el stand de la Real Sociedad Española de Química durante la celebración de la XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ el pasado mes de julio en Valencia. En estas páginas se recogen éstos carteles junto con una selección de algunos de los participantes. Próximamente tendrá lugar la entrega de los galardones en la sede de la RSEQ, y se enviará un diploma acreditativo de su aportación al concurso a todos los centros participantes.

Desde aquí queremos agradecer a todos los centros, alumnos y profesores su participación y la calidad de los trabajos realizados, así como animarles a participar en este tipo de iniciativas siempre que les sea posible.



Cartel Ganador

Comité Editorial *Anales de Química*



IES Bolavar, Castellón

Colegio Stella Maris, Almería

IES Rodríguez Delgado, Ronda, Málaga

IES Comuneros de Castilla, Burgos

Finalistas



¹ Colegio Liceo Europeo, Alcobendas, Madrid. ² IES Almussafes, Almussafes, Valencia. ³ Colegio El Almelar, Paterna, Valencia. ⁴ Colegio Sagrat Cor de Sarrià, Barcelona. ⁵ Colegio Nuestra Señora de las Maravillas, Madrid. ⁶ Colegio Stella Maris, Almería. ⁷ IES Comuneros de Castilla, Burgos. ⁸ Colegio Stella Maris, Almería. ⁹ IES Almussafes, Almussafes, Valencia. ¹⁰ IES Ramos del Manzano, Vitigudino, Salamanca. ¹¹ Colegio El Almelar, Paterna, Valencia. ¹² Colegio Stella Maris, Almería. ¹³ Colegio Nuestra Señora de las Maravillas, Madrid. ¹⁴ IES Cinco Villas, Ejea de los Caballeros, Zaragoza.

Concesión de las Medallas del Grupo Especializado de Química Orgánica de la RSEQ “Felix Serratosa” e “Ignacio Ribas” en su primera edición

El Grupo Especializado de Química Orgánica (GEQOR) de la RSEQ ha concedido la medalla Felix Serratosa a una trayectoria profesional especialmente destacable al Prof. José Luis García Ruano, de la Universidad Autónoma de Madrid. Paralelamente, éste Grupo ha concedido la medalla Ignacio Ribas a una trayectoria profesional especialmente destacable durante los últimos 5 años al Prof. Fernando Pedro Cossío Mora, de la Universidad del País Vasco en San Sebastián. Estas medallas se otorgarán con carácter anual y son un reconocimiento del Grupo a sus miembros más destacados.



Félix Serratosa Palet

Las medallas del GEQOR llevan el nombre de dos Químicos Orgánicos españoles cuyo trabajo ha tenido un impacto significativo en la Química española del siglo XX. Félix Serratosa Palet (Barcelona, 1925-95) fue uno de los pilares de la regeneración científica en España, acometida a mediados de los años cincuenta del siglo pasado. Químico orgánico y humanista, se doctoró en 1953 bajo la dirección del

Prof. José Pascual e investigó (1955-57) con el Prof. N.A. Milas en el MIT. A su regreso a España contribuyó de modo decisivo a la difusión del diseño lógico y racional de la síntesis orgánica, contribuyendo a la síntesis parcial o total de moléculas naturales (patulina) y nuevas (bullvaleno, twistano, triquinacenos, etc.) y al estudio y reactividad de compuestos acetilénicos (en especial éteres acetilénicos). Además de estos trabajos experimentales legó su programa CHAOS para la síntesis orgánica diseñada por ordenador y varios libros relacionados con la síntesis como *Khimos*, *Heurisko*, *Organic Chemistry in Action: The Design of Organic Synthesis*. También publicó una serie de trabajos humanísticos. Fue Profesor de Investigación en el CSIC de Barcelona e impartió docencia en la Universidad Autónoma de Barcelona y en la Universidad de Barcelona, dejando en las tres instituciones una escuela aventajada de discípulos en síntesis orgánica.



Ignacio Ribas Marqués

Ignacio Ribas Marqués nació en Palma de Mallorca en abril de 1901. Estudió el bachillerato en dicha ciudad y Ciencias Químicas en la Universidad de Valencia, pero fue en la Universidad Complutense de Madrid donde se inició en la investigación, siendo uno de los discípulos más destacados del Prof. Antonio Madinaveitia, bajo cuya dirección obtuvo el grado de Doctor en 1926 con la Tesis “Estudio de los ácidos succínicos bisustituídos”. A continuación realizó una estancia posdoctoral de dos años, becado por la Junta de Ampliación de Estudios, en el Institut Pasteur de París, bajo la dirección del Prof. Ernst Fourneau, realizando estudios pioneros sobre la preparación de estovainas ópticamente activas. Regresó a Madrid en 1928, obteniendo ese mismo año la cátedra de Química Orgánica de Salamanca, luego la de Valencia en 1940 y finalmente, en 1942, la de Santiago de Compostela, donde permaneció hasta su jubilación en 1971. Falleció en Santiago de Compostela el 31 de Julio de 1996. Ignacio Ribas fue uno de los promotores del Grupo de Química Orgánica de la RSEQ y el primer Presidente del mencionado Grupo. Francisco Giral, profesor de la Universidad de Santiago exilado, diría de Ribas:

“Arrinconado en Santiago, demostró su entereza y su valor humano realizando un valioso trabajo original de investigación sobre productos naturales españoles (corcho, alcaloides), al tiempo que mantenía una frecuente comunicación con los científicos del exilio”. Todo ello se tradujo en la dirección de 68 Tesis Doctorales y la publicación de 135 artículos científicos.



José Luis García Ruano

El Prof. García Ruano nació en Toledo en 1947. Cursó los estudios de Química en la Universidad Complutense, donde se licenció en 1969 y realizó su tesis doctoral en Química Orgánica, bajo la dirección del profesor Álvarez-Ossorio. Finalizada ésta, en 1973, se trasladó a la Universidad Autónoma de Madrid, donde tras un periodo de dos años trabajando bajo la dirección del profesor Fariña, creó, junto con el profesor Alcudia, un grupo de investigación que trabajó durante más de diez años en el análisis conformacional de compuestos de azufre, especialmente sulfóxidos. Su interés por los aspectos estereoquímicos de estos compuestos hizo posible una transición fluida al campo de la síntesis asimétrica, en el que trabajó desde 1987 investigando las posibilidades de los sulfóxidos como inductores quirales. Recientemente ha iniciado su andadura en organocatálisis, también de la mano de los compuestos de azufre. En 1980 obtuvo la plaza de profesor Agregado en la Universidad Complutense de Madrid, trasladándose con posterioridad a la Autónoma donde fue promovido a Catedrático en 1983. Su producción científica se cifra en unos 310 artículos de trabajos originales y unas 20 contribuciones adicionales como revisiones, libros y capítulos de libros. Ha dedicado más de 40 años al binomio docencia-investigación, que se ha plasmado en la dirección de unas 40 tesis doctorales, habiendo contado para ello, según sus propias palabras, con extraordinarios colaboradores que han facilitado su labor.



Fernando Pedro Cossío Mora

El Prof. Fernando Pedro Cossío Mora estudió Química en la Universidad de Zaragoza y recibió el título de doctor en Química por la Universidad del País Vasco en San Sebastián bajo la dirección del Prof. Claudio Palomo. Después de una estancia posdoctoral en el CNRS trabajando con el Dr. J. P. Picard, volvió a España incorporándose a la UPV como Profesor Titular en 1988 y Catedrático en 2002. Fue Decano de la Facultad de Química de la UPV en el periodo 1999-2001 y Vicerrector de Investigación de esta Universidad los años 2001-2003. En 1994, después de una estancia corta en la UCLA en los laboratorios del Prof. K. H. Houk, orientó su trabajo a estudiar los orígenes de la selectividad en reacciones químicas usando una combinación de métodos teóricos y experimentales. Su interés investigador abarca desde las reacciones pericíclicas a la química médica (diseño teórico y síntesis de inhibidores de integrinas y enzimas epigenéticas). Es uno de los fundadores de la compañía *spin-off* Ikerchem S. L. y, desde 2009, es el Presidente del Comité Ejecutivo de Ikerbasque, la Fundación Vasca para la Ciencia.

Remitido por: **Miguel Ángel Sierra**
Secretario del Grupo Especializado de Química Orgánica

Entrega del Premio Salvador Senent del Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física y la Química (Valencia, 25 de julio)

El grupo especializado de Didáctica e Historia de la Física y la Química convoca cada dos años el Premio Salvador Senent. En su tercera convocatoria, correspondiente al año 2011, se podía presentar cualquier trabajo relacionado con la Didáctica o la Historia de ambas Ciencias, Física o Química. El trabajo seleccionado en esta convocatoria fue el titulado “El Museo Nacional del Prado como recurso Didáctico en Química”, del que es autor Fernando I. de Prada Pérez de Azpeitia, Profesor de Física y Química en el Instituto de Educación Secundaria Las Lagunas, de Rivas-Vaciamadrid (Comunidad de Madrid). El jurado valoró la originalidad y el rigor con el que el autor propone el razonamiento de hechos químicos a partir del análisis de una amplia selección de cuadros que se encuentran en el Museo del Prado. Muestra así una relación entre el arte, la historia y la ciencia, con la que se pretende promover la motivación e interdisciplinariedad en el alumnado. El premio se entregó en Valencia, en el acto de apertura de la XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ, por D^a Pilar Sánchez, Directora de Formación y Apoyo a la Industria del Foro Nuclear, entidad que lo subvenciona. El texto del trabajo se recoge como artículo de la Sección Aula y Laboratorio de este número de la revista.



