

Premios de la RSEQ 2011

La RSEQ quiere felicitar a todos los premiados y destacar la alta calidad científica de todos los candidatos presentados. La comisión ha seleccionado a los siguientes investigadores:

Premio a la Investigación y Medalla de la RSEQ 2011

Patrocinado por FEIQUE



Prof. María Vallet,
Catedrática de Química
Inorgánica en la Facultad
de Farmacia
de la Universidad
Complutense de Madrid.

Datos biográficos

María Vallet Regí se doctoró en Ciencias Químicas por la Universidad Complutense de Madrid en 1974 bajo la dirección del Profesor Andrés Mata. Desde 1990 desempeña la Cátedra de Química Inorgánica en la Facultad de Farmacia de la UCM. Es Académica de número de la Real Academia de Ingeniería, Medalla nº LII y Académica electa de la Real Academia Nacional de Farmacia. Ha recibido el *Premio*

Franco-Español 2000 de la *Société Française de Chimie*, el Premio RSEQ 2008 en Química Inorgánica y el Premio Nacional de Investigación 2008 Leonardo Torres Quevedo en Ingenierías. Ha formado parte de diversos Comités Nacionales e Internacionales, entre ellos, el Comité Rector del Programa "Science for Peace" de la OTAN (1999-2005), el Comité Nacional de la CNEAI (2004-2008), y ha sido Vicepresidenta de la Real Sociedad Española de Química (1999-2007).

Ha ocupado puestos de *Chercheur Associé*, *Maître de Conférences*, *Chercheur Associé de C.R. 1^{ere} classe* y *Professeur Associé de la Université J. Fourier del Institute National Polytechnique de Grenoble* (Francia) y ha sido Profesor Invitado en el *National Institute for Research in Inorganic Materials*, Tsukuba (Japón) y en el *Structural Chemistry Department*, Universidad de Estocolmo, Suecia. Ha realizado una extensa labor investigadora, marcada por un claro enfoque multidisciplinar, plasmada en más de 550 publicaciones científicas recogidas en el *ISI web of knowledge*, la mayoría en el área de Ciencia de Materiales.

Premios de Áreas

Ingeniería Química

Patrocinado CEPSA



Prof. Félix García-Ochoa,
Catedrático de Ingeniería
Química en la Facultad de
Ciencias Químicas de la
Universidad Complutense
de Madrid.

Datos biográficos

Félix García-Ochoa Soria es Catedrático de Ingeniería Química en la Universidad Complutense de Madrid. Desde 1986, es el director de un grupo de investigación (actualmente denominado de Físicoquímica de Procesos Industriales y Ambientales) en la Universidad Complutense. Su trabajo se ha desarrollado en los campos de catálisis y biocatálisis, modelización cinética de procesos químicos y bioquímicos, transferencia de materia y reacción química, diseño de reactores químicos y biorreactores e Ingeniería Ambiental. Ha publicado

más de 200 artículos científicos, más de 150 de ellos recogidos en las bases de datos internacionales. Ha presentado más de 150 ponencias y comunicaciones a congresos nacionales e internacionales. Ha sido co-director de más de 20 Tesis Doctorales y, en la actualidad, supervisa otras 5; también ha dirigido más de 80 Tesinas o Trabajos de Máster. Ha sido responsable de más de 50 proyectos financiados por el sector público y el privado. Tiene reconocidos 6 sexenios de investigación. Participó en la elaboración de planes de estudio (Ingeniero Químico, Licenciado en CC. Químicas y en Tecnología de Alimentos). Fue co-director del Máster en Biotecnología de la UCM (1989-1995), y ha dirigido más de 40 cursos de verano, de divulgación y de actualización para profesores de secundaria. Ha participado en Comités Científicos y Organizadores de varios congresos internacionales; fue el Presidente del Comité Científico del ECCE-3 (2003). Fue el primer gestor del Programa Nacional de Tecnologías Químicas del III Plan Nacional de I+D (1995-2000, luego denominado de Productos y Procesos Químicos), y ha sido Subdirector General de Proyectos de Investigación (2007-2010), en el Ministerio de Educación y Ciencia y en el Ministerio de Ciencia e Innovación.

Química Física

Patrocinado por Bruker Española



Prof. Feliu Maseras,
Responsable de grupo en el
Institut Català d'Investigació
Química (ICIQ).

Datos biográficos

Feliu Maseras obtuvo el doctorado en Química en la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) en 1991. Realizó una estancia de dos años como becario postdoctoral (programa UE) con Keiji Morokuma en el *Institute for Molecular Science* (Japón) y, posteriormente, trabajó dos años como investigador asociado (*chargé de recherche* interino) con Odile Eisenstein en Montpellier (Francia). Ha realizado también diversas estancias como *Emerson Center Visiting Fellow* en la Universidad de Emory (Atlanta, Estados Unidos). Obtuvo un puesto de profesor titular en la UAB en 1998, donde trabajó con Agustí Lledós. Ocupó esta plaza en la UAB hasta su traslado al Institut Català d'Investigació Química (ICIQ) en 2004 como responsable de grupo.

Autor de más de ciento cincuenta publicaciones en revistas científicas, sus artículos han sido citados más de 5000 veces, resultando en un índice *h* de 36. Coeditor del libro *Computational Modeling of Homogeneous Catalysis*, publicado por Kluwer en 2002. Ha dirigido nueve tesis doctorales. Receptor de la *Distinció per a la Promoció de la Recerca Universitària (categoria jove)* otorgada por la Generalitat de Catalunya en 2000, y del *Chemical Society Reviews Award*, otorgado por la *Royal Society of Chemistry* en 2008. Miembro del *International Advisory Board of Chemical Society Reviews* desde 2011.

Su investigación se ha basado en el diseño y aplicación de los métodos de mecánica cuántica (QM) y mecánica cuántica/mecánica molecular (QM/MM) a problemas de interés práctico. El campo de aplicación principal ha sido en el estudio computacional de sistemas moleculares en los que intervienen metales de transición, con particular atención a la catálisis homogénea. Su trabajo reciente ha contribuido a la clarificación del mecanismo de diferentes procesos de acoplamiento cruzado catalizados por complejos de paladio, así como de reacciones de arilación directa catalizadas por especies de paladio y rutenio. Otra línea de investigación activa en su grupo trata del estudio del origen de la enantioselectividad en procesos quirales de catálisis homogénea.

Química Inorgánica

Patrocinado por Bruker Española



Prof. Antonio Llobet,
Responsable de grupo en el
Institut Català d'Investigació
Química (ICIQ).

Datos biográficos

Antonio Llobet nació en Sabadell (Barcelona) en 1960. Se doctoró en 1985 en la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB), bajo la dirección del Prof. Francesc Teixidor. Después se trasladó a la University of North Carolina en Chapel Hill (USA) para realizar una estancia postdoctoral con el Prof. Thomas J. Meyer, hasta finales de 1987. Después de un corto periodo en la UAB y en la *University of Sussex-Dow Corning* (UK), el Prof. Llobet desempeñó las funciones de Agente Científico de la

Comisión de las Comunidades Europeas (1990-1991) en Bruselas (Bélgica). Más tarde fue nombrado Investigador Sénior Asociado en la *Texas A&M University* en *College Station* (USA) (1992-1993), trabajando con los grupos del Prof. Arthur E. Martell y Donald T. Sawyer. Durante el período 1993-2004 trabajó en la Universitat de Girona, donde en el año 2000 fue nombrado Profesor Catedrático de Química Inorgánica. A finales de 2004 el Prof. Llobet se incorporó a la UAB como Profesor Catedrático de Química Inorgánica y en Septiembre de 2006, fue nombrado *Group Leader* del Institut Català d'Investigació Química (ICIQ) en Tarragona.

Sus intereses en el campo de la investigación incluyen el desarrollo de complejos de metales de transición, como catalizadores para transformaciones orgánicas e inorgánicas eficientes y selectivas. Recientemente está desarrollando la química molecular relacionada con el establecimiento de nuevos Esquemas de conversión de la energía solar, de una manera sostenible, eficiente y respetuosa con el medio ambiente, con el fin de obtener combustibles solares. Una buena parte de su investigación está relacionada con la

fotosíntesis artificial, la mimetización de las reacciones que tienen lugar en los procesos fotosintéticos de las plantas verdes: desde la captura de la radiación solar y las reacciones de transferencia electrónica en cadena, hasta los procesos catalíticos relacionados con la oxidación del agua y la reducción de CO₂.

El Prof. Llobet ha publicado más de 100 trabajos en revistas especializadas y ha dirigido 15 tesis doctorales que han recibido la máxima calificación. En el año 2000, el Prof. Llobet recibió la distinción de la Generalitat de Catalunya para Jóvenes Investigadores en su primera edición.

Química Orgánica

Patrocinado por Janssen Cilag España



Prof. Hermenegildo García,
Catedrático de Universidad
en el Instituto de Tecnología
Química (Universidad
Politécnica de Valencia CSIC).

Datos biográficos

Hermenegildo García Gómez (Canals, 1957) se graduó en Ciencias Químicas por la Universidad de Valencia en 1979 (premio extraordinario de Licenciatura) y realizó el doctorado en el Departamento de Química Orgánica de la Facultad de Farmacia bajo la dirección del Profesor Miguel A. Miranda Alonso, en el campo de la Fotoquímica Orgánica preparativa obteniendo el título de Doctor en 1983 (premio extraordinario de Doctorado). En 1983 se incorporó como Profesor Contratado en el Departamento de Química de la Universidad Politécnica de Valencia dirigido por el Profesor Jaime Primo Millo, siendo Catedrático de Universidad desde 1996. Ha sido miembro del Instituto de Tecnología Química, centro mixto de la Universidad Politécnica de Valencia y

del CSIC dirigido por el Profesor Avelino Corma Canós, desde su fundación en 1991. Realizó una estancia postdoctoral en la Universidad de Reading con el Profesor Andrew Gilbert (1987) y varias estancias sabáticas en el grupo de *Laser Flash Photolysis* del Profesor J. C. Scaiano de la Universidad de Ottawa con el que ha mantenido una relación continuada desde 1992.

