

Acto de clausura del Año Internacional de la Química 2011

El pasado 15 de noviembre quedaba clausurado en España el Año Internacional de la Química 2011, un año en el que se están celebrando centenares de actividades en todos los puntos de la geografía española con el objetivo de dar a conocer la indispensable contribución de esta ciencia a la mejora de la calidad de vida y el bienestar de la Humanidad.

Organizada por el Foro Química y Sociedad y Expoquimia, la Clausura Oficial se ha celebrado en el Centro de Conferencias del Recinto Gran Vía de Fira de Barcelona y ha contado con las intervenciones iniciales de Carlos Negro, Presidente del Foro Química y Sociedad; Rafael Foguet, Presidente de Expoquimia; Lorenzo Baselga, Secretario Técnico del Consejo General de Colegios de Químicos de España; Antonio Deusa, Secretario General de FITAG-UGT; Joaquim González Muntadas, Secretario General de FITEQA-CCOO; y Luis Serrano, Presidente de FEIQUE. En el cierre de la jornada, Nicole J. Moureau, Presidenta de la IUPAC y Felipe Pétriz, Secretario de Estado de Investigación, han destacado algunos aspectos de este año lleno de química.

El acto ha acogido también la Ceremonia de Entrega de los premios anuales de Química que conceden las entidades miembro del Foro Química y Sociedad: **Premio ANQUE** (Asociación Nacional de Químicos de España) al Reconocimiento Corporativo y Profesional a **Claudi Mans**, Catedrático Emérito de Ingeniería Química de la Universidad de Barcelona y divulgador de la química; **Medalla de Oro de la RSEQ** y **Premio FEIQUE de Investigación** a **María Vallet**, Catedrática de Química Inorgánica en la Facultad de Farmacia de la UCM, quien ha contribuido de manera singular a avances en biomateriales de utilidad en traumatología, odontología e ingeniería de tejidos; **Premio a la Excelencia Química del Consejo General de Colegios de Químicos de España** a **Juan Sancho Rof**, Vicepresidente del Consejo de Técnicas Reunidas Internacional y; **Premios Expoquimia I+D+i**, en la categoría de Química, a **José I. Borrell** y **Jordi Teixidó** del Grupo de Ingeniería Molecular del IQS por el proyecto “*Diseño, síntesis y evaluación de la actividad antiviral de nuevos inhibidores de entrada del VIH*”; y en la categoría de Biotecnología a la empresa BioGlane, *spin-off* del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) creada en 2007 que ha desarrollado la patente de un proceso biotecnológico para la creación de la D-fagomina, molécula que inhibe el consumo de glucosa y que, por tanto, retrasa la aparición del apetito.

El acto de clausura ha sido asimismo marco de presentación del I Informe de Responsabilidad Social del sector químico español por parte del Presidente de la Federación Empresarial de la Industria Química Española (FEIQUE), Luis Serrano. El Informe recoge de manera pormenorizada la evolución y avances del sector en materia de Responsabilidad Social a través de 56 indicadores basados en la Guía de Aplicación de Responsabilidad Social en el Sector Químico y Ciencias de la Vida.

El año 2011 fue declarado por la Asamblea General de la ONU como Año Internacional de la Química a propuesta de la IUPAC con el objetivo de aumentar la apreciación y la comprensión de la química para satisfacer las necesidades del mundo. “*Nuestra ciencia se desconoce o se malinterpreta*” ha manifestado la presidenta de IUPAC Nicole Moreau. “*Con los eventos organizados este año, se ha conseguido que la palabra “química” se asocie a progreso de la civilización, a soluciones frente a desafíos globales como son la producción de alimentos, la obtención de energía, la salud mundial o el cambio climático*”.



De izquierda a derecha: Carlos Negro, Presidente del Foro Química y Sociedad; Felipe Pétriz, Secretario de Estado de Investigación; Rafael Foguet, Presidente de Expoquimia; y Nicole J. Moureau, Presidenta de la IUPAC, en el acto de clausura del Año Internacional de la Química.



La Prof. María Vallet recibe la Medalla de Oro de la RSEQ y Premio FEIQUE de Investigación 2011 de manos del Prof. Jaume Casabó, Presidente del Grupo Especializado de Química Inorgánica de la RSEQ.

Fuente original: **Departamento de Comunicación
Foro Química y Sociedad**

María Vallet Regí nombrada Académica de Número de la Real Academia de Farmacia

El pasado 27 de octubre, en sesión presidida por la Excm. Sra. Presidenta de la Real Academia Nacional de Farmacia, Doña María Teresa Miras Portugal, y en la sede de esta prestigiosa Institución, tomó posesión como Académica de Número en la Medalla N° 42 de dicha Academia, la Profesora María Vallet Regí.

El discurso leído por la Profesora Vallet para su ingreso en la Academia, llevaba por título “*Fármacos, Nanomedicina y Biomateriales: Un objetivo común*”. A lo largo del mismo, la Prof. Vallet supo mantener el interés de la audiencia al presentar estos tres agentes como el necesario lugar de encuentro en los esfuerzos de los científicos para remediar el dolor, la enfermedad y en definitiva el inevitable deterioro de nuestros cuerpos. Tres conceptos, que por otra parte definen un área fuertemente interdisciplinar y apasionante, que afronta como un nuevo reto el identificar fármacos que puedan interaccionar con las dianas terapéuticas, pero igualmente diseñar sistemas de liberación inteligente de fármacos que permitan suministrar dosis exactas, en el lugar preciso y en el momento adecuado. Es en este particular aspecto donde el diseño y análisis de los biomateriales adquiere especial relevancia. Apunta que en esta estrategia que representa una gran esperanza en la lucha contra muchas enfermedades y en particular contra el cáncer, el gran objetivo no es sólo diseñar y sintetizar fármacos eficaces, sino también portadores de esos fármacos que sean biocompatibles e *inteligentes*, en el sentido de que han de permitir transportar elevadas cargas de fármaco hasta las células tumorales, evitando una liberación prematura del mismo antes de alcanzar la diana; pero que una vez alcanzada ésta, sean además capaces de liberar el fármaco de forma controlada, es decir, a una velocidad adecuada para alcanzar una concentración local efectiva en la región tumoral. Después de desgranar diversos ejemplos que ilustraron los logros ya alcanzados y dejaron ver los muchos retos que quedan por explorar y alcanzar, finalizó



Toma de posesión de la Prof. Vallet como Académica de Número de la Real Academia de Farmacia.

su discurso con una cita de Marie Curie, figura central de este Año Internacional de la Química.

Da respuesta en nombre de la Corporación el Académico Secretario: D. Antonio Luis Doadrio Villarejo, que ensalza la espectacular trayectoria científica de la nueva Académica, con interesantes pinceladas a su vida como mujer que debe compatibilizar el duro y exigente trabajo de investigación con la tarea de madre. Su gran talla científica y personal la llevará a acumular galardones y reconocimientos tanto a nivel nacional como a nivel internacional. Su capacidad de trabajo y su enorme dedicación le permitieron a la vez estar a la vanguardia de la investigación en biomateriales y cuidar eficazmente de su prole en cuya segunda generación ya se cuentan cinco nietos. Finaliza su *laudatio* enfatizando lo acertado de la elección y felicitando a la nueva Académica.

Desde la revista *Anales de Química* nos unimos a esta felicitación a la que fue Vicepresidenta de la Real Sociedad Española de Química.

Remitido por: **Manuel Yáñez**
Editor General *Anales de Química*

Acto de entrega de los Premios CIDETEC 2010

En la Asamblea General del Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ celebrada en Murcia se ha hecho entrega del Premio CIDETEC 2010 en la modalidad de Investigación Científica en Electroquímica, al Prof. Dr. Enrique Herrero Rodríguez del Departamento de Química Física de la Universidad de Alicante, y el Premio CIDETEC 2010 en la modalidad de Trayectoria Científica en Electroquímica, al Prof. Dr. Claudio Gutiérrez de la Fe del Instituto de Química Física “Rocasolano” (CSIC) de Madrid.



De izquierda a derecha: el Dr. Francisco Javier Rodríguez (Director General de CIDETEC), el Dr. Carlos M. Sánchez (en representación del Dr. Enrique Herrero), el Dr. Claudio Gutiérrez, el Presidente del Grupo del Electroquímica de la RSEQ, Profesor Manuel Blázquez y, la Presidenta de la XXXII Reunión del Grupo de Electroquímica y XIII Encuentro Ibérico (6-9 Septiembre, Murcia) Dra. Ángela Molina.