Fernando I. de Prada Pérez de Azpeitia recibe el Premio Salvador Senent 2011, de manos de D^a Pilar Sánchez, Directora de Formación y Apoyo a la Industria del Foro Nuclear.

Remitido por: **Manuela Martín Sánchez**
 Presidenta del Grupo de Didáctica
 e Historia de la Física y la Química

Jornadas sobre “Química y Deporte”. Sección Territorial de Castilla-La Mancha (Ciudad Real, 6 de junio)

El pasado lunes 6 de junio de 2011 la Sección Territorial de Castilla-La Mancha de la RSEQ celebró en el salón de actos de la Facultad de Químicas de la UCLM unas jornadas sobre “Química y Deporte”.

El programa de estas jornadas consistió en tres conferencias divulgativas dirigidas al público en general y una mesa redonda. La primera conferencia “Los avances de la química y su impacto en el deporte” fue impartida por el Dr. Bernardo Herradón García (Instituto de Química Orgánica General, CSIC-Madrid).

La segunda conferencia titulada “La química analítica como herramienta para la detección de sustancias prohibidas en el deporte” fue impartida por el Dr. Jesús Muñoz-Guerra Revilla, Director del Laboratorio del Control del Dopaje de la Agencia Estatal Antidopaje.

La última conferencia “El desafío de un proyecto integral y transversal en la lucha contra el dopaje en España” fue impartida por D. Francisco Javier Martín del Burgo, Director de la Agencia Estatal Antidopaje. En su intervención destacó la forma de actuación de la Agencia junto con numerosas estadísticas de las que se puede inferir que el mayor número de casos de dopaje esta fuera del deporte de competición.



Mesa redonda de las Jornadas sobre “Química y Deporte”.

Finalmente, se celebró una mesa redonda con la participación de los conferenciantes anteriores y del segundo entrenador del Club Balonmano Ciudad Real (3 veces campeón de Europa, años 2006, 2008 y 2009), D. Raúl González. Esta mesa dio lugar a un animado coloquio debido a los casos de dopaje que han aparecido recientemente en los medios de comunicación.

El acto finalizó con unas palabras de agradecimiento del Director de la Agencia Estatal Antidopaje.

Remitido por: **Julián Rodríguez López**
 Presidente de la Sección Territorial de Castilla-La Mancha

International Workshop on Nanoplasmonics for Energy and the Environment.
(Sanxenxo, Pontevedra, 8-10 de junio)

Los pasados días 8-10 de junio se celebró en Sanxenxo (Pontevedra) el “*International Workshop on Nanoplasmonics for Energy and the Environment*”. Este evento fue organizado por el Grupo de Química Coloidal de la Universidad de Vigo, y ha contado con un comité científico internacional presidido por los profesores Luis Liz Marzán y Tetsuro Majima. El congreso ha contado con un programa oral de 29 conferencias invitadas, así como 80 comunicaciones en cartel, con un número total de



Algunos de los participantes en la reunión en la playa de A Lanzada.

unos 130 participantes de 12 países diferentes. A pesar de que la organización de este *workshop* nació en torno a un proyecto de colaboración entre las Universidades de Vigo y Osaka, ha alcanzado un carácter plenamente internacional y se ha convertido en un foro de discusión al más alto nivel, acerca de los procesos relacionados con la interacción de la luz con nanoestructuras metálicas (nanoplasmonica). Los temas tratados durante el *workshop* incluyeron métodos de síntesis, predicciones teóricas, técnicas avanzadas para la caracterización de modos plasmónicos en nanopartículas individuales, procesos de transferencia electrónica entre nanopartículas y moléculas, aplicaciones para la mejora del rendimiento de células solares, técnicas de detección basadas en cambios de índice de refracción y en dispersión Raman aumentada en superficies (SERS), aplicaciones terapéuticas basadas en hipertermia, o el impacto de las nanopartículas en el medio ambiente. De entre los ponentes se puede resaltar la presencia de algunos de los pioneros en estos campos, como Richard Van Duyne (uno de los padres de SERS), Mostafa El-Sayed (espectroscopista y pionero de las aplicaciones en terapia), Prashant Kamat (procesos de transferencia de carga), Catherine J. Murphy (pionera en la síntesis de nanocilindros de oro), Horst Weller (puntos cuánticos), Albert Polman (células solares plasmónicas), Peter Nordlander (teoría de plasmones), Naomi Halas (*nanoshells* de oro), Wolfgang Parak (aplicaciones en liberación de fármacos), Nicholas Kotov (*self-assembly*), Jochen Feldmann (nano-

manipulación) o Paul Mulvaney (microespectroscopía). Los ponentes españoles fueron: Javier García de Abajo (CSIC, Madrid), Romain Quidant (ICFO, Barcelona) y Ramón Alvarez-Puebla (Univ. Vigo). Todos los asistentes destacaron el excelente ambiente científico y social de la reunión, que se cerró con una mesa redonda en la que se discutió el estado actual de la Nanoplasmonica y los principales retos de cara al futuro.

Dentro de la organización del evento se incluyó la concesión de dos premios en cada sesión de carteles, financiados por las revistas *Langmuir* (*American Chemical Society*) y *Nanoscale* (*Royal Society of Chemistry*). Los ganadores de los premios *Langmuir* fueron: Marie-Claire van Lare (FOM-Institute AMOLF) por su trabajo “*Light trapping in ultrathin a-Si:H solar cells*” y Munish Chanana (Universidad de Vigo), por “*Multi-responsive plasmonic nanoparticles*”. Los ganadores de *Nanoscale* fueron: Beatriz Hernández-Juárez (IMDEA Nanociencia) por “*Silica encapsulation of quantum dots*” y Nicolas Vogel (University of Mainz) por “*Coupling of plasmon modes in nano-crescent dimer structures fabricated by colloidal lithography*”.

Más información acerca del programa y la organización se puede consultar en la página web <http://webs.uvigo.es/nanoplasmonics>.

Remitido por: **Luis Liz Marzán**
Presidente del Comité Científico y Organizador

Jornada sobre “Aspectos didácticos de la Química: contribuciones en el Año Internacional de esta Ciencia”
(Madrid, 22 de julio)

El pasado 22 de julio se celebró una Jornada, para favorecer el intercambio de experiencias y opiniones, entre docentes implicados en la enseñanza de la Química en distintos niveles y entornos educativos, con objeto de mejorar proceso de enseñanza y aprendizaje de esta materia. La Jornada estuvo auspiciada por el grupo de Didáctica e Historia de las Reales Sociedades Españolas de Química y de Física, en colaboración con el Grupo de

Innovación Educativa de Didáctica de la Química de la Universidad Politécnica de Madrid (UPM) y el Instituto de Ciencias de la Educación de esta Universidad. Se celebró en la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la UPM, en forma de ponencias seguidas de debates. Participaron 75 profesores de diversas Universidades y de Institutos de Educación Secundaria de distintas localidades españolas.

Se presentaron las siguientes ponencias: Perspectivas de futuro en Didáctica de la Química (Gabriel Pinto, ETSI Industriales de la UPM); Aprendizaje activo y cooperativo de la Química (María T. Oliver Hoyo, *North Carolina State University*); Necesidades formativas para una industria química competitiva (Cristina González Alonso, Federación Empresarial de la Industria Química Española, FEIQUE); Formación y evaluación de competencias genéricas en las materias de Química (María del Mar de la Fuente, ETSI Industriales de la UPM); Empleo de videos para la enseñanza de la Química: matraces, embudos,...luces, cámara, ¡acción! (Rosario Torralba y Rosa Domínguez, EUIT de Obras Públicas de la UPM); Actividades sobre Didáctica de las Reales Sociedades Españolas de Física y de Química, en el ecuador del Año Internacional de la Química (Manuela Martín Sánchez, Reales Sociedades Españolas de Física y de Química).

Durante la Jornada se hizo entrega del premio ICUC (*The International Center for First-Year Undergraduate Chemistry Education*) a la excelencia académica, a la alumna D^a. Coral Juárez Saugar, que cursa la titulación de Ingeniería Química en la UPM.



Fotografía de los participantes en la Jornada, en la “Sala de la Máquina” de la ETSI Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid.