El Prof. García ha venido desarrollando su labor investigadora en el campo de la fotoquímica y de la catálisis heterogénea donde ha venido aplicando materiales como nanotubos de carbono, nanopartículas de diamante y materiales microporosos reticulados metal-orgánico, entre otros. El Prof. García ha publicado más de 400 artículos en revistas científicas del área de Química, Materiales y Medio Ambiente y ha dirigido 31 Tesis Doctorales. Ha presentado más de 20 patentes, una de las cuales se encuentra en explotación y otras dos en fase de desarrollo preindustrial. Ha impartido más de 40 Conferencias en Congresos y es miembro del consejo asesor de *Energy and Environmental Science*, *Photochemical and Photobiological Science* y *Journal of Molecular Catalysis*. Actualmente está trabajando en el campo de generación fotocatalítica de hidrógeno en colaboración con el Profesor Vicente Fornés y en depuración de aguas con la Profesora Mercedes Álvaro.

Premios de Investigadores Noveles

Patrocinado por Sigma Aldrich



Dr. Manuel Alcarazo,
Responsable de grupo en
el Max-Planck-Institut für
Kohlenforschung (Alemania).

Datos biográficos

Manuel Alcarazo (licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de Sevilla, 2000) se doctoró en 2005 bajo la supervisión de los Profs. Rosario Fernández y José M. Lassaletta con una tesis basada en el diseño de nuevos carbonos *N*-heterocíclicos. Entre 2005 y 2008 realizó una estancia postdoctoral en el *Max-Planck-Institut für Kohlenforschung* (Alemania) en el grupo del Prof. Alois Fürstner y desde 2009 dirige su propio grupo de investigación en esa misma institución. Sus áreas de interés son el diseño de nuevos ligandos y sus aplicaciones en catálisis y síntesis, la activación de moléculas inertes y el aislamiento de intermedios reactivos.



Dra. Eva Hevia,
Senior Lecturer en el
Departamento de Química
pura y Aplicada de la
Universidad de Strathclyde
(Escocia).

Datos biográficos

Natural de Gijón (Asturias), Eva Hevia se doctoró en la Universidad de Oviedo en 2002 bajo la dirección de los profesores Víctor Riera y Julio Pérez trabajando en el área de compuestos organometálicos de renio. A continuación se trasladó a la Universidad de Strathclyde (Glasgow) como becaria

postdoctoral Marie Curie con el Prof. Robert Mulvey donde trabajó en la activación de enlaces C-H empleando compuestos de zinc. En marzo de 2006 se unió a la Universidad de Oviedo como investigadora Ramón y Cajal, posición a la que renunció en noviembre de 2006 para incorporarse como *Royal Society University Research Fellow* y *Lecturer* en la Universidad de Strathclyde, donde en la actualidad ocupa una posición de *Senior Lecturer*. Su investigación se centra en el diseño de compuestos bimetálicos que combinan metales con distintas polaridades y en sus aplicaciones sintéticas en Química Orgánica. Actualmente es autora de más de 70 artículos científicos y su trayectoria investigadora ha sido recientemente reconocida con el premio *Harrison-Meldola Medal Award* (2009) de la *Royal Society of Chemistry*.



Dr. David González Rodríguez,
Profesor Titular en el
Departamento de Química
Orgánica de la Universidad
Autónoma de Madrid.

Datos biográficos

David González Rodríguez obtuvo el título de Doctor en Química por la Universidad Autónoma de Madrid en 2003, bajo la tutela del Profesor Tomás Torres. Posteriormente realizó una estancia como becario Marie Curie en el grupo de investigación del Profesor Bert Meijer en la Universidad Tecnológica de Eindhoven. Desde 2010 es Profesor Titular en la Universidad Autónoma de Madrid. Su línea de investigación principal se centra en la nanoestructuración de materiales orgánicos mediante la utilización de distintas técnicas de autoensamblaje molecular.



Dr. Aurelio Mateo-Alonso,
Responsable de grupo en el
*Freiburg Institute for
Advanced Studies* de la
Universidad de Friburgo
(Alemania).

Datos biográficos

Aurelio Mateo-Alonso (Madrid, España, 1976) obtuvo la Licenciatura en Química (1999) con Grado (2000) en la Universidad Autónoma de Madrid bajo la dirección del Prof. José Luis García Ruano y de la Prof. María del Carmen

Maestro. En 2004 completó su Doctorado en Química en el Queen Mary College de la Universidad de Londres (Reino Unido), bajo la supervisión del Prof. James Utley y del Dr. Peter Wyatt. Entre 2004-2009 trabajó como Investigador Postdoctoral en el grupo del Prof. Maurizio Prato en la Universidad de Trieste (Italia) por medio de varios contratos. Desde el 2009, dirige un grupo de investigación independiente en el *Freiburg Institute for Advanced Studies* (Friburgo, Alemania). En el 2007 fue galardonado con el Premio *Giovani Ricercatori* de la Universidad de Trieste y en el 2009 con el Premio *Eugen-Graetz* de la Universidad de Friburgo. Sus líneas de investigación se enfocan en la química y en la química supramolecular de moléculas aromáticas planas y curvadas y su implementación en dispositivos y máquinas moleculares.

Premio Hispano-Francés (Catalán-Sabatier, Jurado Español)



Prof. Marie-Paule Pileni,
Profesora Distinguida de
la Universidad Pierre y Marie
Curie, París (Francia),
y Profesora Adjunta de la
Facultad de Química
y Bioquímica del *Georgia
Institute of Technology*
(Atlanta, EE UU).

Datos biográficos

Marie-Paule Pileni (<http://www.sri.jussieu.fr/pileni.htm>) es Profesora Distinguida de la Universidad Pierre y Marie Curie, París (Francia) y Profesora Adjunta de Química y Bioquímica en la Facultad de Química y Bioquímica del *Georgia Institute of Technology* (Atlanta, EE UU). Es además miembro (1999-actualidad) y directora (2004-2010) del *Institut Universitaire de France* (IUF). Ha publicado alrededor de 380 artículos, que han recibido 13604 citas y tiene un índice *h* de 60.

La investigación de la Prof. Pileni se puede clasificar de altamente interdisciplinar en toda su trayectoria. Entre sus mayores logros cabe destacar: (i) la preparación de nanocristales de diferentes formas y tamaños y la modificación química de enzimas, en base al grado de entendimiento alcanzado en el estudio de la cinética y de los mecanismos de las disoluciones coloidales; (ii) la formación de auto-ensamblados termodinámicamente estables mediante el empleo de surfactantes (supra-agregados) o nanocristales inorgánicos (supra-cristales); (iii) la consecución de propiedades ópticas y magnéticas colectivas inducidas por interacciones dipolares y debidas a la organización nanocristalina en superestructuras 1D, 2D y 3D; (iv) el estudio de propiedades físicas intrínsecas como las vibracionales, magnéticas o el crecimiento cristalino, relacionadas con el ordenamiento nanocristalino en supra-cristales; (v) el estudio de propiedades químicas intrínsecas debidas a la ordenación de nanocristales.

Marie Paule Pileni ha recibido el *Langmuir Award* de la *American Chemical Society*, el *Lecture Award* de la *Japanese*

Chemical Society, el *Research Award* de la *Alexander von Humboldt Foundation* Alemana, el *Descartes-Huygens Prize* de la *Royal Netherlands Academy of Arts and Science* y la *Emila Valori* de la *French Academy of Sciences*. Además de estos galardones, cuenta con la *French Citation Lauréate*, y el *Institute of Scientific Information Award* por ser el científico francés más citado entre 1981 y 1998. Es además miembro de la *European Academy of Science*, de la *Royal Swedish Academy of Engineering Sciences*, *Fellow* de la *Royal Society of Chemistry* y Doctora *Honoris Causa* por la Chalmers University (Göteborg, Suecia). Pertenece también a *l'Ordre National de la Légion d'Honneur et du Mérite*.

Durante las dos últimas décadas la Profesora Pileni a graduado a 72 doctorandos (siendo más del 50% mujeres) de todo el mundo. Muchos de ellos (en Suecia, Estados Unidos, China, Grecia, Portugal, Japón, Reino Unido, Suiza, Francia y otros países) han obtenido posiciones permanentes.

Premio Hispano-Alemán (Elhúyar-Goldschmidt, Jurado Español)



Prof. Christian Griesinger,
Catedrático de Química
Orgánica y Director del
Departamento de RMN
en el *Max Planck Institut
Biophysikalische Chemie*
(Göttingen, Alemania).

