

Noticias de la RSEQ

Eugenio Coronado Miralles, Premio Nacional de Investigación 2009 Enrique Moles en Ciencia y Tecnología Químicas

El jurado de los premios nacionales de investigación anunció, el pasado mes de octubre de 2009, su fallo en el que otorgaba al Dr. D. Eugenio Coronado Miralles el Premio Nacional de Investigación Enrique Moles en el área de Ciencia y Tecnología Químicas por "la relevancia e impacto en la comunidad científica de sus resultados de investigación y su excelencia en el campo del Magnetismo Molecular". Estos premios nacionales, creados por el Ministerio de Educación y Ciencia en 2001, se conceden cada dos años y su importancia y prestigio se demuestran por los investigadores premiados en ediciones anteriores: los doctores José Barluenga Mur (2001), Manuel Rico Sarompas (2003), Miguel Valcárcel Cases (2005) y Luis A. Oro Giral (2007). Este premio, además del reconocimiento a su labor de investigación iniciada hace casi 30 años, supone el broche de oro al "*annus magnificus*" del Prof. Coronado, que comenzó con la concesión, el pasado mes de abril, por parte de la Generalitat Valenciana, del premio al mejor proyecto europeo (red europea de excelencia MAGMANet, cuyo nodo en Valencia coordina el Prof. Coronado), continuó con su nombramiento como miembro de la Academia Europea el pasado mes de mayo, con la concesión de la Medalla de Oro de la Real Sociedad Española de Química el mismo mes de mayo, con la concesión de la "2009 RSC/RSEQ Lectureship en Ciencias Químicas" el pasado mes de julio y con la concesión de una *Advanced Grant del European Research Council* el pasado mes de octubre. Este merecido premio nacional de investigación cierra el año de su 50 cumpleaños y confirma la idea de Aristóteles de que "la grandeza no consiste en recibir honores, sino en merecerlos". Nacido en Valencia en 1959, dirige el grupo de investigación en materiales moleculares de la Universidad de Valencia (UIMM) desde su creación en 1989 y, es catedrático de Química Inorgánica de la Universidad de Valencia desde 1993 (con tan sólo 34 años). Es uno de los impulsores de la creación del Instituto de Ciencia Molecular de la Universidad de Valencia (ICMol) y director del mismo desde su creación en noviembre de 2000. Asimismo, es director del Master interuniversitario en Nanociencia y Nanotecnología Molecular desde su implantación en el curso 2007/08 y es el director científico del Instituto Europeo de Magnetismo Molecular desde su creación en 2008.

En 1985 se doctoró en Ciencias Químicas por la Universidad de Valencia, con una tesis dirigida por Daniel Beltrán Porter, y en 1990 en Ciencias Físicas por la Universidad L. Pasteur de Estrasburgo, con una tesis dirigida por Marc Drillon. Entre sus líneas de investigación actuales destaca la nanociencia molecular así como el diseño, preparación y caracterización de materiales moleculares de interés en magnetismo, electrónica y spintrónica. Ha publicado casi 400 artículos en las revistas de investigación internacionales de mayor prestigio como *Nature* o *Nature Nanotechnology* y es editor de dos libros y de seis volúmenes temáticos en revistas como *Inorganic Chemistry* o *Journal of Materials Chemistry*, además de autor de más de una treintena de capítulos en libros de investigación. Sus trabajos han

sido referenciados en casi 5.000 ocasiones por otros autores, lo que le ha convertido en uno de los químicos españoles con mayor impacto en las áreas de química y de ciencia de materiales (con un índice *h* de 47).

Eugenio es uno de los químicos españoles de mayor prestigio y proyección internacional, y buena prueba de ello es que ha sido invitado a impartir conferencias en más de un centenar de congresos nacionales e internacionales (él mismo ya ha perdido la cuenta). Ha sido el impulsor principal de las Escuelas Nacionales de Materiales Moleculares (de la que el pasado mes de febrero se ha celebrado la undécima edición). Estas reuniones se han organizado en distintas ciudades españolas con carácter bianual desde 1992 y anual desde 2008. También ha sido el organizador de varios congresos internacionales de reconocido prestigio como las conferencias NATO-ASI "*Localized and Itinerant Molecular Magnetism*" en 1995 y "*Polyoxometalate Molecular Science*" en 2001, ambas en las Islas Canarias, la "*International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM)*" en 2002 y el "*International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets (ISCOM)*" en 2007. En el 2012 organizará, por primera vez en España, la "*International Conference on Coordination Chemistry*", que es el congreso internacional más importante en Química de Coordinación. Forma parte de diversos comités editoriales de revistas internacionales así como de los comités consultivos de los congresos internacionales más importantes en el campo de los materiales moleculares.