A lo largo de la Jornada se destacó, entre otros aspectos, la importancia de la formación y evaluación de competencias transversales o genéricas en materias de Química. A este respecto, D^a. Cristina González, en representación de FEIQUE, detalló un reciente estudio, a nivel europeo, sobre las necesidades formativas en relación a este tipo de competencias, planteadas por la industria química. Las ponencias presentadas, fotografías y más detalles de la Jornada se muestran en la dirección web: <http://quim.iqi.etsii.upm.es/didacticaquimica/inicio.htm>.

Remitido por: **Gabriel Pinto Cañón**
Vicepresidente del Grupo de Didáctica e Historia de la Física y la Química

Primera Reunión de la Red Europea de Doctorado de Química Médica “Paul Ehrlich” (Madrid, 13-15 de julio)

Durante los pasados días 13 a 15 de julio, en el Colegio Mayor San Pablo (Madrid), tuvo lugar la Primera Reunión de la Red Europea de Doctorado de Química Médica “Paul Ehrlich”, organizada conjuntamente por las Universidades San Pablo CEU, de Alcalá y Complutense, como parte del Doctorado Interuniversitario de Química Médica (con Mención de Calidad). La reunión fue inaugurada por la Prof. Coral Barbas, Vicerrectora de Investigación de la Universidad San Pablo CEU, el Prof. Joaquín Plumet, Vicerrector de la Universidad Complutense de Madrid, y el Prof. Julio Álvarez-Builla, Decano de la Facultad de Farmacia de la Universidad de Alcalá y Presidente del Comité Organizador.

Esta red tiene como finalidad promover la formación científica de doctorandos en el campo de la Química Médica, facilitar su interacción dentro del campo multidisciplinar de las Ciencias Farmacéuticas y fomentar redes profesionales y personales en toda Europa. En esta reunión se dieron cita más de 50 doctorandos europeos de programas de Doctorado de Química Médica y cerca de 40 investigadores sénior, pertenecientes a 18 universidades y centros de investigación de 6 países europeos.

En el transcurso de la misma se contó con las conferencias plenarias impartidas por la Prof. Nicole J. Moreau (Presidenta



Prof. Nicole J. Moreau (Presidenta de la IUPAC) en el transcurso de su conferencia.

de la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada), con el título “*From molecule to drug. A general & didactic approach*”; la Prof. María Luz López Rodríguez (Presidenta de la Sociedad Española de Química Terapéutica), con el título “*Where Medicinal Chemistry meets Biological Chemistry*” y el Prof. Angelo Carotti (Universidad de Bari), con el título “*A multidisciplinary approach to target beta-amyloid aggregation in Alzheimer’s disease*”.

Remitido por: **Sonsoles Martín Santamaría**
Facultad de Farmacia, Universidad San Pablo CEU

**World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC) 2011
(Santiago de Compostela, La Coruña, 17-22 de julio)**



Un nutrido grupo de participantes en el WATOC-2011 concentrados en la Plaza de la Quintana de Santiago de Compostela.

Del 17 al 22 de julio se celebró en Santiago de Compostela la Novena edición del Congreso de la *World Association of Theoretical and Computational Chemists* (WATOC). Estas conferencias se celebran cada tres años y las sedes se eligen por el *Board* de la Asociación en refiada competencia, entre candidaturas de todo el mundo. La edición actual ha batido todos los records de participación con un total de 1328 participantes de 62 países distribuidos entre todos los continentes. Este número representa un incremento de más del 60% sobre la edición más numerosa hasta la fecha, la de Sydney (Australia) que congregó en 2008 a 812 químicos teóricos de 51 países. En la edición de Santiago se impartieron 11 conferencias plenarias, 235 conferencias invitadas, 130 comunicaciones orales y se presentaron 840 paneles. El Comité organizador premió a los 45 mejores paneles, 15 por sesión. El Congreso, con un fuerte sabor universitario, se desarrolló en el Auditorio de Galicia, donde se llevó a cabo la presentación de las conferencias plenarias, en la Facultad de Economía, donde se celebraron las sesiones de paneles, y en la Facultad de Medicina, donde se desarrollaron cinco sesiones paralelas para la presentación de las conferencias invitadas y las comunicaciones orales. Se organizaron cuatro simposios especiales, dos de ellos dedicados a dos grandes investigadores, todavía en activo: El Prof. Ruedenberg y el Prof. Joan Bertrán, y dos *in memoriam* de dos reconocidos investigadores recientemente fallecidos, el Prof. Luis Serrano Andrés y el Prof. Zvonko Maksic. La sesión inaugural, que contó con la presencia del Presidente de la Xunta de Galicia, D. Alberto Núñez Feijóo, del Rector de la Universidad de Santiago, D. Juan Casares y del

Presidente del WATOC, Prof. Leo Radom, se inició con el espectáculo “*Galicia welcomes you*” a cargo del prestigioso grupo de folklore gallego “SondeSeu”. A lo largo de la semana los participantes tuvieron oportunidad de asistir igualmente a un bellissimo concierto a cargo del grupo “Resonet” en la Catedral de Santiago, de visitar la Ria de Arousa y de degustar en diversas ocasiones típicos productos gallegos, incluyendo excelentes vinos Albariño y Mencía. Entre los participantes se contó con la presencia de los más prestigiosos investigadores en Química Teórica y Computacional del mundo. De hecho a lo largo del WATOC-2011 se hizo entrega de la *Schrödinger Medal* (G. Frenking, E. Baerends y P. Gill) y de la *Dirac Medal* (J. Harvey, D. Crawford, L. González), a los científicos acreedores de estos galardones, los más prestigiosos a nivel mundial en este campo, correspondientes a los años 2009, 2010 y 2011, respectivamente.

La prensa gallega se hizo eco a diario y desde el mismo comienzo del evento de sus actividades, dado el gran impacto que tal congreso tuvo en la Comunidad Gallega en general y en Santiago en particular. En opinión de los participantes (una buena parte de ellos en la foto adjunta) el trabajo desarrollado por los tres organizadores del Congreso, los Profs. Otilia Mó y Manuel Yáñez de la Universidad Autónoma de Madrid y el Prof. Saulo Vázquez de la Universidad de Santiago, perfectamente secundados por sus respectivos grupos de ambas Universidades, hicieron del WATOC-2011 la mejor edición de toda la historia de estos eventos científicos.

Remitido por: **Manuel Yáñez Montero**
Co-Presidente del Comité Ejecutivo

XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ (Valencia, 25-28 de julio)

Entre los días 25 y 28 del pasado mes de julio de 2011, tuvo lugar en el Palacio de Congresos de Valencia la XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ contando con la asistencia de casi 700 participantes inscritos. Durante la reunión se programaron 8 conferencias plenarias y 12 simposios simultáneos que incluyeron 52 conferencias invitadas, previamente elegidas por los miembros del comité científico, 64 conferencias seleccionadas de entre las contribuciones enviadas por los participantes, 292 presentaciones *flash* y 464 carteles. De los 52 invitados, 28 procedían de distintos países europeos, EE UU y Japón. Tanto las conferencias invitadas como las seleccionadas tuvieron una duración de 30 minutos, mientras que las presentaciones *flash* fueron de 5 minutos. Estas últimas, pese a su corta extensión, resultaron muy ilustrativas de la vitalidad de la Química en nuestro país permitiendo una mejor visibilidad de los contenidos de nuestra investigación que la simple presentación de un panel. Cada inscripción dio derecho a la presentación de una única contribución como autor responsable de la misma. Con todo ello se consiguió un alto nivel tanto científico como de participación. Cabe destacar también que la introducción de conferencias seleccionadas permitió una mayor presencia activa a los investigadores jóvenes, muchos de ellos incorporados recientemente a través del Programa Ramón y Cajal.

Las 8 Conferencias Plenarias estuvieron a cargo de los siguientes científicos y versaron sobre las distintas temáticas que se indican en los títulos: Prof. Robert J. Cava, *Department of Chemistry, Princeton University*, EE UU, “*The Impact of Chemical Bonding on the Properties of ThCr₂Si₂-type Phosphides*”; Prof. Eugenio Coronado, Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), Universidad de Valencia, España, “*Chemistry and Magnetism: Towards Molecular Spintronics*”; Prof. Antonio M. Echavarren, *Institut Català d'Investigació Química (ICIQ)*, España, “*Gold-Catalysis: New Cyclizations and Beyond*”; Prof. Gregory C. Fu, *Massachusetts Institute of Technology*, Boston, EE UU, “*Palladium- and Nickel-Catalyzed Cross-Coupling Reactions of Alkyl Electrophiles*”; Prof. John F. Hartwig, *Department of Chemistry, University of Illinois*, EE UU “*Discovery and Understanding of Transition Metal Catalyzed Reactions*”; Prof. Gary M. Hieftje, *Indiana University*, Bloomington, EE UU, “*New Tools and Techniques for Chemical Measurement and Characterization*”; Prof. Prashant V. Kamat, *Department of Chemistry and Biochemistry and Radiation Laboratory, University of Notre Dame*, EE UU, “*Nanostructure Assemblies for Solar Energy Conversion*”; y Prof. Ada E. Yonath, *Weizmann Institute of Science*, Israel, “*A decade of ribosome structures: selected take-home lessons*”.