Datos biográficos

Christian Griesinger estudió química y física en la Universidad de Frankfurt (Alemania) en la que obtuvo el *Diploma* (1984) y leyó su Tesis Doctoral (1986), trabajo que realizó bajo la supervisión del Prof. Horst Kessler. En su periodo doctoral desarrolló secuencias de pulsos para espectroscopía de RMN y las aplico al análisis conformacional de péptidos. Durante su trabajo postdoctoral, con Richard R. Ernst en el ETH de Zúrich, continuó desarrollando nuevas secuencias de pulso como la espectroscopía de RMN tridimensional y la espectroscopía de correlación total con relajación compensada (CLEAN-TOCSY). Desde 1990 es Catedrático de Química Orgánica en la Universidad de Frankfurt. Al poco de incorporarse a esta Universidad, y con la financiación concedida por la *Deutsche Forschungsgemeinschaft* (DFG) junto a su colega Heinz Rüterjans del Instituto de Química Biofísica, logró poner a punto el primer servicio europeo de espectroscopía de RMN de biomoléculas, al que se incorporó en 1995 el

primer equipo de RMN de 800 MHz de todo el mundo. Entre los logros de su investigación en la Universidad de Frankfurt destacan el desarrollo de la espectroscopía de RMN con sensibilidad aumentada, nuevos métodos para medir acoplamientos escalares como parámetros de RMN, o el control óptimo en la espectroscopía de relajación de correlación cruzada. En 1999 se convirtió en Director del Departamento de Biología estructural basada en RMN del *Max Planck for Biophysical Chemistry* en Göttingen y se encargó del desarrollo de la RMN en estado líquido y sólido, y en las aplicaciones derivadas de la combinación de ambas técnicas. De la investigación llevada a cabo en este periodo destaca la caracterización de estructuras dinámicas de proteínas plegadas y desordenadas (particularmente las implicadas en procesos neurodegenerativos), la determinación estructural de proteínas de membrana, la investigación de la estereoquímica de compuestos naturales no cristalizables, y las herramientas para el desarrollo de pequeñas moléculas inhibitoras de proteínas, en particular en estudios de neurodegeneración. El Prof. Griesinger ha organizado varias conferencias internacionales (ENC 2000, ICMRBS 2006), y ha participado en diferentes comités asesores (*Göttingen Research Council*, FMP en Berlín, *Study Section* de la DFG, *Varian Prize Committee*, *EUROMAR Committee*, *ICMRBS Committee*). También ha sido director del *Institute for Organic Chemistry* (1993-1997) y del *Max Planck Institute for Biophysical Chemistry* (2007-2008), ha organizado un curso EMBO, ha impartido docencia con regularidad, y ha sido editor asociado del *Journal of Magnetic Resonance* y de *FEBS Letters*. Entre las distinciones que ha recibido cabe destacar el *Leibniz Prize* de la DFG (1998), el *Bayer Prize* (2003), y un *ERC Advanced Grant* en 2008.

Premio Hispano-Alemán (Elhúyar-Goldschmidt, Jurado Alemán)



Prof. David Amabilino,
Científico Titular y Vice-Director del Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB) del CSIC.

Datos biográficos

David Amabilino nació en Welwyn Garden City, en las afueras de Londres, el año que Inglaterra ganó la copa del mundo de fútbol. Se licenció (1988) y doctoró (1991) en Ciencias Químicas por la Universidad de Londres, en el Colegio Royal Holloway y Bedford. Durante su tesis trabajó en la síntesis y caracterización de dendrímeros y podandos. En su estancia postdoctoral de tres años en la Universidad de Birmingham (UK) empezó investigando ligandos tipo escorpión en el grupo de Sir J. Fraser Stoddart (FRS), y posteriormente estudió el auto-ensamblaje de catenanos y rotaxanos. Su logro más importante entonces fue la síntesis del pentacatenano olimpiadano. Posteriormente, en el grupo del Prof. Jean-Pierre Sauvage en la Universidad Louis Pasteur de Estrasburgo, y trabajando al lado de Christiane Dietrich-Buchecker, estudió la formación de complejos y catenanos funcionalizados con porfirinas y máquinas moleculares. Se trasladó a España en el año 1996 como postdoc en el grupo del Prof. Jaume Veciana en el Instituto de Ciencia de Materiales de

Barcelona (ICMAB) del CSIC, en el que es Científico Titular desde 1999. En este grupo investigó en diferentes ámbitos como polímeros quirales, imanes moleculares, cristales líquidos, conductores moleculares y monocapas auto-ensambladas. Actualmente es Vice-Director del ICMAB y adjunto a la coordinación del área de química de la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva. Asimismo, está en el comité editorial de las revistas *Chemical Society Reviews* y *Chirality*.

Su investigación actual se centra en el estudio de la quiralidad en nanomateriales, especialmente en monocapas auto-ensambladas y fibras, con el fin de crear nuevos sistemas moleculares con propiedades novedosas. Cabe destacar el estudio de geles moleculares basados en la tendencia a auto-agregarse de nuevas moléculas pi-funcionales sintéticas.

Para llevar a cabo este trabajo de carácter multidisciplinar cuenta con colaboraciones con grupos nacionales e internacionales, que incluyen los de de Narcis Avarvari (Universté d'Angers), Steven De Feyter (Katholieke Universiteit Leuven), Roberto Lazzaroni (Université de Mons), Carmen Ocal (ICMAB), Rosa Ortuño (Universitat Autònoma de Barcelona), Lluïsa Pérez-García (Universitat de Barcelona), Rasmita Raval (University of Liverpool), Marc Sallé (Université d'Angers). Los excelentes investigadores jóvenes que han realizado (5 tesis completadas) y realizan sus trabajos en el ICMAB así como los estudiantes que realizan estancias cortas merezcan una mención especial ya que su dedicación y esfuerzo ha conducido a los trabajos publicados; aproximadamente 120 artículos hasta hoy.

Premio a la investigación Miguel Catalán 2010



La Comunidad de Madrid ha concedido el Premio de Investigación Miguel Catalán 2010 al Prof. Miguel Ángel Alario, Catedrático de Química Inorgánica de la Universidad Complutense de Madrid. El galardón, que ha cumplido su quinta edición, promueve y recompensa el esfuerzo, la excelencia investigadora y la

trayectoria profesional en Ciencias de aquellos investigadores que han contribuido de manera significativa al avance tecnológico. En ediciones anteriores, el trabajo de otros destacados químicos, como es el caso de José Elguero Bertolini (2005) y José Luis García Fierro (2008), fue también reconocido.

En el caso del Prof. Alario, el jurado ha valorado especialmente la excelencia de su investigación científica en el área de la química del estado sólido, de la que ha sido pionero e impulsor a nivel nacional e internacional. Además, se ha destacado su importante labor académica y docente de formación de investigadores, y de introducción de nuevas técnicas experimentales e instalaciones científicas.

Licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad Complutense de Madrid (UCM) en 1966, Miguel Ángel Alario es doctor también por el mismo centro desde 1970.

Catedrático de Química Inorgánica por la UCM desde hace 28 años, fue decano de la Facultad de Ciencias Químicas (1986-1994) y director de los Cursos de Verano de El Escorial (1996-1998), pero fue su estancia postdoctoral en Inglaterra la que marcó su trayectoria profesional en la que era entonces una nueva parcela del conocimiento científico: la química del estado sólido, de la que ha sido pionero y creador de escuela en España, así como un relevante impulsor a nivel internacional.

El Prof Alario es experto en materiales superconductores de alta temperatura, ha sido fundador en la UCM del Laboratorio de Altas presiones y del Laboratorio de electroquímica del estado sólido, además de cofundador del Centro de Microscopía Electrónica. En la UCM ha sido decano de la Facultad de Ciencias Químicas, presidente desde 2009 de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales. Entre sus galardones destacan el Premio de la Real Sociedad Española de Física y Química 1973, el de la Academia de Ciencias de Granada 1988, el Premio Rey Jaime I en Ciencia de Materiales 1991, la Medalla de la Real Sociedad Española de Química 1996 y el Premio México de Ciencia y Tecnología 2009.

Fuente original: **Gabinete de Comunicación UCM**

El profesor Miguel Valcárcel, investido Doctor Honoris Causa por la Universidad de Valencia

En el solemne acto académico celebrado el 31 de marzo en el Paraninfo de la Universitat de Valencia, el rector de la misma, Esteban Morcilla, investía como Doctor Honoris Causa al catedrático Miguel Valcárcel en presencia tanto del rector de la Universidad de Córdoba, José Manuel Roldán, que co-presidió el acto, como de autoridades académicas de las dos instituciones.

Se reconoce así una brillante trayectoria investigadora y docente en el ámbito de la Química Analítica que ha sido ampliamente reconocida y premiada en España y en el extranjero. En el laudatio del profesor Miguel de la Guardia, catedrático de la Universitat de Valencia y promotor de la propuesta, se destacó como Miguel Valcárcel supo transgredir el estrecho marco de una investigación puramente académica y se fijó en objetivos directamente relacionados con la mejora de los métodos disponibles, la revisión clara de las propuestas analíticas clásicas y la transferencia de conocimiento y tecnología al sector industrial. Sus aplicaciones en la automatización, el desarrollo de métodos de criba y control de parámetros globales que ayuden a identificar problemas, así como sus desarrollos nanotecnológicos han supuesto contribuciones decisivas para apoyar un desarrollo tecnológico que corra parejo a los avances en investigación básica.

En su lectio de aceptación, el nuevo doctor abordó el presente y el futuro docente e investigador de la Química Analítica, cuyo



El Prof. Valcárcel en el momento en el que es investido Doctor Honoris Causa por el rector de la Universitat de Valencia.

contenido extenso será publicado por El *Servei de Publicacions* de la Universitat de Valencia en su serie "Honoris Causa".

Finalmente el rector Magnífico de la Universitat de Valencia cerró el acto congratulándose por la incorporación del profesor Valcárcel entre su claustro de doctores.

Se da la circunstancia que esta distinción se otorga en el año 2011, reconocido por la UNESCO como Año Internacional de la Química, lo que confiere un valor añadido a la investidura.

Fuente original: **Gabinete de Comunicación de la Universidad de Córdoba**

19 Simposio Científico de la Fundación Lilly "Síntesis orgánica en el año internacional de la química" (El Escorial, Madrid, 14-15 de abril)

La Fundación Lilly celebró los pasados 14 y 15 de abril su 19 simposio científico dedicado, en esta ocasión, a la Síntesis Orgánica. Dentro del Año Internacional de la Química que se celebra bajo el lema "Química: nuestra vida, nuestro futuro", los especialistas reunidos en el evento coincidieron en señalar cómo muchas moléculas, como las de los antibióticos o los antitumorales, son las que han cambiado la vida en el mundo. La reunión, que tuvo lugar en el Auditorio de San Lorenzo de El Escorial, Madrid, estuvo presidida por los profesores Julio Álvarez-Builla, Antonio Echavarren y Jesús Ezquerro y contó con la participación de más de 500 asistentes de diferentes centros de investigación. En esta ocasión se dedicó una atención especial a la química organometálica del oro y del paladio, ya que está permitiendo una química más eficiente, menos contaminante y más sostenible que la realizada hasta la fecha. También se habló de economía atómica en las nuevas metodologías en síntesis total, y se destacaron los últimos avances en química aplicada a la Biomedicina. La reunión se estructuró en cuatro sesiones con cuatro ponencias seguidas cada una de ellas de discusión con los asistentes, una conferencia de apertura, impartida por el Premio Nobel de Química 2010, Eiichi Negishi, de la Universidad de Purdue, y una conferencia de clausura a cargo del profesor Kyriacos C. Nicolau, del *Scripps Research Institute*, de la Universidad de California.