Además de los premios y distinciones recibidos en 2009, ha recibido, entre otros galardones, el Premio Nacional de Investigación Científico-Técnica Rey Juan Carlos I (1997) y el Premio Rey Jaime I de Nuevas Tecnologías (2003). A nivel internacional ha estado distinguido con la cátedra Van Arkel por la Universidad de Leiden (2003) y desde 2004 es *Fellow* de la *Royal Society of Chemistry*. Además de la Universidad de Leiden, también ha realizado tareas docentes e investigadoras como profesor invitado en las Universidades de Versalles (Francia), Utah (EE UU), el *Tokyo Institute of Technology* (Japón), la *North East Normal University* (China) y la Universidad de Chile.

En la actualidad coordina el proyecto CONSOLIDER-INGENIO 2010 en Nanociencia Molecular y ha sido investigador principal de más de medio centenar de proyectos de investigación europeos, nacionales y regionales, así como de incontables proyectos de infraestructuras que han permitido dotar al ICMol de un valioso instrumental científico para la caracterización de materiales moleculares.

Desde sus inicios, la labor investigadora del profesor Coronado se ha centrado en la búsqueda y estudio de nuevos materiales magnéticos moleculares. En este campo una de sus aportaciones más importantes es el descubrimiento, en los años 80, de un nuevo tipo de materiales magnéticos de baja dimensionalidad: las cadenas ferrimagnéticas, consideradas por algunos autores como el mayor avance de la magnetoquímica y de los materiales magnéticos moleculares en la

década de los 80. En la década de los 90 el Prof. Coronado se centró en el diseño, síntesis y estudio de materiales moleculares multifuncionales y situó su grupo de investigación en una posición de vanguardia a nivel internacional. En este área sus principales logros son el descubrimiento de los primeros materiales moleculares híbridos conductores y magnéticos donde coexisten electrones deslocalizados en la parte orgánica con momentos magnéticos localizados en la inorgánica. Estos trabajos culminaron con el descubrimiento del primer material molecular donde coexisten dos propiedades de alto interés tecnológico como el ferromagnetismo y la conductividad metálica y que fue calificado como "material híbrido que abre una nueva frontera en la electrónica molecular" o como de "sueño hecho realidad".

Sin duda, todos estos logros (y los que están por venir, porque Eugenio tiene cuerda para rato) son fruto de su optimismo, su amplísima y multidisciplinaria visión de la química y su capacidad de liderazgo científico (que inició antes de cumplir los 30 años y que en la actualidad le ha llevado a dirigir un grupo de investigación con tres docenas de investigadores y en el que se han formado varias decenas de doctores). Si además fuera ordenado (la foto de su mesa debería estar en cualquier diccionario ilustrado junto a la palabra "entropía"), Eugenio sería un genio.



El Prof. Coronado en su despacho en el Instituto de Ciencia Molecular en Valencia.

El Comité Editorial de *Anales de Química* felicita al Prof. Eugenio Coronado y se congratula de la concesión del Premio Nacional de Investigación 2009 Enrique Moles en Ciencia y Tecnología Químicas.

Remitido por: **Carlos J. Gómez García**
 Universidad de Valencia
 Instituto de Ciencia Molecular

7ª edición del Día de la Química: "La necesidad y la importancia de hacerse oír"

El pasado 16 de noviembre de 2009, el sector químico habló en Burgos con una sola voz; representantes del ámbito académico, científico, empresarial y profesional otorgaron reconocimiento público a profesionales destacados y asimismo, instaron a la divulgación del trabajo y las actuaciones de los químicos. Hubo también un lugar para el recuerdo de aquéllos que más influyeron e influyen en el devenir de la profesión en nuestro país.

Este año el Día de la Química incorporaba como novedad la entrega, además del Premio ANQUE a la Divulgación y Promoción de la Química, de la Medalla de Oro de la Real Sociedad Española de Química y del Premio FEIQUE de Investigación, de dos Premios SUSCHEM Jóvenes Investigadores Químicos: el Premio Divulga a la mejor publicación en medios de comunicación, y el Premio Futura al mejor expediente académico de la licenciatura en química o cualquier otra titulación relacionada con la ciencia y la tecnología químicas.