Enrique Herrero, Premio CIDETEC 2010 de Investigación Científica en Electroquímica



Enrique Herrero

Enrique Herrero Rodríguez, se licenció en Ciencias Químicas con premio extraordinario por la Universidad de Alicante en 1990, empezando a continuación sus estudios de doctorado bajo la dirección del Profesor Juan Feliu. El tema principal de la tesis fue la oxidación de CO, ácido fórmico y metanol sobre electrodos monocristalinos. Durante este periodo, realizó estancias en la Universidad de Illinois en Urbana Champaign (EE UU) bajo la dirección del Profesor A. Wieckowski, en la ENP de Grenoble con el Dr. R. Durand y en la Universidad de Munich con la Dra. T. Iwasita. Defendió su Tesis Doctoral en 1995 y obtuvo el premio extraordinario de doctorado. Tras este periodo, realizó una estancia posdoctoral de 2 años en la Universidad de Cornell, bajo la dirección del Prof. H. Abruña, estudiando la caracterización superficial de monocapas adsorbidas sobre monocristales de platino, empleando tanto técnicas electroquímicas como radiación sincrotrón. A finales de 1997 se incorpora como ayudante doctor a la Universidad de Alicante, donde continúa en la actualidad como catedrático de universidad. Durante todos estos años, sus trabajos de investigación se han encaminado a entender la relación entre la estructura superficial y la electrocatálisis, tanto en superficies modelo como en nanopartículas. Las superficies modelo, superficies monocristalinas, se emplean para poder entender mejor

la compleja relación entre estructura y composición superficial de las nanopartículas y su reactividad. El objetivo final es poder predecir la reactividad de las nanopartículas conociendo su composición y estructura superficial. Las reacciones que ha estudiado principalmente son aquellas implicadas en las pilas de combustible: la reducción de oxígeno y la oxidación de CO, ácido fórmico, metanol y etanol. Durante este periodo ha colaborado con investigadores de reconocido prestigio del área, como J. Lipkowski (Canadá), G. Jerkiewicz (Canadá), G.A. Attard (RU), D. Schiffrin, (RU), MTM. Koper (Holanda), E.R. González (España), G. Tremiliosi-Filho, (Brasil), o J. Mostany (Venezuela). Ha participado en 3 proyectos financiados por la Unión Europea dentro de los distintos programas marco. También ha dirigido 4 tesis doctorales y 4 trabajos de DEA. Es coautor de más de 120 artículos científicos en las mejores revistas del área de Química (*J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem.*, *Chem. Rev.*, *J. Phys. Chem.*, *Faraday Discussions*, *PCCP*, *Electrochem. Commun.*, *J. Electroanal. Chem.*, *Electrochem. Acta*,...), sus trabajos han recibido más de 3300 citas y tiene un índice *h* de 33. También es coautor de 12 capítulos de libros, entre ellos 2 capítulos en publicaciones docentes de Química Física.

Es miembro de la RSEQ y de la *International Society of Electrochemistry* (ISE). En esta última sociedad, fue *vicechairman* de la división 7, *Physical Electrochemistry*, en el bienio 2007–2008. Además ha participado en el comité organizador y comité científico de varios congresos internacionales.

Claudio Gutiérrez, Premio CIDETEC 2010 de Trayectoria Científica en Electroquímica



Claudio Gutiérrez

Claudio Gutiérrez de la Fe nació el 3 de julio de 1942 en Las Palmas de Gran Canaria. Se licenció en Ciencias Químicas en la Universidad de La Laguna en 1964. En 1965 se incorporó al Instituto de Química Física “Rocasolano”, del CSIC, en Madrid, en el que continúa. Obtuvo el Doctorado en la Universidad Complutense de Madrid en 1968. Es Profesor de Investigación del CSIC desde 1993.

Sus directores de Tesis fueron el Profesor Juan Antonio Llopis Marí, de Superficies y Electroquímica, y el Profesor José Miguel Gamboa Loyarte, de Radioquímica. Inicialmente (tesis, estancia postdoctoral de dos años en la *Royal School of Mines*, Imperial College, Londres, y primeros años de reincorporación) trabajó en Flotación de minerales, una nueva línea de investigación que se pretendía crear en el Instituto “Rocasolano”, quizás por la enorme importancia industrial de esta técnica. Sin embargo, consideró que esta línea no era apropiada para un Instituto de Química Física, y se dedicó a crear una nueva línea de aplicación de métodos espectroscópicos a la Electroquímica, una disciplina en la que dicho Instituto disfrutaba de un merecido prestigio. Para ello realizó varias estancias en la Universidad de Southampton, con los Profesores Alan Bewick y Laurence Peter. Allí se familiarizó con las técnicas de Electrorreflectancia de Electrolito, que aplicó en Madrid a estudios de corrosión de metales féreos. Asimismo, en varias estancias en los laboratorios del Prof. Bernard Beden, de la Universidad de Poitiers, se familiarizó con la técnica de

Espectroscopía Infrarroja *in situ*, que también instaló en Madrid. En 1988 organizó, en colaboración con el Dr. C. Melendres, del Argonne National Laboratory (EE UU), un NATO *Advanced Study Institute* sobre “*Spectroscopic and Diffraction Techniques in Interfacial Electrochemistry*” en el Puerto de la Cruz, Tenerife. Este curso de verano ayudó a difundir en España la aplicación de técnicas espectroscópicas a la Electroquímica.

A finales de los años 80, el descubrimiento accidental de una nueva transición en la región ultravioleta del monóxido de carbono quimisorbido sobre metales nobles, y el redescubrimiento de la drástica influencia del potencial de admisión del CO sobre su comportamiento con Pt, hicieron que desde entonces se dedique al estudio básico de la adsorción y electrooxidación de CO y moléculas orgánicas C1 y C2. Este campo es muy activo, dado su interés para el desarrollo de pilas de combustible comerciales.

Es de destacar que la publicación en 1996 del primer estudio de la adsorción del monóxido de carbono sobre hierro en medio electrolítico despertó el interés de la empresa Halliburton, de Estados Unidos, interés que condujo a un contrato que dirige Ángel Cuesta.

En sus laboratorios han realizado estancias, dentro de diversas colaboraciones, numerosos investigadores de grupos nacionales e internacionales. Ha participado activamente en congresos nacionales e internacionales. Y ha sido el representante español en la *International Society of Electrochemistry*, 1993–1998, en la Comisión I.3, Electroquímica, de la IUPAC, 1987–1999, y en la División de Química Física y Biofísica de la IUPAC, 2002–2003.

Remitido por: **Manuel Blázquez**
Presidente del Grupo Especializado de Electroquímica

Acto de entrega del XIX Premio San Alberto Magno 2010/2011 concedido por la Sección Territorial de Alicante

El martes 15 de noviembre de 2011 tuvo lugar el acto de entrega del XIX Premio San Alberto a la mejor Tesis Doctoral 2010–2011 concedido por la Sección Territorial de Alicante de la RSEQ y patrocinado por la compañía Cemex España, S.A.

La jornada fue presidida por el Sr. Vicerrector de Investigación, Desarrollo e Innovación de la Universidad de Alicante, D. Manuel Palomar Sanz; el Presidente de la Sección Territorial de RSEQ, D. Miguel Yus Astiz; la Tesorera de la Sección Territorial de Alicante de la RSEQ, Dña. Cecilia Gómez Lucas; el Sr. Vicedecano de Química de la Universidad de Alicante, D. David Guijarro Espí y la Gerente de Calidad de la Compañía Cemex España, Dña. María Luisa Torres Martínez.

El acto comenzó con la apertura por parte del Sr. Vicerrector de Investigación, Desarrollo e Innovación, seguido de la lectura del acta a cargo de la Sra. Tesorera de la Sección Territorial de Alicante de la RSEQ y la entrega de los Premios. El premio a la mejor Tesis Doctoral fue concedido a Silvia Tarí Segarra, por su trabajo “*Reacciones enantioselectivas organocatalizadas por sales de amonio de Cinchona recuperables*”. Hizo entrega del premio, dotado con 4.000 €, D. Miguel Yus Astiz, Presidente de la Sección Territorial de Alicante de la RSEQ. A continuación



La galardonada con el Premio San Alberto Magno 2010/2011, Silvia Tarí Segarra, junto a los representantes de la RSEQ, la Universidad de Alicante y la Compañía Cemex España.

tuvo lugar la entrega de diploma de patrocinio a la Gerente de Calidad de la Compañía Cemex España, Dña. María Luisa Torres Martínez, por parte del Sr. Vicerrector y la sesión se cerró con una breve intervención de los miembros de la mesa presidencial.

Remitido por: **Miguel Yus Astiz**
Presidente de la Sección Territorial de Alicante

XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography (Madrid, 22–30/08/2011)

El XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography (IUCr) (<http://www.iucr2011madrid.es/>), se celebró en Madrid durante la última semana de agosto de 2011. Esta reunión mundial, el evento cristalográfico más importante celebrado en España desde la IUCr en 1947, tuvo un final feliz, social y científicamente hablando. Adicionalmente, al término de esta reunión se cedió la “antorcha cristalográfica” a los investigadores canadienses para la celebración de IUCr2014 en Montreal. El congreso ha representado una parte fundamental del Año Internacional de la Química, al mismo tiempo que ha dado luz verde para una novedad cristalográfica mundial: el Año Internacional de la Cristalografía, a celebrar por primera vez en 2013 (IYCr2013, *International Year of Crystallography*, <http://www.iucr.org/iycr>).

La ceremonia de apertura de IUCr2011, incluyendo el acto de entrega de la medalla Ewald (el mayor galardón mundial en Cristalografía), la cena del congreso acompañada por un fantástico grupo de intérpretes de música Dixie-Land *in vivo*, y la ceremonia de clausura, incluyendo el cambio del Presidente de la IUCr (Gautam Desiraju que reemplazó a Sine Larsen), fueron eventos repletos de científicos, y para ambos actos hubo necesidad de usar la sala de mayor capacidad del Palacio Municipal de Congresos.