Durante el simposium, el profesor José Barluenga Mur, Catedrático de Química Orgánica de la Universidad de Oviedo, recibió el Premio Fundación Lilly a una Carrera Distinguida, a propuesta de la Sociedad Española de Química. El galardón reconoce su contribución al desarrollo de la investigación en Química en España, así como su brillante y fecunda carrera



(De izda. a dcha.): Julio Álvarez Builla, Catedrático de Química Orgánica de la Universidad de Alcalá, José Antonio Gutiérrez, Director de la Fundación Lilly, José Barluenga Mur, Catedrático de Química Orgánica de la Universidad de Oviedo, y Nazario Martín León, Presidente de la Real Sociedad Española de Química.

científica. Durante el acto de entrega, el doctor José Antonio Gutiérrez, director de la Fundación Lilly, subrayó en relación al Prof. Barluenga "su brillante y fecunda carrera científica que se une a su destacada labor académica. Si hablamos de Química en España, tenemos que hablar de José Barluenga. Es y ha sido todo en esta disciplina". El profesor Barluenga ha fomentado el desarrollo de la Química en nuestro país y sus aportaciones han sido decisivas para el estudio de los compuestos organometálicos.

Como en anteriores ocasiones, el comité científico combinó la presencia de maestros reconocidos con brillantes jóvenes investigadores, creando con ello una atmósfera única y en definitiva, resultando en una excelente reunión científica.

Fuente original: **Gabinete de prensa de la Fundación Lilly**

Jornada de Matemáticas y Química (RSEM-RSEQ, Universidad de Sevilla, 8 de abril de 2011)

Todos sabemos que la química está de celebración en este año 2011. También nuestros colegas matemáticos tienen celebración: el centenario de la fundación de la Real Sociedad Matemática Española (RSME). Para conmemorarlo, la RSME ha organizado diversas actividades que se puede consultar en <http://www.rsme.es/centenario/>. Una de ellas ha sido la celebración conjunta con la RSEQ de una Jornada sobre Matemáticas y Química (<http://www.imus.us.es/ACT/RSEM-RSEQ-2011>). Los profesores Luis Narváez y Ernesto Carmona, de la Universidad de Sevilla, en colaboración con la Real Academia Sevillana de Ciencias (RASC), han organizado esta reunión en la que se han discutido intereses científicos comunes. La jornada consistió en seis ponencias y animadas discusiones. Fue estimulante comprobar que la química y las matemáticas tienen muchas afinidades y que la relación entre las dos áreas debe reforzarse en el futuro. Durante la sesión, el profesor Nazario Martín, en nombre de la RSEQ, entregó al profesor Antonio Campillo, presidente de la RSME, un diploma recordando el acto y felicitando a nuestros colegas matemáticos por la celebración de su centenario.

La primera conferencia (*Dinámica de poblaciones: el poder de la comunicación y la importancia de las formas*) fue del profesor Miguel Herrero (UCM) que expuso ejemplos dónde las matemáticas se aplican a una variedad de experiencias químicas, como reacciones oscilantes; la coagulación de coloides; teoría de evolución molecular prebiótica.

La profesora Isabel Rozas (Trinity College, Dublin), en la conferencia *Química matemática: aplicación de métodos matemáticos en la química*, repasó el desarrollo histórico y la situación actual de la química matemática, un área de la química que usa los métodos y conceptos de las matemáticas. Se expusieron ejemplos de investigaciones en métodos QSAR, las aplicaciones de teoría de grafos, los métodos topológicos y sus aplicaciones en similitud molecular y en el método AIM.

La profesora M^a Jesús Esteban (CNR y Université Paris-Dauphine), en la conferencia titulada *Umbral de la estabilidad para un electrón relativista en un campo magnético intenso*, expuso sus investigaciones sobre el desarrollo de métodos matemáticos para el estudio de estados fundamentales de átomos y moléculas en los que los efectos relativistas son importantes, especialmente en presencia de campos magnéticos. Es indudable que la mecánica cuántica relativista es



El Prof. Nazario Martín, como Presidente de la RSEQ, entrega al Prof. Antonio Campillo, presidente de la RSME, un diploma que recuerda la celebración de la jornada.

fundamental para entender el comportamiento químico y será de suma utilidad para la química del futuro.

El profesor Manuel Yáñez (UAM) impartió la conferencia titulada *La química teórica y computacional motor de la química moderna*, haciendo un repaso histórico del desarrollo de la química computacional desde los orígenes de la mecánica cuántica; destacando los hitos en esta evolución. También recaló el papel predictivo que la química computacional tiene en la actualidad.

El profesor Jesús Palacián (Universidad Pública de Navarra) impartió la conferencia titulada *La geometría del estado de transición en dinámica molecular*, dónde expuso la aplicación de la teoría de sistemas dinámicos a problemas de dinámica molecular, estudiando el estado de transición de la reacción de isomerización del ácido cianhídrico.

El Dr. Bernardo Herradón (CSIC) impartió la conferencia titulada *La relación de la química y las matemáticas: un repaso histórico y perspectivas de futuro*. Aunque aparentemente no ha habido mucha relación entre la química y las matemáticas, ésta se ha producido a través del trabajo de algunos físicos-matemáticos. Se propone una mayor interacción entre químicos y matemáticos y se anticipa que una de las áreas de desarrollo futuro de la química será su *matematización*, que permitirá establecer las bases conceptuales fundamentales de la química. Una copia de la presentación se puede descargar en <http://www.losavancesdelaquimica.com/quimica-y-matematicas/>.

Remitido por: **Bernardo Herradón**
Instituto de Química Orgánica General, CSIC

Sección Territorial de La Rioja – Inauguración del Año Internacional de la Química en La Rioja (Logroño, 5 de febrero de 2011)

Los químicos de La Rioja celebraron el día 5 de febrero la inauguración del Año Internacional de la Química en Logroño con varias actividades que pretendían llevar la química a la sociedad. Estas actividades han estado financiadas por la FECYT, Universidad de La Rioja, RSEQ-S.T. La Rioja y el Ayuntamiento de Logroño. La jornada comenzó con diversas actividades en la Casa de las Ciencias de Logroño, entre ellas el taller infantil "Química con mis manos", en el que se inscribieron 130 niños de entre 8 y 12 años. Otras 400 personas acudieron a la Casa de las Ciencias a lo largo de la jornada, para asistir a distintos talleres y demostraciones experimentales sobre la presencia de



Asistentes a los talleres y demostraciones organizados en la Casa de las Ciencias de Logroño.

la química en nuestra vida diaria. Los experimentos se basaron en los polímeros, la química del fuego, reacciones y temperatura, reacciones a todo color y la química de la electricidad.

A las 19 horas, en el Auditorio del Ayuntamiento de Logroño y con un público de unas 500 personas, tuvo lugar un acto oficial de inauguración que combinó la divulgación de la química con la música. El acto comenzó con un vídeo del Año Internacional de la Química (<http://www.youtube.com/watch?v=1MVnF0RYXpU>) y una presentación del Vicerrector de Investigación de la Universidad de La Rioja, profesor Eduardo J. Fernández. A continuación el Presidente

de la RSEQ, profesor Nazario Martín, impartió la conferencia “2011, una odisea de la química y de la mujer en la ciencia”. La jornada se cerró con un concierto de la orquesta riojana de plectro “La Orden de la Terraza” que interpretó piezas de diversos países y épocas. En ese día de febrero los químicos riojanos consiguieron transmitir a un sector de la sociedad riojana el lema del Año Internacional de la Química “La Química, nuestra vida, nuestro futuro”.

Remitido por: **Pedro J. Campos García**
Presidente de la Sección Territorial de La Rioja - RSEQ

Sección Territorial de Madrid - Acto de entrega del Premio a la mejor Tesis Doctoral en Química (2009–2010) de la Comunidad de Madrid

El viernes 29 de abril, tuvo lugar en la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense el Acto de entrega de los Accésit y el Primer Premio a la Mejor Tesis Doctoral en Química defendida durante el curso académico 2009-2010 en la Comunidad de Madrid.

En esta VII edición de estos premios, el Primer Premio se otorgó a la Tesis Doctoral titulada “*Phthalocyanines: robust red-adsorbing dyes for molecular photovoltaics*” realizada por el Dr. Ismael López Duarte y dirigida por el Dr. Tomás Torres Cebada y la Dra. M^a Victoria Martínez Díaz del Departamento de Química Orgánica de la Universidad Autónoma. Los dos accésit que contemplaba la convocatoria se otorgaron a las Tesis Doctorales tituladas: “*Biocerámicas magnéticas para aplicaciones médicas*” realizada Dr. Eduardo Ruiz Hernández, dirigida por la Dra. María Vallet Regí y el Dr. Daniel Arcos Navarrete del Departamento de Inorgánica y Bioinorgánica de la Universidad Complutense y “*Tecnología solar para la desinfección de aguas en áreas rurales mediante producción fotosensibilizada de ¹O₂*” realizada por el Dr. Francisco Manjón Navarro y dirigida por el Dr. Guillermo Orellana Moraleda y el Dr. David García Fresnadillo del Departamento de Química Orgánica de la Universidad Complutense.