La contribución de la química al desarrollo sigue siendo poco conocida, como poco conocida es la labor profesional de los químicos en todos los ámbitos; por ello, todas las entidades participantes en el Día de la Química instaron a cambiar la situación mediante una continuada labor de difusión y de promoción. Acercar la Química a la Sociedad es precisamente la razón de ser del Foro Permanente Química y Sociedad, entidad organizadora del Día de la Química. Su presidente José Elguero, repasó en la Presentación del Acto las principales actuaciones del Foro en el año con especial hincapié en el portal "químicasysociedad.org", la principal herramienta de difusión del Foro y que se ha convertido ya por, derecho propio, en el principal enlace entre la Química y la Sociedad.

Lorenzo Baselga, Secretario General Técnico del Consejo General de Colegios de Químicos de España, instó a humanizar el rostro de la química mediante la comunicación

directa y frecuente con el público, y a divulgar conocimientos y temas en un lenguaje comprensible alejado del formalismo académico, en su introducción a la entrega del **Premio Divulga** de los Premios SUSCHEM 2009 Jóvenes Investigadores Químicos. El galardón ha recaído en ésta su primera edición en Alberto Fernández Tejada, Doctor en Química por la Universidad de La Rioja, por el artículo "Diseño y Síntesis de coadyuvantes basados en glicoconjugados para la preparación de vacunas contra el cáncer", que han publicado diversos medios de comunicación no especializados.

Por otro lado, el **Premio FUTURA** de los Premios SUSCHEM Jóvenes Investigadores Químicos, que recompensa el esfuerzo y la excelencia en un entorno social poco propicio a impulsar ambos principios, ha recaído en Rodrigo Casanovas Perera, licenciado en Química por la Universitat de les Illes Balears, que adquirió su Licenciatura con una calificación media de 9,52 puntos, obteniendo Matrículas de Honor en más del 70 % de las asignaturas cursadas.

El **Premio ANQUE 2009** al Reconocimiento Corporativo o Profesional se ha otorgado a José Lladó Fernández-Urrutia, cuya trayectoria es sobradamente conocida. Doctor en Ciencias Químicas y Química Industrial con Premio Extraordinario y miembro de honor del *American Institute of Chemists*, José Lladó ha sido presidente del Consejo Superior de Investigaciones Científicas, de la Comisión Nacional de Investigación Tecnológica, y decano presidente del Consejo General de Químicos de España. Ha sido asimismo Ministro de Comercio, y Ministro de Transporte y Comunicaciones en los primeros gobiernos de la democracia española y posteriormente, Embajador de España en Washington. En la actualidad preside la ingeniería española Técnicas Reunidas, y es asimismo consejero en diversas compañías e instituciones.

Durante la celebración del Día de la Química, también se hizo entrega a Eugenio Coronado Miralles, Catedrático de



Algunos de los participantes en la 7ª edición del Día de la Química y, momento en el que el Presidente de la RSEQ, Nazario Martín, hace entrega al Prof. Eugenio Coronado de la Medalla de Oro de la RSEQ y el Premio de Investigación de FEIQUE.

Química Inorgánica en la Universidad de Valencia y Director del Instituto de Ciencia Molecular de esta Universidad, de la **Medalla de Oro de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ)** y el **Premio de Investigación de la Federación Empresarial de la industria Química Española (FEIQUE)** por su carrera investigadora, centrada especialmente en el campo del magnetismo molecular y que ha sido merecedora de varias distinciones (véase *An. Quím.* **2009**, *105*, 151–152 e inicio de esta sección). La Medalla de Oro es el máximo

galardón que otorga la RSEQ. El Premio FEIQUE de Investigación por su parte, está dotado con 10.000 euros.

Un vino español, en el elegante Salón Rojo del Teatro Principal de Burgos en el que se celebró el acto, puso punto y final a este vibrante encuentro plagado de magníficas intervenciones de profesionales de los diferentes sectores de la Química.

Remitido por: **Concepció Roca**
Foro Permanente Química y Sociedad

Amador Menéndez Velázquez, Premio Europeo de Divulgación Científica 2009

El pasado día 13 de noviembre de 2009, tuvo lugar en Valencia el acto de entrega del Premio Europeo de Divulgación Científica en su decimoquinta edición. El Premio, que está dotado con 18.000 euros y una estatuilla del reconocido artista valenciano Manuel Boix, fue otorgado al químico Amador Menéndez Velázquez (Oviedo, 1969) y socio de la Sección Territorial de Asturias de la RSEQ. La finalidad del Premio, convocado anualmente, es estimular la creación y la difusión de obras que, con un lenguaje sencillo, pongan al alcance del público general, y de los estudiantes preuniversitarios en particular, los avances científicos y tecnológicos, así como la divulgación de aspectos sugestivos de las diversas ramas del saber.