El congreso agrupó a cerca de 2.800 personas (1.880 participantes estándar, 360 alumnos, 350 becarios, 65 expositores y 113 acompañantes). Hasta 73 países estuvieron representados con 2.040 resúmenes científicos que se distribuyeron

finalmente en 98 micro-simposios con 490 comunicaciones orales y 1.550 presentaciones en carteles, de los cuales 20 fueron premiados con el patrocinio de nueve instituciones o empresas comerciales internacionales.

Además, 36 conferencias magistrales recorrieron el estado del arte de la cristalografía en la mayor parte de sus líneas más importantes y actuales, desde los complejos macromoleculares de gran tamaño, como el ribosoma, proteínas de membrana, múltiples aspectos de química supramolecular, estructura y patogenia bacteriana, base estructural de los procesos regulatorios de la célula, genómica estructural, hasta aspectos ornamentales del arte en La Alhambra (desde grupos planos hasta cuasi-redes). Pero otros muchos aspectos de interés estuvieron también presentes, tales como la validación de datos cristalográficos y su relación con posibles errores en la interpretación de la estructura de las proteínas, el uso de XAFS como una nueva herramienta para la estudios de estructura-función en proteínas, cristalografía ultra-rápida utilizando rayos X producidos por láseres de electrones libres, nuevos y prometedores métodos de resolución (incluyendo la tomografía de difracción de electrones y técnicas de imagen en espacio real), materiales policristalinos y difracción en la nano-escala, cristalografía de neutrones en materiales magnéticos, estructuras incommensurables, materia blanda, materiales sólido-gas, materiales de interés para problemas energéticos, ingeniería cristalina, últimos avances sobre crecimiento cristalino, nuevos aspectos sobre caracterización de topologías cristalinas, cristales molecu-



Venki Ramakrishnan (quinto por la izquierda, laureado Nobel 2009) rodeado de jóvenes cristalógrafos y acompañados del Presidente, Enrique Gutiérrez Puebla, y Vicepresidente, Martín Martínez Ripoll, de la IUCr2011.

lares y minerales a alta presión. En resumen, el congreso mostró la investigación cristalográfica en muchos campos frontera, desde la Mineralogía hasta la Química, Física, Ciencia de Materiales, Nanotecnología, Bioquímica, Biología y Biomedicina. Paralelamente, el congreso incluyó, además, otros eventos, tales como seis Reuniones Satélite, tres Talleres Especializados y siete Reuniones Paralelas.

Mención especial merecen las cuatro Conferencias Plenarias del congreso y la entrega del Premio Ewald. Tres de las conferencias plenarias, basadas en los aspectos estructurales y funcionales del ribosoma fueron presentadas por los Laureados Nobel de Química de 2009, Thomas A. Steitz, Venki Ramakrishnan y Ada Yonath. La cuarta Conferencia Plenaria estuvo a cargo de Omar M. Yaghi, sobre las redes metalo-orgánicas. El Premio Ewald se otorga una vez cada tres años durante los congresos mundiales trienales de Cristalografía y supone el mayor reconocimiento de la IUCr para contribuciones extraordinarias en la ciencia cristalográfica. La novena edición de este premio ha sido otorgada, durante la ceremonia de apertura de IUCr2011, a la Prof. Eleanor Dodson (Departamento de Química de la Universidad de York, Reino Unido), al Prof. Carmelo Giacovazzo (Instituto de Cristalografía, CNR, Bari, Italia) y al Prof. George M. Sheldrick (Lehrstuhl für Strukturchemie, Göttingen, Alemania). La distinción ha sido otorgada en base al enorme impacto que han tenido sus trabajos para el desarrollo de nuevas metodologías de resolución estructural y que se han traducido en programas de cálculo tan conocidos como CCP4, SIR y SHELX, respectivamente. Los cristalógrafos que trabajan en España, y más concretamente los que formaron parte del Comité Local Organizador, junto con el Comité Internacional del Programa, hicieron un magnífico trabajo (fruto de un esfuerzo específico desde la celebración de IUCr2008 en Osaka) y ofrecieron una excelente organización para este único y memorable evento que, aunque desgraciadamente no tuvo el eco esperado entre las autoridades académicas y políticas, hizo de Madrid 2011 (casi tras un siglo desde los famosos experimentos de von Laue y Bragg) un acontecimiento memorable

desde el punto de vista científico, y único para España en los 64 años de existencia de la IUCr.

Vaya desde aquí nuestro agradecimiento a la Unión Internacional de Cristalografía, por su ayuda y especialmente por el reconocimiento que supuso hacia la investigación de los cristalógrafos que trabajan en España, al Ministerio de Ciencia e Innovación y al CSIC por su ayuda económica, así como al soporte ofrecido por las Universidades madrileñas de Alcalá, Autónoma y Complutense, Universidades Internacional Menéndez Pelayo, Cantabria, Barcelona, Málaga, País Vasco/EHU y Oviedo. Metro de Madrid y la Agencia Española de Cooperación Internacional y Desarrollo ayudaron para poder ofrecer apoyo a jóvenes investigadores

procedentes de países menos desarrollados. La RSEQ, a través del Grupo Especializado de Cristalografía y Crecimiento Cristalino (GE3C), y el consorcio del sincrotrón español (ALBA), entre otros patrocinadores (<http://bit.ly/pe5sV6>) ayudaron a disminuir las necesidades económicas de este evento, pero un agradecimiento especial va dirigido a la Fundación BBVA, a sus directivos y a todos sus colaboradores, por haber ofrecido todo su apoyo y su extraordinario patrocinio. Tampoco queremos olvidar el afecto que demostró la RSEQ, delegando en su Vicepresidenta, la Dra. Pilar Goya, su participación durante la ceremonia oficial de apertura.

Finalmente, el Comité Local Organizador envía también un agradecimiento afectuoso a toda la pléyade de jóvenes cristalógrafos, procedentes de toda nuestra geografía, quienes silenciosamente se amoldaron a los cientos de necesidades que, esperada e inesperadamente, surgieron durante toda una semana de congreso y durante varios días previos a la inauguración.

Remitido por: **Martín Martínez Ripoll**
Vicepresidente del Comité Local del IUCr2011



¡Lo superamos! Jóvenes cristalógrafos y algunos miembros del Comité Organizador de la IUCr2011.

VIII Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ Sigma-Aldrich (Torremolinos, 24–28/10/2011)

Desde el año 2004 se viene celebrando un Simposio de Jóvenes Investigadores de Química dirigido a difundir y relacionar la investigación realizada por estas nuevas generaciones de científicos. Las ediciones anteriores de este Simposio, patrocinado desde sus inicios por la RSEQ y Sigma-Aldrich, tuvieron lugar en Madrid (2004), Ciudad Real (2005), Barcelona (2006), Burgos (2007), Santiago de Compostela (2008), Granada (2009) y Valencia (2010) hasta llegar a la presente edición en Torremolinos (Málaga) en 2011.

El VIII Simposio de Investigadores Jóvenes se celebró en el Albergue Inturjoven de la Música de Torremolinos, la semana del 24 al 28 de octubre de 2011. Se reunieron casi 80 participantes procedentes de todas las universidades españolas, del CSIC y algunos ya en etapa post-doctoral en centros extranjeros. Se impartieron 43 conferencias de 20 minutos y presentaron 16 carteles. Además, en el Simposio se impartieron 8 conferencias invitadas a cargo de los cuatro jóvenes premiados por la RSEQ-Sigma Aldrich (45 min.) y los premiados Predoc y Postdoc SUSCHEM (20 min.). El comité científico estuvo constituido por el Prof. Nazario Martín (Univ. Complutense de Madrid, Presidente de la RSEQ), Prof. Jesús Jiménez-Barbero (CIB CSIC Madrid, Secretario General de la RSEQ), Prof. Juan T. López Navarrete (Universidad de Málaga, Presidente, RSEQ-Málaga), Prof. Juan Casado Cordón (Universidad de Málaga, Presidente Comité Organizador), Prof. Pedro Maireles Torres (Universidad de Málaga), Prof. Miguel Ángel García Aranda (Universidad de Málaga), Prof. Ezequiel Pérez Inestrosa y Villatoro (Universidad de Málaga), Prof. Javier Márquez Gómez (Universidad de Málaga), y Prof. Javier Laserna Vázquez (Universidad de Málaga). Del Comité Organizador formaron parte el Prof. Juan Casado Cordón (Universidad de Málaga, Presidente Comité Organizador), Prof. José Jiménez Jiménez (Universidad de Málaga, Vicepresidente), Dr. María del Carmen Ruiz Delgado (Universidad de Málaga, Secretaria), Rafael González Cano (Universidad de Málaga) y José Zafra Paredes (Universidad de Málaga).

La financiación del Simposio procedió de la RSEQ, Sigma-Aldrich, el Ministerio de Ciencia e Innovación, el Grupo Especializado de Jóvenes Investigadores Químicos (JIQ), la Junta de Andalucía y la Universidad de Málaga.

Hay que destacar el elevadísimo nivel de todas las conferencias y carteles que dieron lugar a amenas e interesantes discusiones científicas. Las contribuciones se agruparon por



Los cuatro jóvenes premiados por la RSEQ-Sigma Aldrich junto con representantes de ambas instituciones.