El acto estuvo presidido por la Vicerrectora de Investigación y Política Científica de la UCM, Dra. Carmen Acebal, quién intervino para presentar al Dr. Jaime Lissavetzky, Científico Titular del CSIC y ex-Secretario de Estado para el Deporte, quién pronunció una conferencia bajo el título “*La Química en el Deporte*”.

En el acto también intervinieron la Dra. María Cruz Moreno-Bondí, Secretaria de la Sección Territorial de Madrid de la RSEQ, para dar lectura al acta de la Comisión que selec-



(De izda. a dcha.): Bernardo Herradón, Tesorero de la STM, Juan José Vaquero, Presidente de la STM, Ismael López, Primer Premio a la Mejor Tesis Doctoral 2009-2010 de la STM, y María Cruz Moreno-Bondí, secretaria de la STM.

cionó a las Tesis premiadas, el Dr. Ismael López Duarte para hacer una breve presentación del trabajo premiado, el Dr. Juan José Vaquero López, Presidente de la Sección Territorial de Madrid de la RSEQ, quién felicitó a los premiados, subrayó el interés de los trabajos premiados en los campos de la energía, la salud y el medio ambiente, destacó la calidad de todos los trabajos que concurrieron al premio y mencionó el papel que debe jugar la STM en la promoción de la Química y el apoyo a la excelencia en la investigación. El acto finalizó con unas palabras de felicitación, agradecimiento y despedida del Decano de la Facultad, el Dr. Reyes Jiménez Aparicio.

Remitido por: **Juan José Vaquero**
Presidente de la Sección Territorial de Madrid - RSEQ

II edición del Curso de divulgación “Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad”

Entre el 30 de septiembre de 2010 y el 3 de febrero de 2011 se ha celebrado en Madrid la II edición del curso de divulgación *Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad*. Esta edición del curso ha continuado la pauta de la edición anterior: charlas divulgativas dirigidas a público en general, aunque especialmente con valor didáctico y educativo para los estudiantes y profesores de ESO y bachillerato. Se ha ilustrado convenientemente el papel que la química tiene en nuestra

cómoda vida diaria y también se han presentado ejemplos de algunas área de futuro desarrollo. Se ha discutido la relación de la química con otras disciplinas científicas y se ha mostrado el impacto de la química a lo largo de la historia.

El curso ha estado compuesto por 27 lecciones independientes, lo que ha supuesto un aumento considerable respecto a la primera edición. En este curso, hemos aumentado las lecciones sobre las aportaciones de la química a la ciencia de los materiales

y a la biomedicina. También hemos tratado aspectos nuevos, tales como propiedad industrial, enseñanza, la necesidad de divulgar, y la visión de la ciencia desde los medios de comunicación.

El curso ha contado con un destacado elenco de profesores, algunos de los investigadores más destacados de este país. Los profesores han sido Mercedes Alonso (Vicepresidencia Adjunta de Cultura Científica-CSIC), Ernesto Carmona (Universidad de Sevilla), Sénida Cueto (UNGRÍA Patentes y Marcas), Juan Carlos Flores (Universidad de Alcalá), Bernardo Herradón (IQOG-CSIC), Josefa Isasi (UCM), José Antonio López-Guerrero (UAM), Juan José Lucena (UAM), Enrique Mann (IQOG-CSIC), Nazario Martín (UCM), Carlos Miranda (IQOG-CSIC), Rafael Moliner (ICB-CSIC), Emilio Morán (UCM), Yolanda Pérez (Universidad Rey Juan Carlos), Gabriel Pinto (UPM), Manuel Seara-Valero (Periodista, RNE, Director de "A Hombros de Gigantes"), Miguel Ángel Sierra (UCM), M^a Carmen de la Torre (IQOG-CSIC), Miguel Valcárcel (Universidad de Córdoba), María Vallet-Regí (UCM) y Juan José Vaquero (Universidad de Alcalá). La información del curso y la copia de las lecciones se pueden encontrar en la página web <http://www.losavancesdelaquimica.com/ii-curso-de-divulgacion-los-avances-de-la-quimica-y-su-impacto-en-la-sociedad/>.



El Prof. Herradón en la presentación de la II edición del Curso de divulgación "Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad"

El curso ha sido dirigido por los Dres. Herradón y Miranda (CSIC) y ha contado con la colaboración del CSIC, el Instituto de Química Orgánica General, la Sección Territorial de Madrid de la RSEQ, la Fundación BBVA, el Foro Química y Sociedad y la empresa UNGRÍA Patentes y Marcas. La III edición del curso se celebrará a partir de marzo de 2012.

Remitido por: **Bernardo Herradón**
Instituto de Química Orgánica General, CSIC

Acto Homenaje Profesor Lucas Hernández (Universidad Autónoma de Madrid, 8 de abril de 2011)



El pasado 8 de abril nos reunimos un grupo de amigos, en la Universidad Autónoma de Madrid para realizar un sentido homenaje para recordar a nuestro querido amigo y compañero Lucas Hernández Hernández.

El acto, organizado por el Departamento de Química Analítica y Análisis Instrumental y la Facultad de Ciencias, estuvo presidido por D. José María Sanz,

Rector de la Universidad Autónoma de Madrid y contó con las palabras del Director General de Universidades de la CAM, Jon Juaristi Linacero; la Decana de la Facultad de Ciencias, Isabel Castro Parga; el Director del Departamento de Química Analítica y Análisis Instrumental, Jesús Rodríguez Procopio; y los profesores Santiago Vicente Pérez; Rita Carabias Martínez; Antonio Sánchez Misiego; Juan José Castillo Suárez; Valentín González García y José Manuel Pingarrón Carrazón.

En su intervención Jon Juaristi hizo un recuerdo de toda la trayectoria profesional de Lucas Hernández en distintas universidades, desde sus inicios en la Universidad de Salamanca y Extremadura y sus estancias en la UAM, Universidad del País Vasco y su vuelta final a la UAM, donde desarrolló la mayor parte de su gran labor docente e investigadora.

Jesús Rodríguez Procopio resaltó la labor de Lucas como maestro de muchos químicos analíticos, que iniciaron su trayectoria profesional bajo su dirección, y ahora siguen sus carreras profesionales en distintas universidades y en otros ámbitos. Por su parte, Santiago Vicente recordó los inicios de Lucas como investigador y profesor. También resaltó cómo en aquellos años fue creando su gran pasión por la Química Analítica y por la docencia universitaria a la que dedicó toda su vida.

Todos los participantes resaltaron los valores personales de Lucas por los que se hacía querer por los que le conocieron. Este pensamiento fue el nexo de unión de las palabras que se tomaron después. Rita Carabias nos relató varias de sus vivencias junto a Lucas durante sus estudios en Salamanca y a lo largo de estos años, mientras que Antonio Sánchez Misiego hizo una semblanza de Lucas como amigo que se desvivía por los demás, y que en todo momento estaba dispuesto a ayudar a todos, y lo hacía con un gusto y una intensidad encomiable. Por su parte Juan José Castillo, además de resaltar el gran corazón de Lucas, recordó algunas anécdotas vividas con Lucas en oposiciones y reuniones. En su intervención, Valentín González hizo una especial mención a su colaboración como gestor de proyectos de investigación tanto en la Comunidad de Madrid como en el Ministerio. Lo que Lucas Hernández ha significado para la Química Analítica y en especial en el electroanálisis, fueron los aspectos que glosó en su intervención José Manuel Pingarrón, resaltando aquellos aspectos de su currículo investigador en los que fue pionero en España y que ha dado lugar a una escuela, como son el desarrollo de electrodos modificados.

Finalmente en sus intervenciones, Isabel Castro y José María Sanz, además de resaltar la calidad personal de Lucas y su gran labor docente e investigadora, destacaron su implicación personal en la Universidad participando activamente en todos sus foros.

Al final del homenaje, se inauguraron los nuevos laboratorios de investigación del Departamento que llevarán su nombre.

Remitido por: **Jesús Rodríguez Procopio**
Dpto. de Química Analítica y Análisis Instrumental,
Universidad Autónoma de Madrid

Confirmado el mecanismo de la principal etapa de la visión

La combinación de una alta resolución temporal y una amplia ventana de observación espectral en un solo método ha permitido por primera vez seguir la evolución temporal de la principal etapa fotoquímica en el proceso de visión: la isomerización del cromóforo 11-*cis* retinal hasta su forma *trans* en la proteína rodopsina (*Nature* **2010**, 467, 440–442).

El experimento, diseñado por un grupo internacional de investigadores italianos, alemanes, estadounidenses e ingleses, se inicia con la excitación del cromóforo con un pulso de 10 fs y 500 nm. A continuación, la aplicación de un nuevo pulso retardado en la región del visible (500–720 nm) o de infrarrojo (820–1020 nm) posibilita el seguimiento del proceso de fotoisomerización del cromóforo. El análisis de las señales correspondientes a la emisión estimulada del primer estado electrónico S_1 y de la absorción del estado fundamental S_0 , junto a los resultados procedentes de simulaciones teóricas de trayectorias del cromóforo inmerso en el entorno proteico de rodopsina, revelan que, una vez excitado, el reactivo alcanza en alrededor de 80 fs una intersección cónica o canal que facilita el decaimiento de las moléculas hasta el estado fundamental (Figura 1), empleándose del orden de 200 fs en la formación del producto final.

Estos resultados teóricos, a su vez, arrojan luz acerca de la evolución estructural de este proceso fotoquímico, que sólo involucra cambios geométricos de los átomos centrales del cromóforo debido a la rígida estructura proteica que envuelve al retinal.