Durante la Bienal se entregaron los siguientes **Premios de la RSEQ**: Ingeniería Química 2011, patrocinado por CEPSA, Dr. Félix García Ochoa, Universidad Complutense de Madrid; Química Física 2011, patrocinado por Bruker Española, Dr. Feliu Maseras Cuni, ICIQ; Química Inorgánica 2011, patrocinado por Bruker Española, Dr. Antoni Llobet Dalmases, ICIQ; Química Orgánica 2011, patrocinado por Janssen Cilag, Dr. Hermenegildo García Gómez, Universidad Politécnica de Valencia; Premio Hispano-Alemania Elhúyar-Goldschmidt 2011, Dr. Christian Griesinger, *Institute for*



Acto de apertura de la XXXIII Reunión Bienal y entrega de Premios de la RSEQ.

Biophysical Chemistry, Göttingen; Premio Hispano-Húngaro Gamboa Winkler 2010, Dra. Katalin Köver, *University of Debrecen*; Premio Hispano-Francés Catalán-Sabatier 2009, Dr. Max Mallacria, UMPC, Paris y; Premio Conferencia Lilly, patrocinado por Lilly, Dr. Rubén Martín Romo, ICIQ. También se entregaron los **premios ChemBioChem** (Javier Parra Carbonell), *ChemCatChem* (Cristina Pubill-Ulldemolins), *Eur. J. Org. Chem.* (Mónica Pérez Temprano), y *Eur. J. Inorg. Chem.* (Francisco J. Martínez Lillo), a los mejores paneles y comunicaciones *flash* en los simposios correspondientes, patrocinados por *Wiley VCH*. Algunos **grupos especializados** también patrocinaron diversas actividades: Grupo Especializado de Didáctica e Historia de Física y Química, Premio Salvador Senent a Fernando I. de Prada Pérez de Azpeitia (ver noticia en esta sección), patrocinado por el Foro Nuclear; Grupo Especializado de Calorimetría y Análisis Térmico, Premio GECAT a la mejor comunicación de jóvenes investigadores sobre Calorimetría y Análisis Térmico a Antonio Muñoz Fernández; y Grupo Especializado de Química Biológica a la mejor presentación *flash* presentada por un investigador joven a Natalia Pérez Hernández.

La Reunión contó con el MICINN como principal patrocinador y la colaboración económica de la Generalitat Valenciana, Universidad de Valencia, Universidad Politécnica de Valencia, de las empresas patrocinadoras de los premios antes mencionados y de Agilent Technologies y Sigma-Aldrich.

Se celebró durante la Bienal la constitución y primera reunión del Grupo Especializado de Química Biológica de reciente creación, a cuyos miembros estaba dirigido uno de los simposios organizados.

Durante la Bienal se presentó la exposición “Entre Moléculas” cedida por el CSIC, y se exhibieron los audiovisuales que habían sido presentados al concurso “Reacciona” organizado por la Sección Territorial de Valencia de la RSEQ y la Ciudad de las Ciencias con el patrocinio de las Universidades de Valencia y Politécnica de Valencia, para conmemorar el Año Internacional de la Química, entregándose así mismo los correspondientes premios en las categorías de Estudiantes Universitarios y de Bachillerato.

Remitido por: **Gregorio Asensio Aguilar**
Presidente del Comité Organizador

**46th IUPAC General Assembly and IUPAC World Chemistry Congress
(San Juan, Puerto Rico, 30 de julio-5 de agosto)**

A medida que los delegados de países de todo el mundo llegaban a San Juan de Puerto Rico para la Asamblea General de la IUPAC, se hacía evidente que esta reunión de Química es la más internacional de entre todas las que se celebran a lo largo del año. Delegados de setenta países, algunos con vistosos trajes tradicionales, llenaron las salas donde, divididos en distintas comisiones, discutieron temas de interés para la comunidad científica internacional. Como si se tratase de la ONU de la ciencia, los delegados, identificados por un cartel con el nombre y bandera de sus respectivos países, aprobaron algunas de las normas y medidas que rigen nuestro trabajo diario, la colaboración con otras sociedades internacionales y actividades que se celebrarán durante el Año Internacional de Química. Entre las reuniones que se celebraron durante la Asamblea General destacó el *World Chemistry Leadership Meeting* en la se debatieron las distintas formas en las que la Química contribuye a la producción sostenible de energía, agua, alimentos y medicinas. En esta reunión, expertos mundiales, líderes de grandes empresas y científicos de renombre destacaron pasos concretos para que la Química nos permita mantener sostenible a un mundo con siete mil millones de habitantes.

Más de 2.800 personas asistieron al Congreso Mundial de Química, que a la vez que la Asamblea General de la Química, se celebró en el Palacio de Congresos de San Juan de Puerto Rico. Siete premios Nobel, Aaron Ciechanover, Richard Ernst, Ada Yonath, Roald Hoffmann, Mario Molina, Richard Schrock y Robert Grubbs, pronunciaron sendas conferencias plenarias que llenaron cada día el auditorio central. Más de 1.100 contribuciones científicas, repartidas en 210 sesiones y 35 simposios completaron un programa científico amplísimo que incluyó temas tan variados y rele-

vantes como Fuentes Alternas de Energía, Análisis Químico e Imagen, Educación Química y Patrimonio, Química y Medio Ambiente, Química de la Vida, Síntesis Química, Química Industrial y Aplicada, Ciencia de Materiales, Química Macromolecular, Supramolecular y Nanotecnología, Química Física, Teórica y Computacional.

Pero la IUPAC, co-organizadora con UNESCO del Año Internacional de la Química, no podía olvidar que este año celebramos la gran fiesta de la Química. Decenas de actividades educativas y de divulgación acompañaron el extenso programa científico del congreso y las interminables reuniones de la Asamblea General de la IUPAC. Estas actividades no se quedaron restringidas al Palacio de Congresos. El 31 de julio, se celebró el Festival de la Química en el viejo San Juan que atrajo a numerosas personas que realizaron experimentos sencillos como el Experimento Global del AIQ. El ganador de un Oscar, Michael Wadleigh, presentó su documental "*Homo Sapiens Report*" sobre el impacto la actividad humana sobre el Planeta. Además se llevaron a cabo más de 30 cursos de educación continua abiertos a educadores y científicos puertorriqueños. Se entregaron ocho premios a 8 mujeres por sus contribuciones a la Química y los premios de la IUPAC a Jóvenes Químicos. Desde aquí queremos felicitar a Rubén Costa, de la Universidad de Valencia, que fue uno de los ganadores de la edición de este año.

El próximo Congreso Mundial de Química se celebrará en Estambul en agosto 2013. Apunta esta fecha en tu calendario y no te pierdas la mayor celebración de los avances y contribuciones de la Química.

Remitido por: **Javier García Martínez**
Miembro de la División de Inorgánica de la IUPAC



Participantes en el Festival de Química que llenó de color el viejo San Juan en la tarde del domingo.



Año Internacional de la QUÍMICA 2011

Sección especial “Actividades con motivo del Año Internacional de la Química 2011”

Como nuestros lectores han ido leyendo a lo largo de los números anteriores, *Anales* ha dedicado algunas de sus páginas a dar difusión a algunas de las actividades especiales que diferentes organismos o instituciones han organizado con motivo del Año Internacional de la Química. Nos encontramos en los últimos meses de esta celebración, por lo que las actividades que se destacan en este número vienen a dar fin a esta sección. Agradecemos a todos aquellos que han participado en ella haciéndonos llegar sus anuncios.

En las siguientes páginas web se puede encontrar información completa y actualizada:

- Foro Química y Sociedad: http://www.quimicaysociedad.org/anio_internacional_quimica.php
- Los Avances de la Química: <http://www.losavancesdelaquimica.com/>
- CSIC: www.quimica2011.es
- International Year of Chemistry: <http://www.chemistry2011.org/participate/activities/>

Año Internacional de la Química IYC 2011 – Ceremonia Internacional de Cierre

El Año Internacional de la Química 2011, decretado por la Asamblea General de las Naciones Unidas bajo los auspicios de la UNESCO y de la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC), ha sido y está siendo celebrado con gran éxito en todo el mundo en este año de aniversario de la concesión del Premio Nobel de Química a Marie Curie. El entusiasmo de los jóvenes, profesores, investigadores, la contribución de las industrias y el interés del público general, están contribuyendo a crear una conciencia internacional sobre la importancia de la Química y su contribución vital al bienestar de la humanidad.

El próximo 1 de diciembre tendrá lugar en Bruselas la ceremonia de clausura del Año Internacional de la Química, que hará hincapié en la creatividad y el potencial de la Química para hacer frente a los desafíos actuales de nuestra sociedad. Investigadores consagrados y emergentes debatirán sobre cómo la Química es de vital importancia para dar solución a nuestros problemas globales más críticos, entre ellos aquéllos relacionados con la alimentación, el agua, la salud, la energía, el medio ambiente y mucho más.