áreas temáticas: junto a las de orgánica, inorgánica, analítica y química física, la variedad del programa se vio claramente resaltado por la agrupación de conferencias de química médica y biológica, ciencia de materiales, espectroscopía, organometálica, etc. Cabe destacar la masiva asistencia tanto a las conferencias invitadas como a las comunicaciones orales, además de la alta participación de asistentes y elevado número de discusiones en todas las sesiones.

El VIII Simposio de Investigadores Jóvenes se inició la tarde del lunes 24 de octubre con el registro y entrega de documentación. El martes 25 de octubre se procedió a la inauguración del Simposio, presidido por el Prof. Juan T. López Navarrete, Presidente de la Sección Territorial de la RSEQ en Málaga. El miércoles 26 de octubre por la mañana tuvo lugar la conferencia invitada de Aurelio Mateo-Alonso (Premio RSEQ y Sigma-Aldrich) y por la tarde tuvo lugar la entrega de los premios SUSCHEM 2011, modalidad PREDOC y POSTDOC, a María Escudero y Carlos Martí, respectivamente. Para la entrega de Premios acudieron M^a Eugenia Anta, directora de Innovación de FEIQUE y Juan Luis Delgado, Presidente del grupo JIQ de la RSEQ. El jueves 27 de octubre, las sesiones científicas del Simposio tuvieron lugar en el Salón de Grados de la Universidad de Málaga y comenzaron con la entrega de Premios de la RSEQ Sigma-Aldrich presidido por el Prof. Juan T. López Navarrete, Begoña Milián Medina (nueva presidenta del grupo de JIQ-RSEQ) y Javier Márquez (Sigma-Aldrich). A continuación, Manuel Alcarazo impartió la conferencia invitada como premiado RSEQ, seguida por el representante de Sigma-Aldrich que impartió una conferencia descriptiva de las actividades de la empresa. Por la tarde, la sesión la inició David González (Premio RSEQ-Sigma Aldrich). La última sesión del viernes 28 de octubre se abrió con la conferencia invitada de Eva Hevia (premio RSEQ-Sigma Aldrich).

Como es habitual, el Simposio de Jóvenes acogió la reunión de la Junta del Grupo de Jóvenes (JIQ) de la RSEQ donde se procedió a la renovación parcial de la Junta Directiva.

Para obtener más información en relación al simposio, puede consultar la siguiente página web:

<http://www.ciencias.uma.es/8sj/>

Remitido por: **El Comité Organizador**
Juan Casado, M^a Carmen Ruiz Delgado
y Juan T. López Navarrete



Participantes en el VIII Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ Sigma-Aldrich.

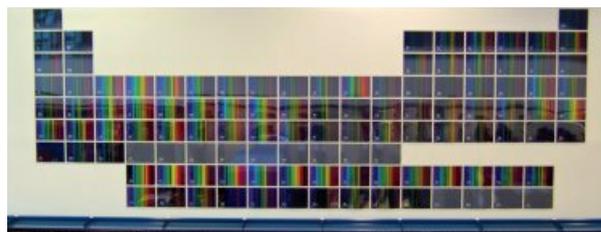
Inauguración de un mural de Homenaje a los Elementos

Dentro del Año Internacional de la Química tuvo lugar el 27 de octubre en la Universidad de Barcelona la presentación del Homenaje a los Elementos, de la artista Eugènia Balcells, obra que quedó instalada con carácter permanente en el lucernario de la biblioteca de Física y Química de la Universidad de Barcelona, sobrevolando la magnífica colección del *Chemical Abstracts* que abarca toda la química del siglo XX, y por debajo de los ventanales que transparentan la vida exterior de la zona universitaria. La edición de esta obra en sus formatos de póster y mural, ha corrido a cargo de la Universidad de Barcelona (UB) y Edicions de l'Eixample, y ha contado con el patrocinio de las empresas Solvay y BASF, y con la colaboración de las Sociedades Catalanas de Física y de Química.

Eugènia Balcells ha desarrollado una amplia carrera en los campos del arte conceptual, el cine experimental y las instalaciones multimedia, que ha sido reconocida en 2010 con el Premi Nacional d'Arts Visuals de la Generalitat de Catalunya, y con la Medalla al Mérito en Bellas Artes entregada por S. M. Juan Carlos I a propuesta del Ministerio de Cultura.

El Homenaje a los Elementos nació como un referente conceptual y visual del proyecto expositivo Frecuencias, que inauguró en 2009 el espacio Laboratori del centro Arts Santa Mònica de Barcelona, dedicado a las interacciones entre arte y ciencia. Frecuencias inició su recorrido en el Museo de Arte Contemporáneo Gas Natural-Fenosa de A Coruña. Homenaje a los Elementos muestra en una tabla periódica las rayas de los espectros de emisión de los elementos, con la excepción de los que van del 100 (fermio) al 112 (copernicio), representados sólo por un rectángulo gris, ya que se desconocen sus espectros por ser "muy breves, un juego de ingenio que dura el tiempo de ganar un nombre y se deshace", tal como los describe David Jou. El conjunto constituye una reflexión sobre la esencia de la materia y sobre el lenguaje luminoso de la energía.

La instalación Frecuencias, que entrecruza en una sola película los espectros de los elementos, tiene la virtud de emocionar a públicos muy diversos, despertando a un tiempo su curiosidad



Obra Homenaje a los Elementos instalada con carácter permanente en el lucernario de la biblioteca de Física y Química de la Universidad de Barcelona.

científica. Como ejemplifica la comisaria del proyecto, Eulàlia Bosch, escolares de ocho o nueve años se hacían ante la proyección de rayas espectrales preguntas como ¿Dónde empieza la luz? ¿Dónde está la luz entre el proyector y la pantalla? ¿Cuándo se hace de colores? ¿Por qué siempre salen rayas? A los químicos, esta tabla periódica espectral nos evoca a nuestros antecesores, desde Bunsen y Kirchhoff hasta Glenn Seaborg. A otros les hará pensar en los artistas que nos han enseñado nuevas formas de ver el color, como Mark Rothko o Anish Kapoor, o a aquellos que teorizaron sobre la luz y el color, como Newton, Ostwald, Goethe, Delacroix o Josef Albers. Y, ¿por qué no? a escritores como Howard Phillips Lovecraft, quien imaginó "una substancia misteriosa que, calentada ante el espectroscopio desplegaba bandas brillantes, diferentes a todos los colores del espectro normal. No era nada de esta tierra, sino una pieza del gran exterior y, como tal, dotada de propiedades exteriores y obedientes a las leyes del exterior".

Más información sobre Frecuencias y Homenaje a los Elementos: <http://araahoranow.blogspot.com>

Sobre Eugènia Balcells y su obra, ver <http://www.eugeniabalcells.com>

Remitido por: **Santiago Álvarez**
Departamento de Química Inorgánica
Universidad de Barcelona

FisQuiWeb obtiene el Primer Premio Internacional Educared

En este Año Internacional de la Química, **FisQuiWeb**, página dedicada a la enseñanza de la Física y la Química, ha obtenido el primer premio en el Concurso Internacional Educared. El galardón fue entregado el día 20 de octubre en Madrid en el seno del VI Encuentro Educared 2011 al cual los premiados acudieron como invitados.

El Premio Internacional **Educared**, dirigido a docentes de todo el mundo, propone la realización y presentación de trabajos TIC relacionados con las temáticas del currículo escolar con el fin de facilitar al profesorado nuevas herramientas, conocimientos y métodos de trabajo para asumir los cambios que las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC) provocan en nuestra sociedad y en las nuevas generaciones de estudiantes, así como en los métodos de enseñanza y aprendizaje.

En **FisQuiWeb** se ponen a disposición de la comunidad educativa (y del público en general) un amplio espectro de recursos *online* especialmente diseñados para la enseñanza secundaria. Posiblemente una de las características diferenciales de esta web sea que la totalidad de los materiales

mostrados son originales y han sido diseñados y elaborados a partir de la práctica docente diaria en el aula.

FisQuiWeb no es sólo una página web de recursos y materiales, detrás está un intento de renovación didáctica de la asignatura basado en el recurso a plantear su enseñanza como un continuo descubrimiento, como un proceso cuyo último propósito es conocer mejor el mundo que nos rodea y descubrir las reglas por las que se rige.

En su fallo el jurado ha destacado: la labor de producción de materiales y recursos didácticos, el ponerlos a disposición del público de forma desinteresada, la organización y claridad con que se presentan los contenidos en la página y el impacto del proyecto en la comunidad educativa reflejado en la cantidad de visitas que recibe habitualmente la web.

Para más información se recomienda visitar la dirección web: <http://web.educastur.princast.es/proyectos/fisquiweb/index.htm>

Remitido por: **Luis Ignacio García**
Dpto. Física y Química
I.E.S La Magdalena, Avilés, Asturias

Premio Nobel de Química 2011: lecciones más allá de la química y la ciencia

Michelangelo Buonarroti solía decir que las esculturas residían en el mármol mucho antes que su cincel empezara a trabajar. De ahí la idea de que esculpir significaba quitar lo superfluo, no agregar. Consideraba así su trabajo artístico como el de un descubridor más bien que considerarlo como el propio de un creador. Aunque a los escépticos nos parezca difícil concebir tal hecho, el proceso al que alude Miguel Ángel ilustra lo que no en pocos casos sucede en el mundo de la ciencia. En particular, los químicos no siempre crean nuevas moléculas, materiales o sistemas. A menudo solo descubren lo que estaba allí escondido durante siglos. En muchas ocasiones solo hace falta quitar lo superfluo, es decir eliminar prejuicios, ideas preconcebidas o paradigmas inmutables. Y ante tal testitura, a menudo los hay, que incrédulos, se niegan a aceptar que escondida a su percepción existía una realidad opuesta a los paradigmas en los que se apoyaron ciegamente. El premio Nobel de Química 2011 nos presenta una de estas historias.