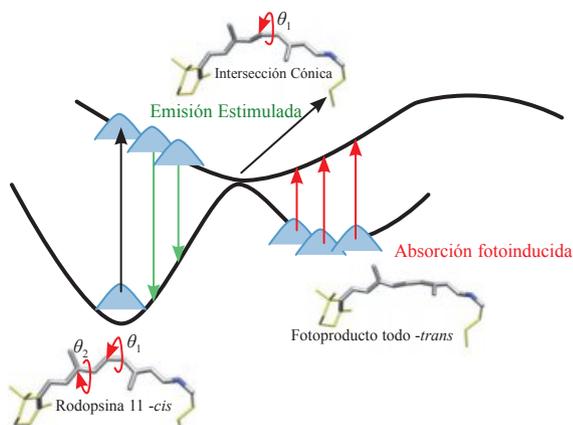


Figura 1. A partir del análisis de las señales de emisión estimulada del S_1 y absorción del S_0 y simulaciones teóricas, un equipo internacional de científicos ha establecido el mecanismo de la etapa fundamental de la visión.

Produciendo H_2 a bajo coste

En un esfuerzo por buscar nuevas fuentes de energía renovables y limpias, científicos estadounidenses de la Universidad de California y el Lawrence Berkeley National Laboratory han presentado un nuevo catalizador, basado en un oxo-complejo de molibdeno, que genera de manera eficiente y económica H_2 a partir de H_2O (*Nature* **2010**, 464, 1329–1333).

Para la síntesis del nuevo catalizador, los autores utilizaron el ligando pentadentado 2,6-bis(1,1-bis(2-piridil)etil)

piridina ($PY5Me_2$) que metalaron con el complejo metálico $MoI_2(CO)_3(MeCN)_2$. Un solo mol del complejo pseudo-octaédrico **1** de la Figura 2 produce $6,1 \cdot 10^5$ moles de H_2 , ya sea a partir de agua tamponada o agua de mar, la fuente más importante de protones en la Tierra.

Este nuevo catalizador supone una excelente alternativa a otros catalizadores tradicionalmente utilizados para la reducción de H_2O a H_2 , entre los que destacan los complejos de platino, al ser más asequible debido a la abundancia natural del molibdeno y no requerir de ácidos o disolventes orgánicos para llevar a cabo su actividad catalítica.

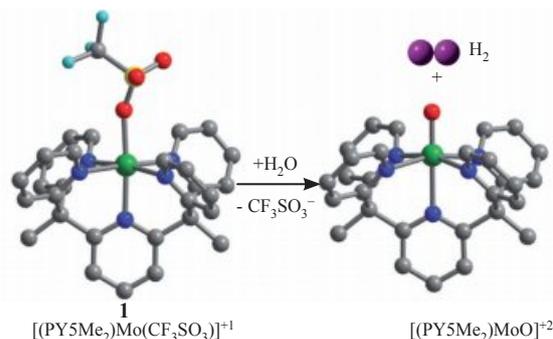


Figura 2. Científicos estadounidenses presentan un nuevo oxo-complejo de molibdeno que cataliza la reducción de H_2O a H_2 de una manera eficiente y a un bajo coste.

SN_2 sobre carbonos terciarios

Científicos de la Universidad de California Davis logran desafiar uno de los principios fundamentales de los textos de química orgánica al observar una reacción de sustitución nucleófila bimolecular SN_2 sobre uno de los alquilo terciarios de la sal de oxonio 1,4,7-trimetiloxatriquinano, (**3**, Figura 3), utilizando iones azida como nucleófilo (*J. Am. Chem. Soc.* **2010**, 132, 10662–10664).

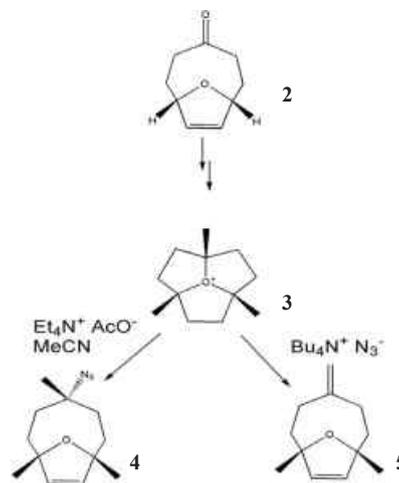


Figura 3. El ion 1,4,7-trimetiloxatriquinano **3**, sintetizado a partir de la hidrogenación y posterior ciclación de la enona bicíclica **2**, experimenta reacciones de sustitución S_N2 al enfrentarse a iones azida como nucleófilos, conduciendo a la obtención del compuesto **5**.

Los autores sintetizan tan especial electrófilo a partir de la hidrogenación y posterior ciclación, mediante sucesivas adiciones de MeMgBr, de la enona bicíclica **2** (Figura 3) y destacan de él su excepcional estabilidad frente a nucleófilos que disociarían otras sales de alquiloxonio. A diferencia de otros compuestos del tipo R_3O^+ , el ion 1,4,7-trimetiloxatriquinano no experimenta solvólisis en reflujo de etanol, y su reacción con nucleófilos como metóxido, cianuro o acetato conduce al producto de eliminación **4**, descartando que **3** pueda estar involucrado en mecanismos de reacción unimoleculares, aún presentando como centros de ataque carbonos terciarios.

Los autores confirman esta hipótesis a partir de un estudio cinético de la reacción, que revela la sustitución de **3** por los iones azida como un mecanismo de segundo orden.

La temperatura de la superficie juega un papel fundamental en la reflexión de H_2

Un grupo de científicos de España, los Países Bajos, Noruega, y Estados Unidos, entre los que figura la Dra. Cristina Díaz de la Universidad Autónoma de Madrid, ha mostrado en un artículo recientemente publicado en *Proceedings of the National Academy of Science (Proc. Natl. Acad. Sci.* **2010**, *107*, 20881–20886), el papel fundamental que la temperatura de la superficie juega en procesos de catálisis, en contraposición al papel secundario de esta misma en otros procesos que también transcurren sobre superficies.

Determinar los mecanismos que subyacen a las reacciones entre moléculas en fase gas y superficies metálicas tiene una tremenda importancia práctica, ya que la producción de la mayoría de los compuestos sintéticos involucra, en mayor o menor medida, tales reacciones. Recientes avances han permitido dar importantes pasos hacia un entendimiento cuantitativo de cómo las moléculas interactúan con las superficies. Ahora, este equipo de científicos ha mostrado, usando métodos basados en las aproximaciones de Born-Oppenheimer y de superficie estática que describen con precisión química la disociación de H_2 en superficies metálicas, la necesidad de modelar el efecto de los grados de libertad de la superficie, es decir, el movimiento de sus

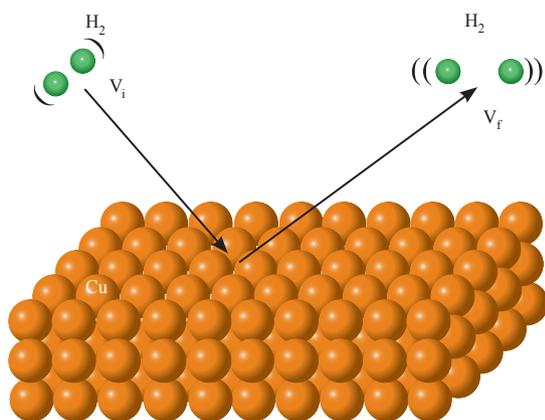


Figura 4. La temperatura de la superficie puede influir en el estado final de las moléculas sometidas a un proceso de reflexión molecular, pero no en el proceso complementario, la disociación molecular.

átomos, para describir la excitación vibracional del H_2 reflejado por la misma superficie con un nivel de precisión similar (Figura 4).

Ácido carbónico secuestrado

A pesar de su escurridizo carácter, ya que tiende a descomponer fácilmente en CO_2 y agua en condiciones ambientales, un equipo internacional de científicos entre los que se incluye el Dr. Óscar Gálvez del Consejo Superior de Investigaciones Científicas de Madrid ha conseguido aislar y caracterizar espectroscópicamente ácido carbónico en estado gaseoso, utilizando una matriz sólida de argón o neón a 6 K (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 1939–1943).

De los tres posibles conformeros moleculares: *cis-cis*, *cis-trans*, y *trans-trans*, que la teoría predice como estables, el análisis del espectro de IR de la matriz revela únicamente la existencia de las dos primeras especies ya que la tercera, *trans-trans*, es del orden de 40 kJ/mol más inestable que las anteriores, según cálculos *ab initio*. Además de estos dos monómeros, este análisis también indica la presencia en la matriz del dímero cíclico, estabilizado por dos enlaces de hidrógeno, en la misma proporción que el monómero *cis-trans*, pero significativamente menos abundante que el monómero más estable *cis-cis* (Figura 5).

El equipo confirma estos resultados a partir del espectro de la muestra tras el calentamiento de la matriz a temperaturas superiores a 180 K, a las que se produce la desorción del gas noble. El nuevo espectro, que atribuyen al del ácido carbónico cristalino, representa una prueba inequívoca del aislamiento de ácido carbónico gaseoso en la matriz.

Los resultados de este estudio podrían resultar de gran utilidad como referencia para la identificación de ácido carbónico gaseoso en las atmósferas de planetas, como Marte o Venus, o en las comas de cometas, donde podría formarse a partir de la reacción fotoquímica entre CO_2 y H_2O y posterior sublimación a temperaturas superiores a 200 K, a las que dicha molécula es estable.