Logo de la IUPAC



Organización de las Naciones Unidas para la Educación, la Ciencia y la Cultura

Logo de la UNESCO

Cuándo: 1 de diciembre de 2011.

Dónde: Bruselas.

Web: <http://iyc2011.conceptum.eu>

Acto de Clausura del Año Internacional de la Química en Barcelona



El Día de la Química 2011, a celebrar en Barcelona el 15 de noviembre, tendrá una especial significación: la efeméride acogerá la Ceremonia Oficial de Clausura del Año Internacional de la Química 2011 en España. Ponentes de las organizaciones del Foro Química y Sociedad hablarán en la Clausura del AIQ 2011 de la contribución de la Química a la mejora presente y futura de la calidad de vida. Durante la ceremonia tendrá lugar la presentación del primer Informe de Responsabilidad Social del Sector Químico.

La Clausura del AIQ 2011 tendrá lugar en el marco de Expoquimia - Salón Internacional de la Química. El Certamen es una de las citas europeas más importantes para

las empresas y profesionales del sector químico, una combinación única de plataforma comercial y encuentro científico que asimismo, quiere dar soluciones a mercados emergentes como energías alternativas, biotecnología, farma industrial, química fina y sectores relacionados con la alimentación. De enero a diciembre, continuando aún después de su fecha de clausura oficial, el calendario de actuaciones para el AIQ 2011 se ha visto complementado con más actividades conmemorativas de diversos ámbitos.

Dónde: Salón Internacional de la Química-Expoquimia, Barcelona.

Cuándo: 15 de noviembre de 2011.

Web: www.quimicaysociedad.org/celebracion.php?id=636&vfv=dia_quimica.php

Expoquimia

Dónde: Recinto Ferial de Gran Vía, Barcelona.

Cuándo: 14 al 18 de noviembre de 2011.

Web: www.expoquimia.com

Un día con Química

La Facultad de Farmacia de la Universidad San Pablo CEU participa en las actividades que se han venido realizando a lo largo del año 2011 con motivo de la celebración del Año Internacional de la Química. Para ello, organiza una Jornada Científica en la que se contará con una serie de conferencias invitadas y la participación de alumnos de Grado y Licenciatura a través de un concurso de comunicaciones en forma de póster sobre el impacto de la Química en la salud y en la alimentación. Esta actividad cuenta con el patrocinio de la Sección Territorial de Madrid de la Real Sociedad Española de Química.

Las conferencias estarán a cargo de: Graham Cooks (Purdue University), Javier Fernández Gadea (Laboratorios Janssen-Cilag), Tomás Torroba (Universidad de Burgos), Julio San Román (Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, CSIC) y Lourdes Prieto (Laboratorios Lilly).

Cuándo: 16 de noviembre de 2011.

Dónde: Facultad de Farmacia, Universidad San Pablo CEU. Campus de Montepríncipe.

Plazo de inscripción: 1 de noviembre de 2011.

Web: www.farmacia.uspceu.es

Aragón con el Año Internacional de la Química



Aragón se ha querido unir a la celebración del AIQ y por ello entidades como la Universidad de Zaragoza, CSIC, RSEQ, la Federación de Empresas Químicas y Plásticos de Aragón, el Colegio Oficial de Químicos de Zaragoza, la Real Academia de Ciencias de Zaragoza, la Cátedra Savirón de Divulgación Científica y la Asociación Ciencia Viva han organizado conjuntamente, entre otras actividades, un ciclo de conferencias. Todavía podemos asistir a las dos últimas conferencias: “Química y música: la extraña pareja”, impartida por Santiago Álvarez (Universidad de Barcelona), y “Conversaciones en la Aljafería”, conferencia de clausura impartida por José Elguero (IQM-CSIC).

“Química y música: la extraña pareja”

Cuándo: 20 de octubre de 2011.

Dónde: Facultad de Ciencias de Zaragoza, Campus San Francisco.

“Conversaciones en la Aljafería”

Cuándo: 21 de noviembre de 2011.

Dónde: Palacio de la Aljafería

Web: http://www.quimica2011.es/sites/default/files/folleto_ciclo_de_conferencias_aiq11_aragon_7.pdf

El CSIC en el AIQ 2011: más de 50.000 visitas y 2.500 descargas

El portal web que el CSIC ha puesto en marcha con motivo de la conmemoración del Año Internacional de la Química ha superado las 50.000 visitas en poco más de 6 meses y medio: desde que se lanzó la página, coincidiendo con la inauguración de la conmemoración en España el 8 de febrero de 2011, hasta el domingo 28 de agosto de 2011, ha recibido un total de 51.933 visitas por parte de 38.529 visitantes únicos, con 233.807 páginas vistas. Las 51.933 visitas proceden de un total de 72 países/territorios. Los diez con un mayor tráfico de visitas son España (22.737), Colombia (7.608), México (5.663), Argentina (3.466), Uruguay (2.858), Chile (2.060), Perú (1.640), Venezuela (1.387), Panamá (1.174) y Ecuador (535). Así, el 43,78% de las visitas proceden de España, principalmente de ciudades como Madrid, Barcelona, Valencia, Sevilla, Zaragoza, Murcia, Oviedo, Granada, Valladolid o La Coruña. Asimismo, se han producido más de 2.500 descargas del material didáctico que se puede obtener gratuitamente en las páginas web de la exposición virtual y las unidades didácticas.



Web: www.quimica2011.es

Exposición virtual: <http://www.quimica2011.es/exposici%C3%B3n-virtual>

Unidades didácticas: <http://www.quimica2011.es/materiales-did%C3%A1cticos/unidades-did%C3%A1cticas>

Concurso de vídeos del AIQ de ChemistryViews. Anuncio del vídeo ganador

ChemistryViews ha organizado un concurso de vídeos sobre lo que supone la *Química en la vida diaria*, especialmente en la mejora de la salud y del medio ambiente, aunque también se tendrán en cuenta otras temáticas. El vídeo puede estar realizado en torno a experimentos serios, de ficción, composiciones humorísticas, animaciones o combinación de diferentes formatos. También se ha podido participar votando por los diferentes vídeos enviados. El anuncio del vídeo ganador tendrá lugar el 1 de diciembre.



Cuándo: 1 de diciembre de 2011.

Web: www.chemistryviews.org

El impacto de la Química en el diagnóstico y el tratamiento médico

La Fundación de Ciencias de la Salud y el CSIC colaborarán en la difusión de la investigación científica y del desarrollo tecnológico. En este contexto, la primera actividad conjunta que llevarán a cabo ambas entidades será la organización de la jornada específica divulgativa “El impacto de la química en el diagnóstico y el tratamiento médico”, que pretende servir de foro para debatir los temas relacionados con el desarrollo científico y tecnológico en ambas materias, y potenciar su difusión a la sociedad general. Este acto tendrá lugar en el Campus del CSIC de Madrid, el próximo 17 noviembre, enmarcándose así dentro de las celebraciones del Año Internacional de la Química.



Las conferencias estarán a cargo de: Manuel Martín Lomas (CICbiomaGUNE), Ana Martínez Gil (IQM-CSIC), José Luis García López (CIB-CSIC) y Juan Luengo (GSK).

Cuándo: 17 de noviembre de 2011.

Dónde: Instituto de Química-Física Rocasolano, CSIC. Madrid.

Web: www.fcs.es

Cristales de NaCl en forma de tolva

La utilización de ligandos orgánicos o aditivos, así como la creación de interfaces aire/líquido, líquido/líquido o sólido/líquido, figuran entre algunos de los métodos más comunes para el control de la velocidad de crecimiento de cristales inorgánicos a lo largo de distintos planos cristalográficos y por tanto para la producción de cristales de distintas morfologías.

Siguiendo esta línea, científicos de la Academia China de Ciencias y de la Universidad de Ciencia y Tecnología China han presentado un nuevo método que permite controlar el autoensamblado de sales inorgánicas, como NaCl y KCl, generando así cristales en forma de tolva o tronco de pirámide para estos compuestos (Figura 1), que normalmente cristalizan en forma de cubos regulares (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 6044-6047). Estos inesperados cristales crecen en la interfaz, formada por microgotas metaestables de agua, y una fase apolar, formada por una mezcla de acetona y ciclohexano. La función de las moléculas de ciclohexano es doble; por un lado, reducen la velocidad de difusión de la acetona en las gotas de agua, lo que resulta en la sobresaturación de la sal inorgánica y origina, por tanto, la nucleación, al mismo tiempo que bloquean el crecimiento del cristal a lo largo de los planos directamente en contacto con el disolvente orgánico.

De acuerdo con los autores, esta estrategia y el mecanismo propuesto podrían extenderse para controlar la cristalización de otras sales solubles en agua.



Figura 1. A partir de la adición de una disolución acuosa de NaCl a una mezcla de acetona y ciclohexano, científicos chinos preparan cristales de NaCl en forma de tolva, en lugar de los típicos cristales cúbicos en los que cristaliza la sal.