Esta historia empieza la mañana del 8 de abril de 1982, en los laboratorios del *National Bureau of Standards* (hoy conocido como *National Institute of Standards and Technology*) en el estado de Maryland, EE UU. Allí, Daniel Shechtman estaba disfrutando de una estancia de investigación durante su año sabático. En ese momento su investigación se centraba en la estructura de unas nuevas aleaciones de aluminio y manganeso. Al mirar el resultado de la difracción de electrones se encontró con algo que en sus propias palabras “era una criatura que no podía existir”. Durante un buen rato se aseguró de que sus mediciones eran correctas. Entusiasmado por este resultado tan excitante se decidió a compartirlo con quienquiera que encontrara por los pasillos, pero no encontró a nadie. Estaba solo en el laboratorio.¹ E ahí una primera lección: los resultados excepcionales a menudo están reservados para aquellos que los buscan incluso cuando los demás duermen... pero, ¿qué vio Daniel Shechtman? y ¿por qué era eso tan excitante?

El difractograma que vio después de sus medidas de difracción de electrones es el que se presenta en la Figura 1.² Los químicos y cristalógrafos obtienen información acerca de la posición relativa de átomos y moléculas al iluminar un cristal con un haz de electrones, neutrones o Rayos X. Solo si el material iluminado es cristalino, se genera (difractando la luz) una constelación de puntos como la que se observa en la Figura, lo cual nos dará información acerca de la simetría

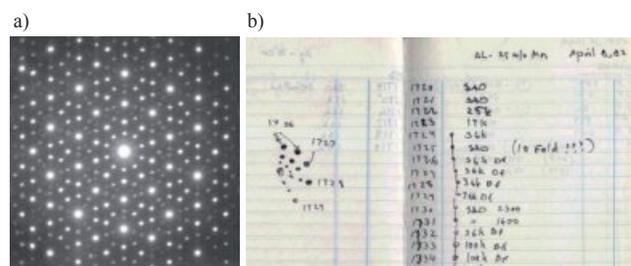


Figura 1. (a) Difractograma de electrones que observó Daniel Shechtman el 8 de abril de 1982. La imagen de la criatura que no podía existir. (b) Cuaderno de laboratorio de Daniel Shechtman, donde pone de manifiesto su sorpresa.

y el ordenamiento en los que los átomos y moléculas se han organizado. Con los datos de difracción, el profesor Shechtman esperaba poder describir cómo se colocaban unos con respecto a otros los átomos de aluminio y manganeso de la aleación que estaba estudiando. ¿Cuál era entonces el problema?

El problema radicaba en lo que por entonces se entendía como cristal. Hasta 1992, la Unión Internacional de Cristalografía definía cristal como “una sustancia en la que los átomos, moléculas o iones que la constituyen están empaquetados ordenados regularmente *repetiendo* un patrón tridimensional”. Dicho de otra manera, los cristales tenían que ser la repetición periódica de una celda elemental. Y esta definición conlleva sus restricciones, lo que implica que los ejes de simetría que se encuentren serán de orden uno, dos, tres, cuatro o seis. Nunca ejes de rotación de orden cinco, ni de orden superior a seis. ¡Y lo que el profesor Shechtman observó aquel día era un patrón con eje de simetría diez! En la Figura 1b se muestra el cuaderno de laboratorio de Daniel Shechtman donde se resalta la sorpresa por la simetría encontrada (*10 Fold???*). Para entender la razón de tal restricción bastará con unos ejemplos en dos dimensiones: intentemos hacer mosaicos con piezas de simetría 2 (por ejemplo, rectángulos), 3 (por ejemplo, triángulos equiláteros), 4 (por ejemplo, cuadrados) ó 6 (por ejemplo, hexágonos equiláteros). Tal como se ve en la Figura 2, podremos encajar todas las piezas como si de un puzzle se tratara, sin que quede ningún espacio libre entre las piezas. En estos casos podemos decir que tenemos una celda elemental que se repite de manera periódica. Ahora intentemos encajar de la misma manera polígonos con simetría 5 ó 7. ¡Es imposible! No encajarán. En este caso polígonos de simetrías 5, 7 o superiores no pueden describir una celda unidad. De la misma manera, ningún poliedro con un eje de simetría 5 ó 10 puede describir un patrón tridimensional que se repita periódicamente. Sin embargo, ¡el difractograma del profesor Shechtman indicaba un eje de simetría 10! El material era cristalino porque tenía un patrón de difracción bien determinado, pero, por otra parte, era incompatible con la definición de cristal en aquellos momentos.

¿Cómo reaccionaron los colegas del profesor Shechtman al escuchar sus hallazgos? Con escepticismo despiadado. La primera respuesta que recibía de sus colegas era que sus datos eran el resultado de medir una macla. Se habla de macla cuando dos cristales crecen en direcciones diferentes a partir de un plano o eje que tienen en común, lo cual puede dar lugar a patrones de difracción tan “exóticos” como el que nos ocupa. Esa también fue la primera explicación que encontró Daniel Shechtman a

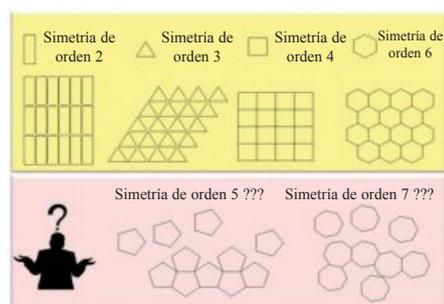


Figura 2. Se pueden construir mosaicos regulares y periódicos solo con piezas de simetría 2, 3, 4, ó 6 pero no con piezas de simetría 5, 7 o mayor.

sus resultados; por eso analizó sus muestras con sumo cuidado en el microscopio electrónico, llegando siempre a la misma conclusión: no se trataba de una macla. Una vez quedaba claro que no se trataba de una macla, el escepticismo se convertía en hostilidad. En una entrevista, el profesor Shechtman explica como un día el jefe del grupo en el que estaba trabajando se presentó en su despacho y le dejó encima de la mesa un libro de texto de cristalografía, y le dijo que leyera ese libro y vería como lo que estaba pregonando era simplemente imposible. La respuesta del Daniel Shechtman fue que sabía perfectamente lo que decía ese libro, de hecho lo enseñaba en sus clases, pero que sus datos eran los que eran, y no estaban equivocados. Esta es una muestra de la presión a la que fue sometido, la cual creció hasta el punto de ser expulsado del grupo de investigación donde estaba trabajando en aquel momento. Daniel Shechtman recuerda que el jefe del grupo había sido su amigo personal, pero que la vergüenza que le causaba que alguien de su grupo defendiera conceptos tan alejados del paradigma vigente no le dejó otra alternativa que despedirlo.³

De vuelta al *Israel Institute of Technology*, durante el verano de 1984, junto con su colega Ilan Blech, envía sus resultados a la revista *Journal of Applied Physics*. El editor de esta revista rechaza directamente el artículo aduciendo que lo que allí se presentaba no era de suficiente interés. Sin darse por vencido, Daniel Shechtman contactó con el físico John Cahn, el cual a su vez consulta con el cristalógrafo francés Denis Gratias. Ambos expertos corroboran la calidad y veracidad de los datos de Shechtman, y finalmente los cuatro científicos publican los controvertidos datos en el número del 12 de noviembre de 1984 de la revista *Physical Review Letters* (Figura 3).² En este artículo corto de tres páginas, en realidad no se provee un modelo de cómo están colocados los átomos, pero presentan los datos que demuestran una fase cristalina sin simetría traslacional. Es decir, estaban cambiando el significado de la palabra cristal. Hasta el momento, este artículo ha sido citado más de 3200 veces. ¡Si lo hubiera sabido el editor de *Journal of Applied Physics*!...



Figura 3. *Physical Review Letters*, 1984, 53, 1951–1953: tres páginas que valieron un premio Nobel.