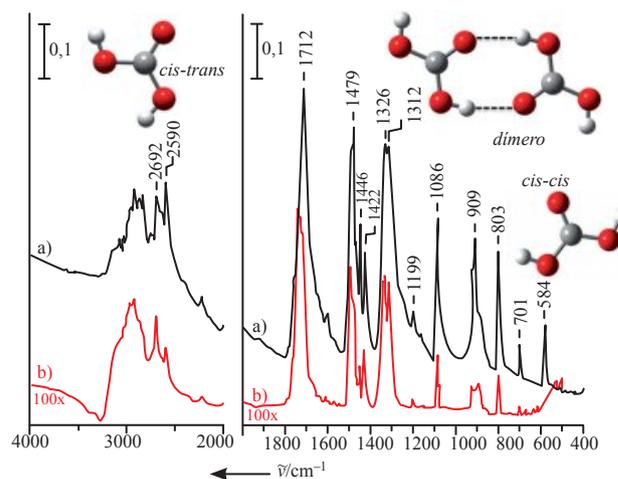


Figura 5. Científicos austriacos y españoles logran aislar y caracterizar espectroscópicamente ácido carbónico en estado gaseoso inmerso en una matriz de gas noble.

Intercambio de espín fotoinducido

La biestabilidad magnética, propia de materiales ferromagnéticos magnetizados o de complejos de metales de transición susceptibles de sufrir transiciones de espín, es un fenómeno colectivo en el que participan un gran número de momentos de espín y que requiere de temperaturas bajas, especialmente si el número de moléculas o átomos que interaccionan es pequeño. Investigadores del instituto Otto-Diels de Química Orgánica de la Universidad de Kiel en Alemania han conseguido desafiar estas dos premisas induciendo una transición de espín a temperatura ambiente sobre un complejo de níquel (II) en disolución (*Science* **2011**, 331, 445–448).

Aprovechando el cambio de espín que experimenta dicho metal en función de su coordinación y las propiedades fotofísicas de la fenilazopiridina (FAP), los autores han diseñado el primer interruptor magnético, capaz de alternar entre un estado de multiplicidad singlete (Figura 6, izquierda) y otro triplete (Figura 6, derecha), utilizando luz UV. Concretamente, la irradiación del complejo produce una isomerización *trans-cis* de la FAP, pasando a ocupar la piridina la posición axial en el complejo *cis*. Dicha isomerización se traduce espectroscópicamente en un desplazamiento a campo más bajo y en un ensanchamiento de las señales de RMN de los protones más cercanos al centro de Ni.

Los autores apuntan la utilización de estos interruptores magnéticos como agentes de contraste en el campo de la resonancia magnética de imagen, para la que han registrado diferencias de contraste del 43%.

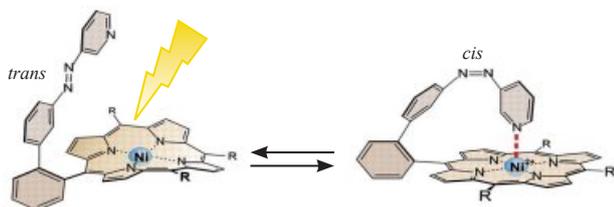


Figura 6. A partir de una porfirina de Ni funcionalizada con un sustituyente de fenilazopiridina, investigadores de la Universidad de Kiel diseñan un interruptor magnético que alterna entre estados de multiplicidad singlete y triplete.

¿Paladio u Oro?

Un reciente trabajo de investigadores españoles de la Universidad Politécnica de Valencia y los Institutos de Química Orgánica y Ciencia de Materiales del CSIC ha reabierto el debate acerca del papel que juega el Au en la catálisis del acoplamiento de Sonogashira (*Chem. Commun.* **2011**, 47, 1446–1448).

El origen de dicho debate se remonta a las aparentemente contradictorias conclusiones extraídas para la reacción de acoplamiento entre fenilacetileno y iodobenceno en presencia de dos catalizadores distintos: nanopartículas de oro metálico sobre cerio nanocristalino, Au/CeO₂, (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, 46, 1536–1538) y un catalizador homogéneo de oro (I) y bis(difenilfosfino)etano, AuI/dppe, (*Org. Lett.* **2010**, 12, 3006–3009). Así, mientras el primer

trabajo concluye que son las nanopartículas de oro las que catalizan el acoplamiento, el más reciente atribuye, sin embargo, la actividad catalítica a las impurezas de paladio presentes en el catalizador de oro, en base a la imposibilidad de llevar a cabo la reacción utilizando el catalizador homogéneo AuI/dppe.

Meses más tarde, nuevos experimentos cinéticos y resultados de cálculos teóricos han permitido arrojar luz sobre el mecanismo que subyace a esta reacción. A partir de cálculos basados en la teoría del funcional de la densidad, los autores predicen que la reacción de rotura oxidativa del iodobenceno, a partir de un complejo de Au(I), es endotérmica y posee una energía de activación de 31,6 kcal/mol (Figura 7). La modelización, por el contrario, de la disociación de iodobenceno sobre una partícula de 1 nm de diámetro predice esta reacción como exotérmica, con una energía de activación 3 veces menor. Asimismo, los perfiles de energía potencial calculados están de acuerdo con el estudio cinético, que atribuye el 90% de la velocidad de reacción a las nanopartículas de oro.

Estos nuevos resultados teóricos ponen de manifiesto que la naturaleza de las especies de oro utilizadas es la que determina, en último término, su comportamiento catalítico en este tipo de reacciones.

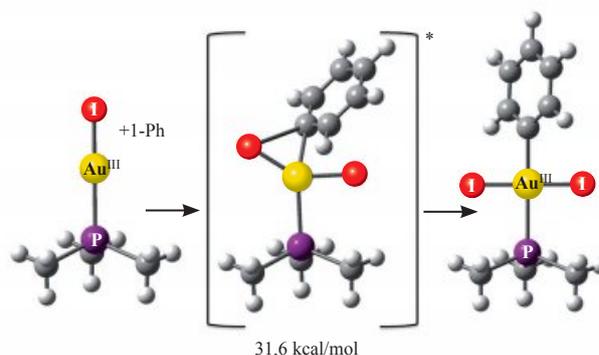


Figura 7. Combinando estudios cinéticos y cálculos teóricos, científicos españoles clarifican el mecanismo que subyace al acoplamiento de Sonogashira entre fenilacetileno y haluros arílicos, catalizado por oro.

Hydrogenación asimétrica a través de nanotubos de carbono

Inspirándose en la estrategia utilizada por otros autores, que consiste en modificar la superficie de metales activos mediante la adsorción de moléculas quirales para el desarrollo de nuevos catalizadores heterogéneos, científicos del Instituto Dalian de Química Física perteneciente a la Academia China de las Ciencias han diseñado un nuevo nanocatalizador de Pt, encapsulado en nanotubos de carbono, muy eficiente y altamente enantioselectivo en la hidrogenación de α -cetoésteres, mediante modificación quiral (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, 50, 4913–4917).

Para la síntesis de los nanocatalizadores, los autores parten de nanotubos de extremos abiertos sobre los que depositan, ya sea sobre su cara interna o externa, Pt de 5% en peso, dando lugar a dos tipos de nanoreactores: Pt/NTC(in)

y Pt/NTC(out), (Figura 8). Para ambos catalizadores, pero especialmente en el caso del Pt/NTC(in), los autores observan una muy elevada actividad (10^5 ciclos catalíticos por hora), situada entre las más altas registradas para hidrogenaciones asimétricas heterogéneas. Además de esta elevada actividad, cabe también resaltar la enantioselectividad de este proceso, que para determinados sustratos alcanza hasta el 96%, y que los autores atribuyen a la capacidad de ambos nanoreactores para acumular partículas de sustrato y de modificador quiral, en este caso el alcaloide cinchonidina.

A pesar de que el mecanismo para la catálisis asimétrica sobre superficies modificadas quiralmente no ha sido completamente esclarecido, es muy probable que la función del modificador quiral sea doble: por un lado la de inducir la enantioselectividad y por otro la de acelerar la velocidad de la catálisis por Pt.

De acuerdo con los autores, este trabajo supone el inicio de una nueva generación de catalizadores heterogéneos y quirales altamente eficientes y enantioselectivos para su utilización en la industria.

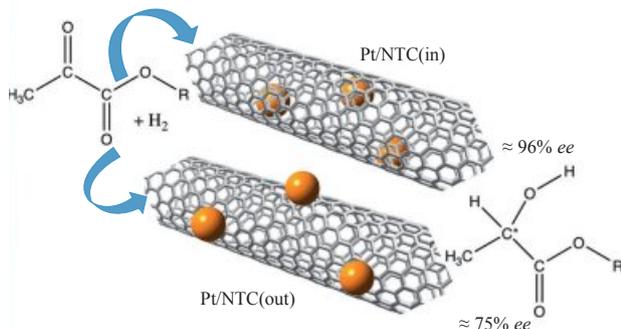


Figura 8. Científicos chinos diseñan un original nanoreactor, altamente eficiente para reacciones de hidrogenación asimétrica, utilizando partículas de platino modificadas quiralmente y encapsuladas en nanotubos de carbono.

Colocación, irradiación, reacción

Científicos estadounidenses de las Universidades de California, Pensilvania y Washington dan un paso más hacia el control de la regioselectividad de reacciones orgánicas diseñando un original experimento que permite obtener productos procedentes de reacciones fotoquímicamente permitidas, pero altamente improbables en disolución debido a lo poco favorable de sus geometrías de reacción (*Science* **2011**, *331*, 1312–1315).