Imán monomolecular organometálico

Científicos de las Universidades de Pekín y Normal de Beijing han preparado y caracterizado una nueva molécula imán organometálica formada a partir de un compuesto tipo sandwich mixto, en el que un átomo de erbio(III) se encuentra coordinado a ligandos aniónicos aromáticos de pentametilciclopentadienilo ($C_5Me_5^-$) y ciclooctatetraenilo ($C_8H_8^-$), (*J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 4730-4733).

Los autores atribuyen las propiedades magnéticas de este compuesto, como la histéresis magnética y la existencia de dos procesos de relajación térmica con altas barreras energéticas, a la estructura cíclica de los ligandos. Dentro del complejo, los dos anillos aromáticos no están dispuestos de forma paralela, siendo el ángulo de inclinación entre ellos próximo a 8° , y encontrándose el ión metálico más próximo al anillo de mayor tamaño (Figura 2). La gran distancia de 7.030 Å entre átomos de Er consecutivos, junto a la disposición perpendicular de moléculas contiguas sugieren que no existen fuerzas intermoleculares o que, en caso de haberlas, éstas deben ser pequeñas.

Según los autores, los efectos cuánticos únicos que caracterizan estos compuestos los convierten en prototipos idóneos para el diseño de nuevas moléculas imán con aplicaciones en los campos del almacenamiento de información y computación cuántica.

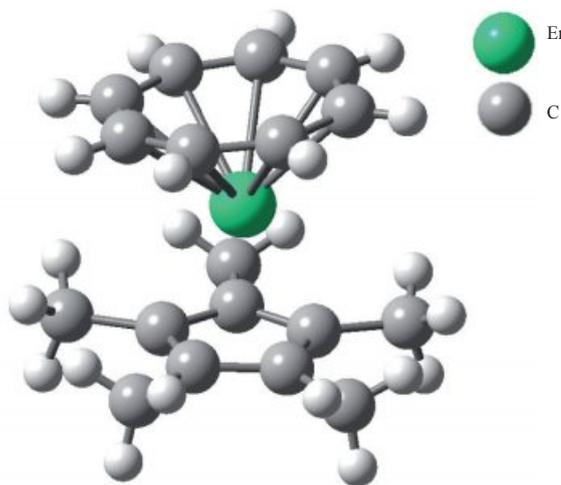


Figura 2. Científicos chinos descubren las propiedades magnéticas de un imán molecular tipo sandwich en el que un átomo de Er(III) coordina dos ligandos aniónicos aromáticos.

¡A la captura de CO₂!

Inspirándose en un estudio teórico en el que se caracterizan las interacciones entre moléculas de CO₂ y compuestos heterocíclicos nitrogenados (*ChemPhysChem* **2009**, *10*, 374-383), un equipo internacional de científicos canadienses y coreanos ha preparado un polímero orgánico microporoso, funcionalizado con grupos tetrazol, y caracterizado por una alta permeabilidad al CO₂, así como por una elevada selectividad frente a mezclas de CO₂ y otros gases ligeros (*Nature Mater.* **2011**, *10*, 372-375).

Para la síntesis de dicho polímero, los autores llevan a cabo una cicloadición [2+3] entre los grupos nitrilo del polímero microporoso, PIM-1, utilizado como plataforma, y la azida sódica (Figura 3), lo que resulta en la formación de grupos tetrazol. Estos heterociclos confieren una mayor rigidez al polímero, debido a los fuertes enlaces de hidrógeno que se establecen entre cadenas adyacentes, a la vez que disminuyen el tamaño de las cavidades del mismo, al enlazar moléculas

de CO₂, lo que impide la adsorción y el transporte de los gases más ligeros en una mezcla gaseosa.

Según los autores una vez optimizada, la captura de CO₂ a partir de estos polímeros supondría una alternativa económica y más eficiente desde un punto de vista energético a otras tecnologías convencionales a partir de disoluciones acuosas de aminas.

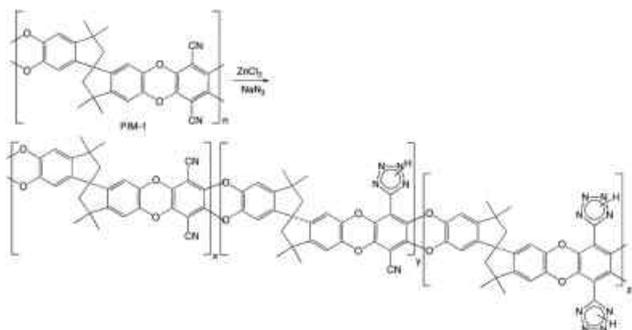


Figura 3. La cicloadición [2+3] entre los grupos nitrilo del polímero y azida sódica resulta en la formación de tetrazoles, aumentando la permeabilidad y selectividad del polímero hacia el CO₂ en una mezcla de gases.

Difosfinas contorsionistas

Isomerismo homeomórfico es el término mediante el cual se conoce la propiedad por la que algunas moléculas, como determinados macrociclos bicíclicos, son capaces de voltearse sobre ellos mismos.

A partir del estudio de espectros de RMN ³¹P, un equipo internacional que reúne investigadores de las Universidades Texas A&M y Friedrich-Alexander de Erlangen-Nürnberg ha conseguido esclarecer este mecanismo de isomerización para los estereoisómeros de la difosfina bicíclica alifática de la Figura 4 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 6647-6651). Dicha difosfina posee tres estereoisómeros nombrados en función de la orientación relativa, interior o exterior, del par solitario sobre los átomos de fósforo como *in,in*, *out,out* o *in,out* (Figura 4).

En contra de lo esperado, ya que la energía de inversión para los átomos de fósforo es demasiado elevada para poder ocurrir este proceso a temperatura ambiente, los autores

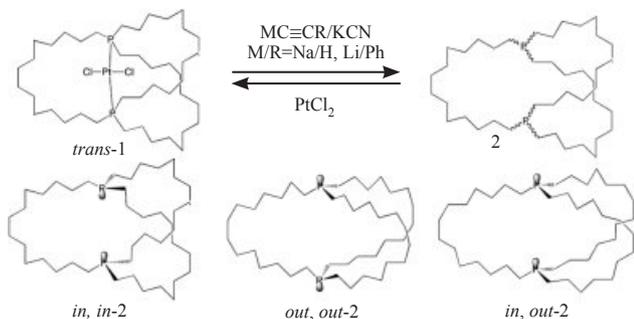


Figura 4. A partir del análisis de espectros RMN ³¹P, investigadores estadounidenses y alemanes esclarecen el mecanismo de isomerización homeomórfica para una difosfina bicíclica alifática.

observan dos señales en el espectro RMN ³¹P de la difosfina, que sintetizan a partir del compuesto *trans*-1 con nucleófilos tipo MC≡CR donde (R=Li, Na) o KC≡N (Figura 4). Estas dos señales corresponden a los dos isómeros más estables *in,in*, (señal más intensa) y *out,out*. La existencia de estas dos señales junto a conclusiones extraídas de modelos teóricos descartan que la isomerización ocurra a partir de la inversión de los átomos de fósforo, apuntando más bien a que el proceso se produce a partir del deslizamiento de una de las cadenas alifáticas de (CH₂)₁₄ a través del macrociclo formado por las otras dos cadenas.

De acuerdo con los autores entender este tipo de isomería resulta fundamental para controlar el secuestro, transporte y liberación de huéspedes tipo ácido Lewis.

No sin van der Waals...

Un grupo de investigadores españoles ha demostrado recientemente el papel fundamental que las fuerzas de van der Waals juegan a la hora de determinar la geometría de las monocapas de grafeno crecidas sobre superficies de metales de transición, dando a conocer aspectos fundamentales relativos a sus estructura (*Phys. Rev. Lett.* **2011**, *106*, 186102).

La optimización del proceso de crecimiento de grafeno en superficies compactas de metales de transición es fundamental para su producción a escala industrial, dado que este método es uno de los más eficientes a la hora de producir muestras suficientemente grandes y sin defectos. En muchos casos, la diferencia entre la constante reticular del grafeno y del sustrato metálico provoca una perturbación periódica en las propiedades electrónicas y morfológicas del grafeno y del sustrato (Figura 5). Estas modificaciones complican el estudio experimental del sistema hasta tal punto que se requiere de cálculos teóricos para complementar la interpretación de los experimentos. Este grupo de investigadores ha demostrado como la inclusión de las fuerzas de van der Waals en cálculos basados en la teoría del funcional densidad (DFT) es fundamental para la correcta descripción de la corrugación geométrica de la monocapa de grafeno, debido al efecto atractivo ejercido por el sistema aromático extendido. Esta modificación de la teoría DFT es necesaria para reproducir correctamente el comportamiento observado en los experimentos de microscopía de efecto túnel a bajo voltaje.