¿Cómo podemos entender esa nueva manera de ordenar la materia? Al igual que, según Miguel Ángel, el David siempre había estado ahí oculto en una pieza de mármol, la solución al enigma de las simetrías prohibidas había estado ahí durante siglos. Por ejemplo, en los mosaicos de la Alhambra. De hecho, los artistas islámicos medievales llegaron a diseñar mosaicos siguiendo un complejo patrón geométrico dando lugar a teselas traslacionalmente quasi-periódicas: es decir, las frecuencias con que aparecen los distintos tipos de teselas no forman entre sí cocientes de números enteros. Esta ordenación permite simetrías rotacionales prohibidas cristalográficamente (Figura 4a). Y

éstas son, precisamente, las características de la estructura que descubrió el profesor Shechtman. Dicho de otra manera, para que haya orden no es necesario la repetición periódica de un motivo estructural. Que el orden no requiere repetición, es algo que también nos enseñó en el siglo XIII Leonardo Fibonacci. La sucesión de Fibonacci se inicia con 0 y 1, y a partir de ahí cada elemento es la suma de los dos anteriores (0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21...). Cada número de la serie puede ser predicho teniendo en cuenta los anteriores, y además la relación entre números contiguos tiende al número áureo, el cual a su vez determina las relaciones matemáticas que definen los mosaicos quasi-periódicos. Una vez más: orden y relaciones matemáticas sin repeticiones. En los años 70, el matemático Roger Penrose también le dió vueltas a un problema similar y se las ingenió para crear un mosaico aperiódico con un patrón que nunca se repite, usando dos azulejos romboidales uno grande y el otro pequeño (Figura 4b). Este mosaico atrajo la curiosidad del cristalógrafo Alan Mackay, quien simuló el difractograma que podría observarse en un material en el que los átomos se colocaran en las intersecciones del mosaico de Penrose. El resultado: una simetría de orden 10 como la observada por Daniel Shechtman. Teniendo conocimiento de ello, los físicos, Paul Steinhardt y Dov Levine conectaron el modelo de Mackay con los datos de Shechtman. En el número del 24 de diciembre de 1984 de la revista *Physical Review Letters*, Levine y Steinhardt muestran como los mosaicos aperiódicos sirven para interpretar los datos de Shechtman, y empiezan a llamar quasi-cristales a esos materiales.⁴

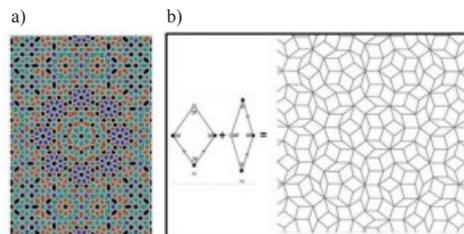


Figura 4. (a) Mosaico quasi-periódico en la Alhambra. (b) Mosaico quasi-periódico de Penrose.

Durante los dos años siguientes (1985 y 1986) Shechtman y colaboradores tuvieron una gran actividad. En la Figura 5 se muestra una fotografía de una de sus reuniones en Maryland.⁵ Durante ese periodo escribieron unos 15 artículos más describiendo diversos aspectos de la estructura de los quasi-cristales. ¿Fueron acogidos estos trabajos con entusiasmo por la comunidad científica? En muchos casos no. El caso más sobresaliente es el de Linus Pauling (posiblemente el químico más brillante del siglo XX) quien dijo en una ocasión: “los quasi-cristales no existen, lo que existen son los quasi-científicos”. Parece que Pauling se tomó el asunto de los cristales aperiódicos como algo personal, claro que tampoco ayudaron a calmar a Pauling artículos como el que tenía por título “*Pauling Model not universally accepted*” publicado por Cahn, Gratias y Shechtman en la revista *Nature* en 1986.⁶ Polémicas aparte, tal como explica Shechtman, la aceptación de sus descubrimientos fue un proceso progresivo. La comunidad de cristalógrafos en muchas ocasiones rechazaba sus descubrimientos por haber utilizado difracción de electrones en lugar de difracción de Rayos X, la cual era una técnica mucho más establecida.

Finalmente, y con la ayuda de resultados de difracción de Rayos X, los quasi-cristales fueron aceptados. De hecho, en 1992 la Unión Internacional de Cristalografía cambió la definición de cristal para poder incluir los quasi-cristales. La nueva definición (vigente hoy en día) es: “cristal es cualquier sólido que esencialmente tenga un diagrama de difracción discreto”. Algo interesante es que, al conocer la existencia de patrones de difracción con órdenes de simetría 5 ó 10, muchos cristalógrafos tuvieron una incómoda sensación en sus estómagos. Muchos ya habían visto patrones similares, pero los habían descartado pensando que eran maclas. El paradigma les decía que aquello no podía existir. ¡Cuántas oportunidades de ganar un premio Nobel perdidas!... Para colmo, resulta que en minerales tales como la khatyrkita y la cupalita encontrados en Koryak (Rusia) se han hallado estructuras que corresponden a quasi-cristales.⁷ Siempre habían estado allí, en la naturaleza...



Figura 5. Foto del año 1985. Daniel Shechtman discute la estructura atómica de su quasi-cristal con sus colaboradores. De izquierda a derecha: Daniel Shechtman, Frank Biancanello, Denis Gratias, John Cahn, Leonid Bendersky y Robert Schaefer.

Si a estas alturas el lector aún no se ha hecho una idea clara de cómo se colocan los átomos en un quasi-cristal, que no se preocupe. De hecho, determinar la posición de los átomos en un quasi-cristal es un problema de difícil solución. Pensando en términos de mosaicos, básicamente se trata de determinar primero la forma de las baldosas y luego el orden en que se colocan. Las posibilidades son infinitas y la solución a partir de los datos experimentales mucho más compleja de lo que se encuentran los cristalógrafos en cristales periódicos.⁸ Para hacernos una idea de la complejidad y belleza de la estructura de los quasi-cristales, la Figura 6 presenta el modelo de un quasi-cristal de una aleación de Al-Cu-Fe propuesto por Gratias y colaboradores en el año 2006.⁹

¿Y todo esto para qué? La esperanza que se albergaba con respecto a los quasi-cristales es que estructuras exóticas deberían dar lugar a propiedades exóticas. Sin embargo, casi 30 años después, el rango de aplicación de los quasi-cristales es muy reducido. Algunos ejemplos de estas aplicaciones son aceros endurecidos que se utilizan en maquinillas de afeitar o recubrimientos antiadherentes que se utilizan en sartenes.⁸ También se prevén algunas aplicaciones futuras en el campo de la fotónica, pero eso aún está por demostrar. Tal como diría Pauling, hoy por hoy, “los quasi-cristales no sirven para quasi-nada”. Está claro que este año, a diferencia de años anteriores,

los premios Nobel no se han concedido a un descubrimiento con grandes aplicaciones industriales (económicas). Tampoco se ha concedido en virtud de un curriculum con unos índices bibliométricos extraordinarios (de acuerdo con la *ISI web of Science*, Daniel Shechtman cuenta con 85 artículos y un índice *h* de 21). Este año se ha premiado una victoria de profundas implicaciones intelectuales. Se ha valorado una lucha por cambiar los paradigmas que algunos creían inmutables. Se ha valorado la tenacidad y valentía de un científico que defendió con fe unos resultados que hoy nos permiten tener una comprensión más amplia de la estructura de la materia. ¿Qué lecciones aprendemos de esta historia? Daniel Shechtman respondió a esa pregunta en una entrevista después de conocer la concesión del premio Nobel: “la lección es que un buen científico es alguien humilde, con mente abierta, que esté dispuesto a escuchar novedades inesperadas. De hecho, los descubrimientos realmente siempre son inesperados (si fueran esperados se hubieran descubierto hace tiempo). Si se encuentra algo nuevo, que está prohibido por los paradigmas de la ciencia, la gente debe escuchar”.¹

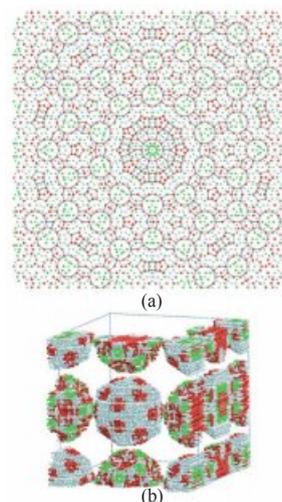


Figura 6. Modelo de la estructura de un quasi-cristal de Al-Cu-Fe.

Bibliografía

1. http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2011/press.html, consultada el 15/10/2011.
2. D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **1984**, 53, 1951–1953.
3. <http://www.youtube.com/watch?v=EZRTzOMHQ4s>, consultada el 15/10/2011.
4. D. Levine, P. J. Steinhardt, *Phys. Rev. Lett.* **1984**, 53, 2477–2480.
5. http://www.nist.gov/public_affairs/releases/Shechtman-100511.cfm, consultada el 15/10/2011.
6. J. W. Cahn, D. Gratias, D. Shechtman, *Nature* **1986**, 319, 6049, 102–103.
7. L. Bindi, P. J. Steinhardt, N. Yao, P. J. Lu, *Science* **2009**, 324, 1306–1309.
8. W. Steurer, S. Deloudi, *Acta Cryst.* **2008**, A64, 1–11.
9. M. Quiquandon, D. Gratias, *Phys. Rev. B* **2006**, 74, 0214205.

Remitido por: **Rubén Mas-Ballestré**
Departamento de Química Inorgánica,
Universidad Autónoma de Madrid.

Interacciones metalofílicas y enlaces de halógeno para el desplazamiento hacia el azul del máximo de emisión

A través de una estratégica combinación de enlaces de halógeno e interacciones metalofílicas entre centros de Au(I) y Ag(I), un equipo internacional de científicos del Complejo Científico Tecnológico UA-CSIC de Logroño, la Universidad de Zaragoza-CSIC y la Universidad de Osaka en Japón, ha sintetizado una familia de clústers intermetálicos luminescentes Au_2Ag_2 para los que es posible regular sus propiedades de emisión a partir de estímulos mecano-, vapo- o solvatoquímicos (*J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 16358–16361).