En disolución, la irradiación de 9-feniletinilantraceno (FEA) con luz UV conduce a la reacción Diels-Alder [4+2], correspondiente a la orientación más favorable entre uno de los fragmentos etínicos y el anillo central de una segunda molécula de antraceno. Beneficiándose de los defectos en matrices de monocapas autoensambladas de *n*-dodecanotiولات sobre superficies de oro, los autores del trabajo consiguen atrapar moléculas de FEA con la orientación adecuada, manteniendo los anillos de antraceno paralelos lo que permite maximizar las fuerzas de apilamiento para a continuación inducir la cicloadición [4+4], una vez iluminada la superficie con luz UV (Figura 9). El seguimiento de la reacción de

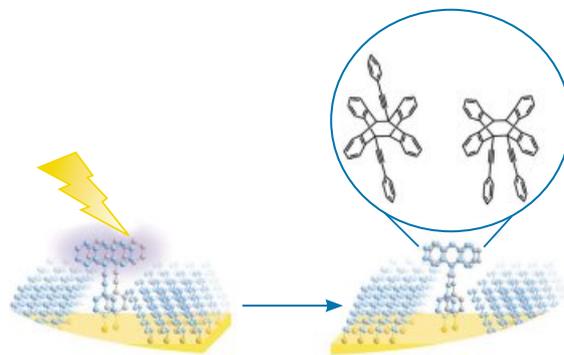


Figura 9. La localización de moléculas de feniletinilantraceno en los defectos de matrices de monocapas autoensambladas de *n*-dodecanotiولات es clave para conseguir el producto fotoquímico [4+4], poco favorecido en reacciones que transcurren en disolución.

dimerización se lleva a cabo mediante microscopía de efecto túnel, técnica a través de la cual registran cambios estocásticos o modificaciones en la altura de las moléculas, así como aumentos y disminuciones en la conductancia, como consecuencia de la excitación de las moléculas o de las reacciones fotoquímicas, respectivamente.

Los autores señalan el control sobre el entorno químico y la correcta selección de técnicas para el seguimiento de estas reacciones como puntos a optimizar para el desarrollo de esta estrategia.

Primer imido-complejo de níquel de baja coordinación

A partir de la eliminación de N_2 en la reacción entre la azida arílica estéricamente impedida, $N_3(2,6\text{-dimesitilfenil})$, y el complejo de níquel $(IPr^*)Ni(\eta^6\text{-}C_7H_8)$, donde $IPr^* = 1,3\text{-bis}(2,6\text{-bis}(\text{difenilmetil})\text{-4-metilfenil})\text{imidazol-2-ilideno}$, un equipo de investigadores estadounidenses ha preparado y caracterizado el primer imido complejo de níquel de baja coordinación (*J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 771–773).

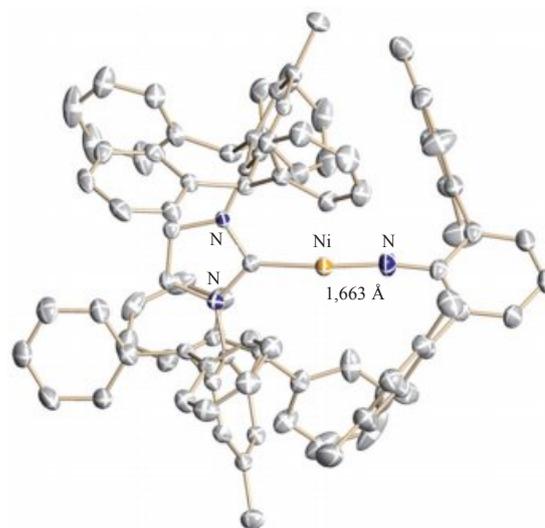


Figura 10. La utilización de un ligando imidazol muy voluminoso favorece la preparación de complejos de metales de transición de baja coordinación.

Análisis de rayos X realizados sobre dicho complejo confirman la dicoordinación del centro metálico a los ligandos IPr^* y $(2,6\text{-dimesitilfenil})\text{N}^{2-}$, así como una disposición lineal de los enlaces C-Ni-N y una distancia muy corta Ni-N de 1,663 Å, (Figura 10), ambos indicativos de un enlace múltiple entre el centro metálico y el nitrógeno. Los autores confirman la naturaleza múltiple de este enlace metálico a partir de cálculos de la teoría del funcional de la densidad que atribuyen a los dos orbitales semiocupados SOMO, prácticamente degenerados, un carácter $\text{Ni}(\pi d)\text{-N}(\pi p)$.

La baja coordinación de este complejo de Ni(II) se traduce en una intensa reactividad respecto a sus análogos de mayor coordinación. En este sentido, los autores observan el rápido intercambio del ligando imido o la inserción C-H y formación de la vinilamina, $(2,6\text{-dimesitilfenil})\text{NH}(\text{CH}=\text{CH}_2)$, al exponer el complejo de níquel a 1 atm. de CO o eteno.

Jaulas para fullerenos

Con el fin último de crear sistemas artificiales anfitrión-huésped, capaces de incorporar, aislar y liberar sustratos de manera flexible imitando encapsulantes biológicos naturales, científicos del Departamento de Química de la Universidad de Cambridge han diseñado y sintetizado una jaula supramolecular metálica capaz de secuestrar selectivamente sistemas huésped de naturaleza aromática de gran tamaño (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 3479–3483).

La jaula, sintetizada a partir de tetraquis(4-aminofenil)porfirina, 2-formilpiridina, y trifluorometanosulfonato de Fe (II), consta de 8 átomos de hierro y 6 ligandos porfirínicos que ocupan los vértices y caras de un cubo, respectivamente. Este diseño confiere a la jaula un volumen ($> 1300 \text{ \AA}^3$) lo bastante grande y unos poros lo suficientemente pequeños ($< 1 \text{ \AA}$ de radio) como para albergar cualquier huésped de interés, aislándolo al mismo tiempo del entorno.

Estudios preliminares, realizados utilizando como sustrato los compuestos aromáticos: coroneno, C_{60} y C_{70} , revelan la formación de complejos anfitrión-huésped en las proporciones 1:3, 1:1 y 1:1, respectivamente. Estos análisis también ponen de manifiesto la mayor afinidad del receptor por el sustrato de C_{70} en comparación con el C_{60} , lo que

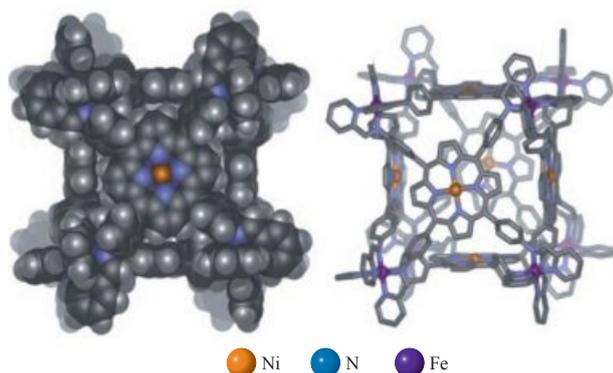


Figura 11. Tomando como referencia sistemas anfitrión-huésped naturales, científicos británicos han diseñado y sintetizado un receptor que permite secuestrar y liberar selectivamente moléculas aromáticas de gran tamaño.

los autores atribuyen a la maximización de las interacciones estabilizantes $\pi\text{-}\pi$ debido a la forma más alejada de una esfera del primero. Para la liberación de los huéspedes los autores recomiendan la utilización de ácidos o tris (2-aminoetil)-amina.

Teniendo en cuenta que las moléculas receptoras son quirales, los esfuerzos de los autores se encaminan en estos momentos hacia el desarrollo de estrategias para la discriminación enantiomérica de huéspedes.

La reactividad de un nitruro de Fe(V) arroja pistas sobre el mecanismo industrial y enzimático de producción de NH_3

Estudios recientes han sugerido que algunos complejos de hierro, en los que este metal presenta altos estados de oxidación, podrían jugar un papel clave en los ciclos de algunos biocatalizadores. En esta línea, un equipo internacional de investigadores alemanes y estadounidenses ha preparado, caracterizado y realizado estudios de reactividad sobre el nitruro de Fe(V), $[\text{PhB}(\text{Bulm})_3 \text{Fe}\equiv\text{N}]^+$, donde $\text{PhB}(\text{Bulm})_3 = \text{feniltris}(3\text{-terc-butimidazol-2-ilideno})$, permitiendo establecer el papel que los nitruros de hierro juegan en la síntesis industrial y enzimática de amoníaco (*Science* **2011**, *331*, 1049–1052).

Para su síntesis, los autores parten de un precursor análogo al complejo de interés pero de Fe(IV) que oxidan utilizando $[\text{Fe}(\text{Cp})_2]\text{BARF}_{24}$ ($\text{Cp}^- = \eta^5\text{-C}_5\text{H}_5^-$; $\text{BARF}_{24} = \text{B}(3,5\text{-}(\text{CF}_3)_2\text{C}_6\text{H}_3)_4^-$). De acuerdo con cálculos basados en la teoría del funcional de la densidad, estudios Mössbauer y de rayos X caracterizan el complejo como un doblete y proponen una geometría pseudotetraédrica alrededor del centro metálico, donde el ligando nitruro ocuparía el bolsillo hidrofóbico creado por los grupos *terc*-butilo del ligando tris(imidazol-2-ilideno)borato (Figura 12).

Los autores observan cantidades significativas de NH_3 (rendimiento 89%) al hacer reaccionar el complejo con 3 equivalentes de cobaltoceno y 15 equivalentes de agua. Aunque por el momento no se conoce en detalle el mecanismo que subyace a esta reacción, los autores descartan que transcurra a través de la protonación del ligando nitruro una vez reducido el centro metálico a Fe(IV), ya que es conocido que este último no reacciona con agua.

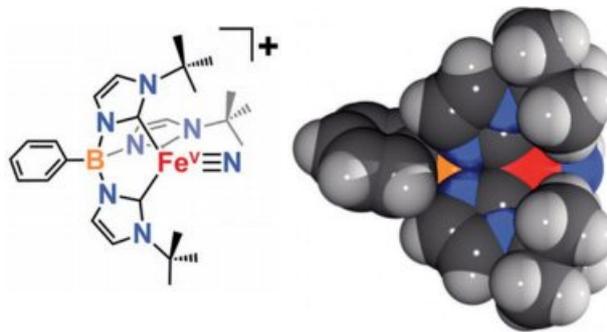


Figura 12. En condiciones reductoras y a baja temperatura, la hidrólisis del nitruro de Fe(V), $[\text{PhB}(\text{Bulm})_3 \text{Fe}\equiv\text{N}]^+$, conduce a la formación de NH_3 .