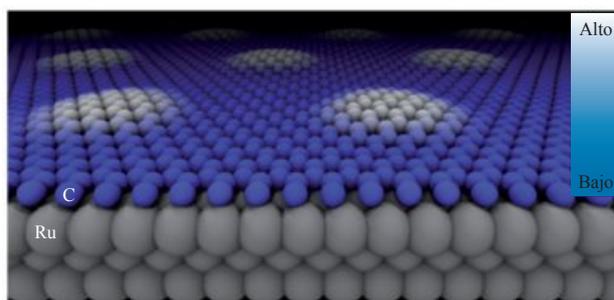


Figura 5. Las fuerzas de van der Waals disminuyen sensiblemente la corrugación de las monocapas de grafeno periódicamente nanoestructurado adsorbido en metales de transición.

Eliminación en lugar de sustitución

Desafiando los métodos tradicionales basados en la sustitución de esqueletos aromáticos preexistentes para la obtención de bencenos con un determinado patrón de sustitución, científicos de la Universidad de Wisconsin-Madison diseñan una estrategia para la síntesis de fenoles a partir de sus correspondientes ciclohexanonas (*Science* **2011**, 333, 209-213).

El nuevo método, que permite incluso generar fenoles meta sustituidos, consiste en la deshidrogenación sucesiva de dos enlaces C-C saturados de la ciclohexanona, utilizando un catalizador de Pd(II) y oxígeno molecular como aceptor de hidrógeno (Figura 6). Los rendimientos de esta reacción mejoran con la utilización *o*-dimetilaminopiridina como ligando y la adición de ácido *p*-toluensulfónico, encargado de protonar la amina terciaria sobre la piridina. Estudios mecanísticos preliminares, realizados a partir del seguimiento de la conversión de ciclohexanona a fenol, revelan la disociación del sustrato y el catalizador tras cada deshidrogenación (Figura 6).

Los autores del trabajo apuntan al desarrollo de nuevos métodos de oxidación aeróbica más seguros y escalables como punto fundamental para el traslado de estos métodos de deshidrogenación a nivel de laboratorio e industrial.

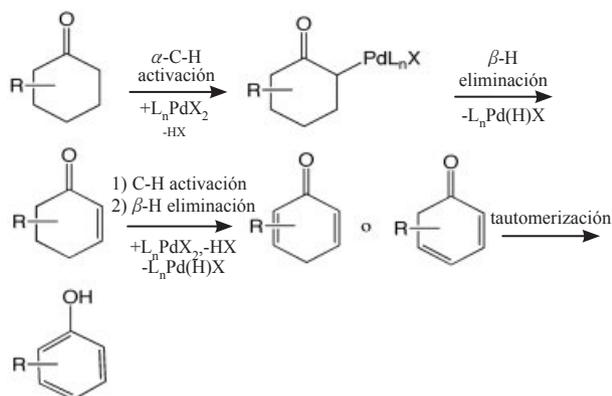


Figura 6. Un sistema catalizador de paladio(II) que incorpora un ligando *o*-(*N,N*-dimetilamino)piridina permite la conversión de ciclohexanonas sustituidas en sus correspondientes fenoles.

El olor de la estereoquímica

A través de una original combinación de cálculos mecanocuánticos y espectroscopia de microondas de haz molecular con transformada de Fourier (MB-FTMW) investigadores suizos y alemanes de la firma de fragancias Givaudan y la Universidad de Aachen han conseguido profundizar en el origen químico del aroma de casis (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, 50, 5576-5580), presente en perfumes como *Le monde est beau* de Kenzo o *DKNY Be Delicious* de Donna Karan.

Una vez sintetizados todos los estereoisómeros del casirano (**1**) y sus dihidroderivados (**2**), los autores miden las constantes rotacionales de los distintos conformeros, que comparan con las calculadas mediante teoría de perturbaciones de segundo orden (MP2), y caracterizan sus propiedades olfativas. De manera general, observan que los estereocentros C2 y C5 definen el carácter, afrutado o agreste, del aroma de cada

enantiómero, o determinan la intensidad de su olor. Así por ejemplo, la configuración *5R* confiere tanto al casirano como a su dihidroderivado una fragancia herbal similar a la del romero, mientras que los isómeros *5S* se caracterizan por su olor a fruta. Asimismo, la intensidad del olor de los estereoisómeros *2S* es sustancialmente mayor que la de los *2R* (Figura 7).

A partir del análisis de superposición entre compuestos similares, los autores son capaces de determinar qué características estructurales están asociadas a ciertos olores, poniendo de relieve la utilidad de la correlación estructura-olor y por tanto de la espectroscopia de microondas y los cálculos teóricos en la química de los perfumes.

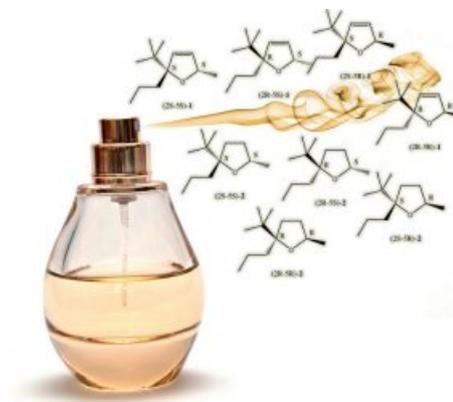


Figura 7. La configuración de los estereocentros C2 y C5 determina la intensidad y el carácter del olor de los distintos estereoisómeros de la molécula de casirano.

Cables de agua para la transferencia acoplada protón-electrón en metaloenzimas

Los procesos de transferencia electrónica acoplada a protones (PCET, por sus siglas en inglés) son de enorme importancia tanto en reacciones biológicas (fotosíntesis y respiración celular) como en pilas de combustible. Estos procesos tienen lugar incluso cuando dador y aceptor se encuentran separados por grandes distancias (del orden del nm), lo cual implica que deben ser mediadas por el esqueleto proteico de los enzimas en los que ocurren o bien por el disolvente.

Investigadores de las Universidades Autónoma de Madrid y Granada han desentrañado por primera vez, con ayuda de cálculos teóricos, el mecanismo de transferencia electrónica mediada por moléculas de agua, entre los dos centros de Cu del centro activo del enzima monooxigenasa α -hidroxilante de peptidilglicina (*Chem. Eur. J.* **2011**, 17, 8318-8323).

Los autores del estudio modelizan el centro activo mediante dos complejos de Cu conectados a través de tres moléculas de agua, en los que sustituyen los aminoácidos histidina y metionina por metilimidazol y etil metil tioéter, y optimizan el estado de transición responsable de la PCET desde el agua, coordinada al Cu_{Histidina}, al ligando oxigenado sobre el Cu_{Metionina} (Figura 8). Este proceso, que involucra la rotura y formación de 6 enlaces O-H en una única etapa, supone energías libres de activación y reacción a 298 K de 10,1 y 4,4 kcal/mol, respectivamente, compatibles con temperaturas fisiológicas. Asimismo, los autores simulan la

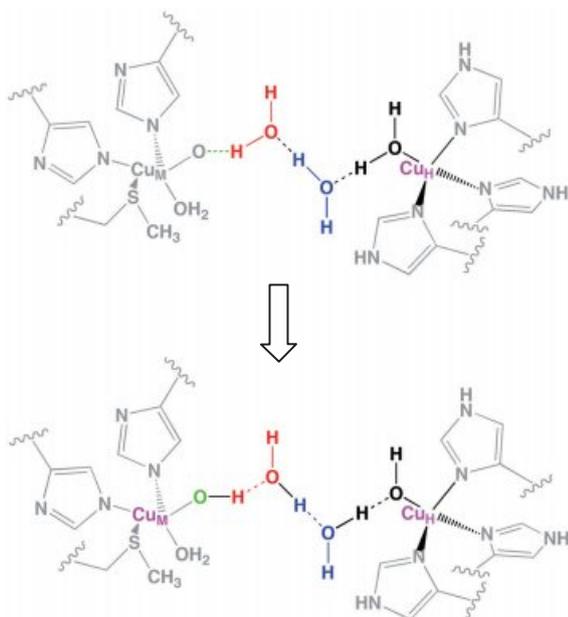


Figura 8. Utilizando un modelo teórico, científicos españoles arrojan luz acerca del mecanismo de transferencia acoplada protón-electrón entre dos centros de Cu situados en el centro activo del enzima peptidilglicina- α -hidroxilante monooxigenasa.

dinámica del intercambio de hidrógeno, calculando que dicho proceso tiene lugar en un intervalo de 0,2 ps. Las moléculas de agua que interconectan los centros metálicos actúan en su conjunto como un ligando conductor en el que tiene lugar la PCET. El electrón y el protón se transfieren involucrando diferentes conjuntos de orbitales moleculares, por lo que no se trata de una transferencia de átomos de H.

Este trabajo supone el punto de partida para entender el proceso de transferencia electrónica de largo alcance facilitada por agua, que puede ser ubicuo en la naturaleza.

¿Carborino enlazante o birradicálico?