Para la síntesis del primero de estos compuestos, los autores parten de trifluoroacetato (*tfa*) de plata y $\text{NBu}_4[\text{Au}(\text{C}_6\text{F}_4\text{I})_2]$ en cantidades equimolares, lo que resulta en el producto $(\text{NBu}_4)_2[\text{Au}_2\text{Ag}_2(\text{C}_6\text{F}_4\text{I})_4\text{-tfa}]$, (Figura 7, **1**), caracterizado por una luminescencia verde. La adición de unas gotas de MeCN induce la sustitución de los ligandos *tfa* por MeCN, al mismo tiempo que produce la polimerización de los complejos de Au_2Ag_2 (Figura 7, **3**), provocando un cambio en el color de la emisión de verde a naranja/rojo. El paso de **1** a **3** tiene lugar a través de un dímero intermedio en el que se han disociado los ligandos *tfa*, (**2**, Figura 7) que emite a longitudes de onda correspondientes al amarillo ($\lambda_{\text{max}}^{\text{em}} = 580 \text{ nm}$). La interconversión entre **1** y **3** es posible a través del desplazamiento del equilibrio entre estas dos especies mediante la adición o eliminación de MeCN y *tfa*.

Los autores resaltan la emisión de **1** como la de longitud de onda más corta registrada para clústers de núcleo Au_2Ag_2 y apuntan a la formación de complejos intermetálicos cargados negativamente como estrategia para el desplazamiento del máximo de emisión hacia la región azul del espectro.

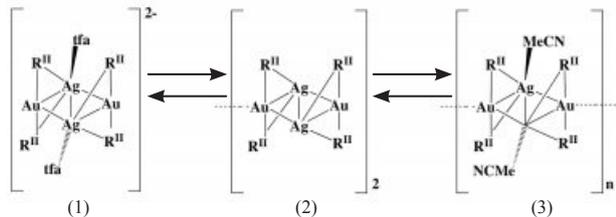


Figura 7. Combinando enlaces entre centros metálicos Au(I) y Ag(I) y enlaces de halógeno un equipo internacional de científicos logra sintetizar una familia de compuestos intermetálicos, cuya emisión abarca 140 nm del espectro de energía. R^{II} simboliza el ligando $2\text{-C}_6\text{F}_4\text{I}$.

Extensión de la regla de Hirsch de aromaticidad esférica para sistemas de capa abierta

Investigadores del Instituto de Química Computacional de la Universidad de Girona proponen una extensión de la regla de aromaticidad de Hirsch para sistemas esféricos de capa abierta (*Chem. Comm.* **2011**, *47*, 11647–11649).

La famosa regla de Hückel permite estimar si una molécula cíclica conjugada tiene propiedades aromáticas. Cuando la molécula posee $4N+2$ electrones π es aromática y cuando tiene $4N$ electrones π es antiaromática. La regla de Baird representa una extensión de la regla de Hückel para sistemas de capa abierta. Así, de acuerdo con la regla de Baird el estado

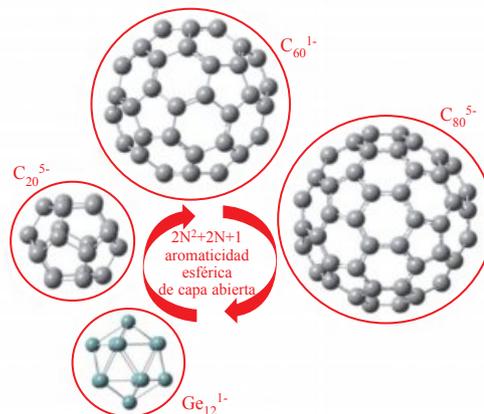


Figura 8. Científicos de la Universidad de Girona extienden la regla de Hirsch a sistemas esféricos de capa abierta permitiendo así predecir su aromaticidad.

tripleto más bajo en energía de un sistema de $4N$ electrones π es aromático y el de un sistema de $4N+2$ electrones π es antiaromático. La estabilidad extra de los sistemas Hückel de $4N+2$ electrones π proviene de su configuración electrónica de capa llena, mientras que la estabilidad de los sistemas Baird de $4N$ electrones π la proporciona una capa semillena con electrones del mismo espín.

En el año 2000 Andreas Hirsch encontró una regla para predecir la aromaticidad de los sistemas esféricos, conocida como la regla $2(N+1)^2$. Siguiendo la misma filosofía utilizada por Baird para extender la regla de Hückel a sistemas de capa abierta, los autores de este trabajo proponen ampliar la regla de Hirsch a sistemas esféricos de capa abierta. Así, los compuestos de simetría esférica que llenen hasta la mitad el nivel de energía más alto con electrones del mismo espín, es decir, aquellos con $2N^2+2N+1$ electrones y espín $N+\frac{1}{2}$, deberían ser aromáticos. Estudios computacionales basados en el análisis de los índices de deslocalización multicéntrico, el análisis de la geometría de los sistemas, y cálculos de desplazamiento químico independiente del núcleo, NICS por sus siglas en inglés, avalan esta hipótesis y demuestran que sistemas como el C_{60}^{19+} ($S=9/2$) y C_{60}^{1-} ($S=11/2$) tienen un carácter claramente aromático (Figura 8). Esta nueva regla de aromaticidad podría resultar una herramienta útil para el desarrollo de imanes moleculares.

A la caza de aniones sulfato

La presencia de iones metálicos en receptores supramoleculares confiere a estos compuestos metalocíclicos una mayor selectividad y fortaleza de la unión huésped-receptor frente a otros ligandos macrocíclicos o moléculas pre-organizadas en procesos de extracción de oxoaniones de interés biológico y medioambiental, como es el caso del ión sulfato.

Siguiendo esta premisa, científicos de la Universidad Massey en Nueva Zelanda han diseñado el ligando helicoidal macrocíclico N,N' -dimetil- N,N' -hexametilendi-(3-hidroxiiminometil-2-hidroxi-5-*tert*-butilbencilamina, capaz de encapsular aniones, una vez complejado con iones Cu(II) (*Chem. Comm.* **2011**, *47*, 499–501).

Estudios de espectrometría de masas de alta resolución ponen de manifiesto la gran afinidad de dicho ligando por los iones sulfato, incluso en disoluciones donde la concentración de otros aniones, como el anión dihidrógenofosfato, de forma y masa similares, es elevada. Para estas disoluciones, los autores observan una única señal a $m/z=665,2886$ correspondiente a la distribución isotópica del complejo ($C_{64}H_{100}N_8O_8Cu_2SO_4$)²⁺, Figura 9.

Los autores atribuyen la estabilidad del complejo huésped-receptor y por tanto la preferencia del metalomacrociclo por este anión a la coordinación cobre-sulfato, la interacción entre el anión y la cavidad electropositiva creada por los grupos amonio protonados, así como a una adecuada distancia intermetálica que permite optimizar los enlaces con el oxoanión.

En la actualidad los intereses de los autores del trabajo están dirigidos al estudio de receptores tipo $[Cu_2(L-2H)_2]$ que presentan una mayor rigidez y un menor tamaño de la cavidad para albergar el anión, lo que repercute de manera importante en la afinidad receptor-huésped.

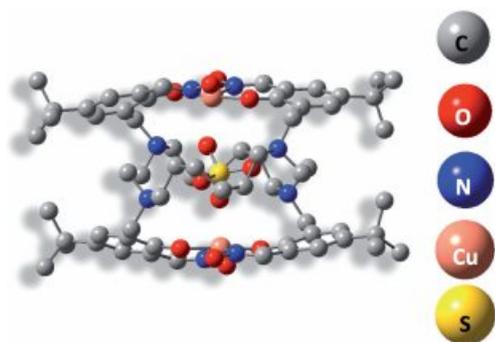


Figura 9. Científicos neozelandeses presentan un nuevo metalomacrociclo helicoidal, formado por la complejación de dos moléculas de 5-*tert*-butilsalicilaldoxima con iones Cu(II), capaz de extraer iones sulfato de soluciones acuosas.

De amarillo a azul y de azul a marrón sin pérdida de cristalinidad

Mientras investigaban la posibilidad de oxidar complejos de Rh(I) enlazados a O_2 y a otros ligandos voluminosos ricos en electrones, científicos de la Universidad Queen's en Ontario, Canadá, descubren una transformación organometálica doble monocristal-monocristal, poco usual en el estado sólido al transcurrir sin pérdida de cristalinidad (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 8100–8104).

La primera etapa de esta doble transformación supone la formación del complejo dioxigenado de rodio **2** (Figura 10) a partir de la exposición a O_2 durante un periodo de 15 días de cristales del complejo de rodio y nitrógeno **1** (Figura 10), sintetizados a partir de la reacción de $[\{ Rh(H_2C=CH_2)Cl \}_2]$ y el carbeno N,N' -(2,6-ⁱPr₂C₆H₃)₂C₃H₄N₂ (SIPr). Esta reacción va acompañada de un cambio de color de los cristales de amarillo a azul. La segunda exposición de los cristales azules de **2** a una atmósfera de CO durante 7 días resulta en la formación de cristales marrones del complejo **3** (Figura 10) en el que el grupo dioxígeno es desplazado por un ligando CO.

Los autores concluyen que la pérdida de nitrógeno (u oxígeno durante la segunda etapa de la transformación) junto a la consiguiente difusión de oxígeno (o CO en la segunda etapa) apenas repercute en el reordenamiento molecular en el estado cristalino, perteneciendo los tres cristales al mismo grupo espacial ortorrómbico $P2_12_12$ y mostrando prácticamente idénticas celdas unidad.

Los autores destacan la mayor afinidad del complejo por moléculas de CO frente a N_2 u O_2 como base para la posible aplicación de estas especies como sensores de CO en aire.

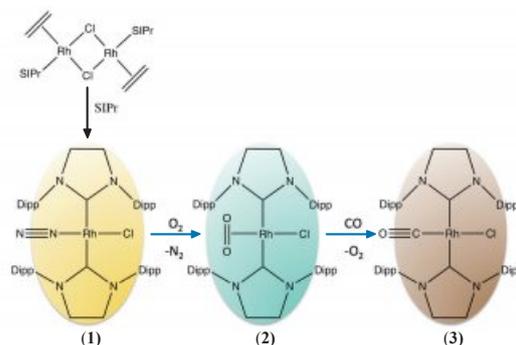


Figura 10. Científicos canadienses sintetizan una familia de compuestos de rodio y ligandos carbénicos *N*-heterocíclicos capaces de activar moléculas de pequeño tamaño, como N_2 , O_2 y CO.

Preparación enantioconvergente y quimioenzimática de amidas α -sustituidas

Considerando la importancia de las amidas enantiopuras sustituidas en posición α como intermedios clave en el campo de la farmacología, un equipo de investigadores del Instituto de Química Stratingh y el Departamento de Bioquímica adscritos a la Universidad de Groningen en los Países Bajos ha diseñado una ruta enantioconvergente y catalizada enzimáticamente para la preparación de estos compuestos (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 10712–10715).

Para la síntesis de las amidas α sustituidas, los autores parten de un sustrato racémico de α -bromoamidas, *rac*-**2** (Figura 11). A continuación, y utilizando un enzima haloalcano deshalogenasa catalizan la rotura del enlace C-halógeno del enantiómero (*R*)-**2** e invierten la configuración del centro quiral, tras la hidrólisis del enlace éster enzima-sustrato, generando el producto (*S*)-**3** (Figura 11). En una segunda etapa, la adición de cloruro de metanosulfonilo convierte el alcohol (*S*)-**3** en el éster metanosulfónico (*S*)-**4**. Finalmente, tras experimentar una reacción S_N2 frente a nucleófilos (Nu) tipo etanotiol, fenol, azida o bencilamina, el compuesto (*S*)-**4** junto a la α -bromoamida (*S*)-**2** conducen finalmente al producto (*R*)-**1**. Conviene señalar que a lo largo de la síntesis no son necesarios procesos de separación o purificación, lo que convierte esta metodología en altamente eficiente y práctica.

A partir de este procedimiento, los autores consiguen rendimientos que alcanzan el 96% ($R=Me$, $R'=-CH_2-CO-OtBu$, $Nu=bencilamina$) y excesos enantioméricos del 98% ($R=Me$, $R'=-CH_2-Ph$, $Nu=NaN_3$).

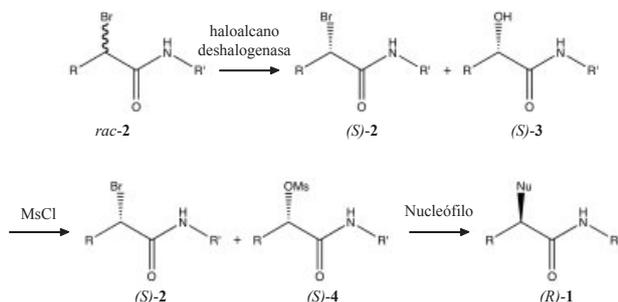


Figura 11. A partir de la inversión catalizada enzimáticamente de uno de los enantiómeros de un racémico de α -bromoamidas y posterior ataque nucleófilo de este producto y del enantiómero no reactivo, científicos de los países bajos consiguen sintetizar amidas α -sustituidas enantiopuras.

Largos pero estables

Un equipo internacional de científicos de la Universidad alemana Justus-Liebig y los Institutos ucranianos y californianos Politécnico de Kiev y para Materiales y Ciencia de la Energía de Standford, añaden un ejemplo más a la lista de excepciones para el acuerdo generalizado de *a menor longitud de enlace C-C mayor la fortaleza del mismo* y viceversa (*Nature* **2011**, 477, 308–311).

Los compuestos en cuestión consisten en aductos diamantoides para los que los autores del trabajo registran distancias de enlace comprendidas entre 1,647-1,704 Å (Figura 12), calculan, utilizando la teoría del funcional de la densidad incluyendo interacciones de dispersión, DFT-D por sus siglas en inglés, energías de enlace C-C que ascienden a 71 kcal/mol (Figura 12) y caracterizan como especies muy estables térmicamente, descomponiendo por encima de los 200 °C.

La idea que subyace al diseño y síntesis de estos compuestos es contrarrestar las interacciones repulsivas debidas al debilitamiento del enlace C-C introduciendo interacciones atractivas tipo van der Waals entre átomos de hidrógeno cercanos. Asimismo, los autores tratan de minimizar la estabilización por relajación geométrica, seleccionando hidrocarburos para los

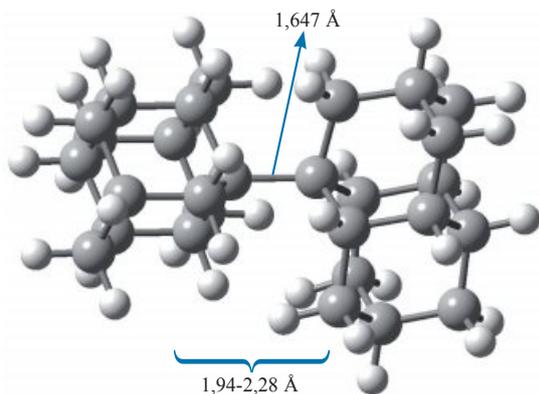


Figura 12. A partir de reacciones de Wurtz entre bromuros diamantoides terciarios, es posible preparar homo- y heterodímeros para los que se registran distancias de enlace C-C extraordinariamente largas y se predicen energías de enlace C-C que ascienden a 70 kcal/mol.

que la estructura de los radicales formados tras la disociación es similar a la estructura de estos fragmentos en el hidrocarburo.

Los autores del trabajo no descartan que interacciones similares van der Waals hidrógeno-hidrógeno entre sustituyentes alquilo voluminosos jueguen un papel importante en la estabilidad de complejos carbénicos de reciente síntesis.

Portadores de carga en materiales para electrónica plástica

El descubrimiento de los polímeros conductores mereció en el año 2000 el premio Nobel de Química. Su vertiginoso desarrollo en los últimos 20 años ha dado lugar a un campo de investigación en Ciencia altamente multidisciplinar y competitivo. La denominada electrónica plástica promete el uso de materiales orgánicos como semiconductores eléctricos y abre una enorme serie de mejoras, que van desde la mayor optimización de recursos energéticos, el mayor respeto al medioambiente, la aparición de la electrónica ligera (papel electrónico), la ultra-miniaturización de dispositivos (electrónica de moléculas individuales), el desarrollo de nuevos sectores de inversión e innovación, o de nuevos materiales biocompatibles tipo implantes.

Inherente al conocimiento intrínseco del modo de operación de los materiales y moléculas orgánicas en electrónica plástica está el reconocimiento molecular de los portadores de carga, responsables últimos de la existencia de una corriente eléctrica modulable, base última a su vez del funcionamiento de un dispositivo electrónico. Entre los pocos portadores de carga de consensuada y reconocida existencia en la comunidad científica internacional, los pares de polarones (traducción del inglés, *polaron-pairs*) han sido elusivos a la demostración de su indudable y definitiva existencia. Se asume que los pares de polarones desempeñan un papel clave en el funcionamiento de dispositivos electrónicos de diferente naturaleza.

En este contexto, el grupo de espectroscopía molecular de la Universidad de Málaga en colaboración con científicos del Instituto para la Investigación Científica e Industrial de la Universidad de Osaka aporta evidencias precisas y definitivas de la existencia de estos pares de polarones en materiales para electrónica plástica, en particular en una de estas grandes familias químicas de moléculas, los *oligotiofenos* (*J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 16350–16353). Los autores proporcionan una elucidación no sólo espectroscópica sino también estructural, y formulan los rangos de estabilidad de estos portadores de carga, y su relación con la arquitectura y composición química del sustrato semiconductor. Esta investigación, además, proporciona nuevas estrategias de trabajo para el descubrimiento y optimización de nuevos materiales. La metodología se ha basado en el uso exhaustivo de la espectroscopía Raman (Figura 13).

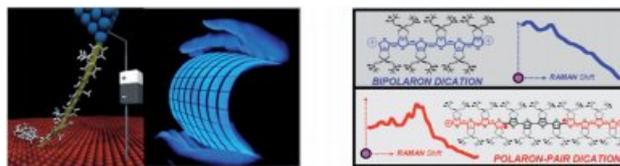


Figura 13. A partir de espectros Raman, científicos de la Universidad de Málaga y de Osaka aportan datos clave acerca de la presencia y estructura química de pares de polarones en oligotiofenos.