Fortuitamente, mientras trataban de buscar el disolvente más apropiado para la reacción de inserción del *o*-carborino ($B_{10}C_2H_{10}$) en enlaces C-C de anillos aromáticos alcoxisustituídos para formar ciclooctatetraenocarboranos (*J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 9988-9989), investigadores de la Universidad China de Hong Kong descubren que, al enfrentarse a éteres alifáticos, este mismo clúster de boro se inserta en enlaces α -C-H (*J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 5760-5763), generando éteres α -carboranilados con una excelente regioselectividad (Figura 9).

A partir de un estudio detallado de distintas condiciones de reacción, los autores sugieren que el mecanismo de formación de los éteres carboranilados se inicia con la eliminación de LiI estimulada por la irradiación con luz UV. A continuación, el intermedio carborínico formado generaría los radicales **I** y **II**, a partir de una abstracción de hidrógeno (Figura 9). Por último, la transferencia electrónica entre **I** y **II**, seguida de la adición nucleófila entre **III** y **IV**, generaría el producto final.

Del análisis de los resultados obtenidos en los anteriores estudios, los autores concluyen que en función del sustrato al

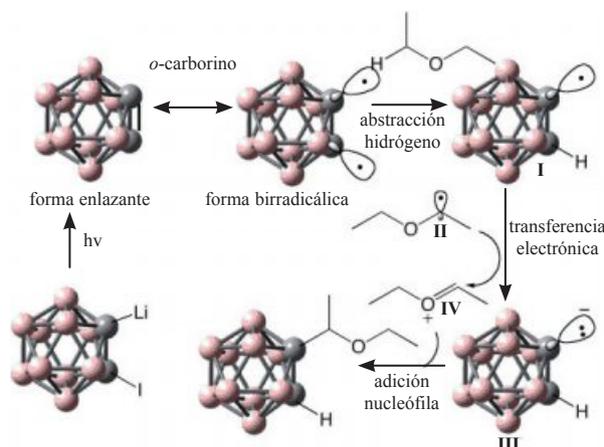


Figura 9. Frente a éteres alifáticos, el *o*-carborino experimenta reacciones de inserción en enlaces α -C-H.

que se enfrenten, los carborinos pueden adoptar dos formas resonantes (Figura 9); frente a compuestos aromáticos, estos clústers experimentan reacciones de cicloadición [4+2] o [2+2] a partir de su forma enlazante, mientras que la reacción de inserción C-H, cuando se enfrentan a éteres alifáticos, transcurre a partir del carborino en su forma birradicálica.

Dos electrodos, un solo metal

Utilizando un novedoso método que permite *atrapar* dopantes orgánicos en matrices metálicas para modificar así las propiedades del metal, científicos israelíes de la Universidad Hebrea de Jerusalén han diseñado un nuevo concepto de celda electroquímica en la que los dos electrodos están hechos de un mismo metal, plata, en contraposición a las celdas clásicas construidas a partir de dos metales distintos (*Chem. Mater.* **2011**, *23*, 3289-3295).

Para la síntesis de la plata dopada, los autores reducen iones metálicos Ag^+ con hipofosfito de sodio, en presencia del dopante congo rojo, (CR), lo que produce su precipitación y posterior agregación en matrices metálicas que incorporan el diazo derivado. Las nuevas propiedades de este electrodo permiten, tras introducirse en un electrolito junto a un segundo electrodo puro y conectar un circuito externo, generar corriente suficiente para encender un dispositivo diodo emisor de luz (Figura 10). Curiosamente, la

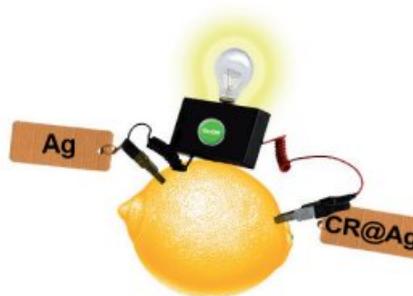


Figura 10. Investigadores israelíes construyen una novedosa celda electroquímica con los dos electrodos fabricados a partir del mismo metal.

diferencia de potencial generada es debida a las diferentes velocidades de reacción que tienen lugar en los distintos electrodos y no a una diferencia de energías libres, como es el caso de las celdas galvánicas.

Además de haber conseguido alterar las propiedades de un electrodo metálico, modificando su potencial de reducción, los autores aseguran que esta nueva tecnología puede ser útil a la hora de aumentar la resistencia a la corrosión metálica.

Luz UV para reparar polímeros

La mayoría de los procedimientos para la autoreparación de grietas en polímeros amorfos, basados en el calentamiento del material por encima de su temperatura de transición vítrea, suelen ser poco eficientes y lentos debido a la escasa velocidad de los procesos de difusión y entrelazado de las cadenas de polímeros. Con el fin de mejorar la eficacia de estos procesos, un equipo de investigadores suizos y estadounidenses afiliados a las Universidades de Friburgo y Case Western Reserve y el Laboratorio de Investigación del Ejército Aberdeen Proving Ground en Estados Unidos, han diseñado un nuevo polímero caracterizado por cadenas a base de poli(etileno-*co*-butileno) y ligandos terminales 2,6-bis(19-metilbenzimidazolil)piridina, unidas no covalentemente por átomos metálicos de Zn^{2+} o La^{3+} (*Nature* **2011**, 472, 334-337).

La capacidad de este polímero para autorepararse se basa en la conversión de la luz UV en calor (Figura 11). Este proceso facilita la disminución de la masa molecular del polímero, mediante la disociación temporal de los complejos metal-ligando del núcleo hidrófobo, y favorece el licuado del material, facilitando así su reparación.

Los autores descartan que la autoreparación del material se produzca mediante calentamiento infrarrojo, tras irradiar el polímero con longitudes de onda fuera del rango de absorción del complejo metal-ligando y no observar la reparación del mismo.

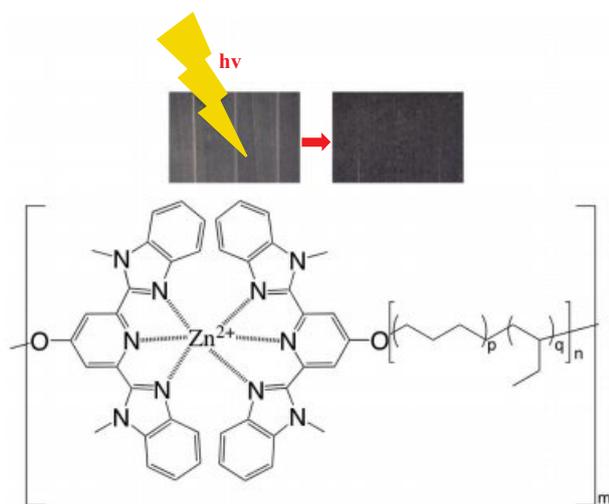


Figura 11. Un nuevo polímero formado por la unión no covalente a través de átomos metálicos de cadenas de poli(etileno-*co*-butileno) y ligandos terminales 2,6-bis(19-metilbenzimidazolil)piridina es capaz de autorepararse al ser expuesto a luz UV.

Filmando la actividad catalítica de la fluoroacetato deshalogenasa

Científicos de las Universidades de Toronto y Health Network en Canadá arrojan luz sobre el mecanismo de defluoración de la fluoroacetato deshalogenasa a través de la obtención de imágenes de alta resolución del enzima libre, su complejo Michaelis con el fluoroacetato, un intermedio covalente tipo éster, y el complejo enzima-producto, que harían las veces de fotogramas en una película acerca de la actividad biocatalítica del enzima (*J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 7461-7468).

El proceso de defluoración tiene lugar a partir de una reacción S_N2 entre un nucleófilo de aspartato que desplaza el halógeno de la molécula de fluoroacetato (Figura 12). Previo al ataque del nucleófilo, el átomo de flúor del sustrato enlaza a restos de histidina, triptófano y tirosina en el complejo enzima-sustrato, encargados por un lado de activar el enlace C-F y por otro de estabilizar el átomo de flúor una vez disociado. Por último, se produciría la hidrólisis del complejo covalente glicolil-enzima, facilitada por restos de histidina y aspartato que abstraerían el protón de la molécula catalítica de agua.

A partir del análisis de la estructura de los complejos Michaelis entre el enzima y sustratos análogos de cloro y bromo, los autores atribuyen la preferencia de la deshalogenasa por el flúor-derivado, con el enlace C-halógeno más fuerte, a la mayor energía de activación requerida para vencer el impedimento estérico que supone acomodar los haluros de mayor tamaño en el sitio activo del enzima.

Desentrañar las bases moleculares de la defluoración resulta fundamental para el diseño de nuevos enzimas que permitan degradar compuestos fluorados más complejos, que suponen una amenaza para el medio ambiente.



Figura 12. A partir de estructuras de alta resolución de los principales intermedios de reacción, investigadores canadienses aportan nuevos datos sobre el mecanismo de acción enzimática de la fluoroacetato deshalogenasa.