Amador Menéndez Velázquez, Doctor en Química por la Universidad de Oviedo, es investigador del Instituto Tecnológico de Materiales de Asturias (Fundación ITMA) y del Centro de Investigación en Nanomateriales y Nanotecnología (CINN). En la actualidad, desarrolla en el Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT) un proyecto que intenta capturar la radiación infrarroja del Sol y de la Tierra para aumentar la eficiencia de las celdas fotovoltaicas. Sus líneas de investigación se dirigen hacia la Nanotecnología, la Energía Solar Fotovoltaica, la difracción de Rayos-X, la Inteligencia Artificial, la Teoría de la Información y la Química Medicinal.

El científico asturiano ha sido galardonado por su obra "Una revolución en miniatura. Nanotecnología y disciplinas convergentes". La obra ganadora será coeditada por la Universidad de Valencia y Ediciones Bromera dentro de la colección "Ciencia sin fronteras", que promoverán la traducción a diferentes lenguas. En el libro se expone el potencial de la Nanotecnología a la hora de fabricar nuevos materiales y dispositivos, con propiedades controladas y para fines específicos.

El Dr. Menéndez Velázquez es además autor del sistema experto MOLFINDER, sistema que, utilizando técnicas de Inteligencia Artificial, permite visualizar el enlace químico y los mundos atómico y molecular a partir de datos de difrac-

ción de rayos-X. Entre sus trabajos más recientes, destacan la cuantificación de la cantidad de información susceptible de ser almacenada en átomos y moléculas, con numerosas aplicaciones en Nanoelectrónica. Miembro del Jurado del Premio Príncipe de Asturias de Investigación Científica y Técnica, ha recibido el Premio de Investigación Científica y Desarrollo Tecnológico del Colegio Oficial de Químicos de Asturias (2005) y el Primer Premio de la Fundación Universidad de Asturias (FUO) de Investigación Aplicada (2009). Especialmente sensibilizado con la divulgación de la Ciencia, ha logrado una distinción de la comisión de divulgación de la Real Sociedad Matemática Española por su relato "Las medidas del mundo". Durante años ejerció como profesor de secundaria, creando y coordinando numerosas actividades de divulgación de la Ciencia y la Tecnología, como el programa "Encuentros en la Red", Premio Nacional a la mejor iniciativa educativa por el aprovechamiento de Internet en el aula y Premio de la Sociedad de la Información del Gobierno del Principado de Asturias, o más recientemente la denominada "Vuelta Científica a Asturias", en colaboración con el Principado de Asturias, CSIC y Universidad de Oviedo.



Amador Menéndez Velázquez con la estatuilla del XV Premio Europeo de Divulgación Científica 2009.

Remitido por: **Pascual Román Polo**
Departamento de Química Inorgánica
Universidad del País Vasco

Joaquín Plumet investido Doctor Honoris Causa por el Instituto Nacional Politécnico de Toulouse (INP-Toulouse, Francia)

El Prof. Joaquín Plumet, Catedrático de Química Orgánica de la Universidad Complutense de Madrid (UCM), fue investido *Doctor Honoris Causa* por el Instituto Nacional Politécnico de Toulouse (INP-Toulouse, Francia) el pasado 11 de enero. El Consejo Científico de dicha Institución acordó otorgar el doctorado honorífico al Prof. Plumet en atención a sus méritos científicos y a su estrecha colaboración académica con el INP, hecho que fue destacado en la ceremonia de investidura, celebrada en el salón de actos de dicha Universidad.

El Prof. Plumet viene colaborando desde hace más de veinte años con el Departamento de Química Agro-Industrial del INP-Toulouse en el aprovechamiento de los excedentes de materia vegetal para la síntesis de compuestos orgánicos con alto valor añadido. Esta colaboración ha permitido la realización de varias tesis doctorales e intercambios de estudiantes, y los resultados científicos resultantes se han plasmado en distintas publicaciones científicas y patentes.



El Prof. Plumet durante el acto de investidura como *Doctor Honoris Causa* por el Instituto Nacional Politécnico de Toulouse.

El Prof. Joaquín Plumet nació en Madrid y se doctoró en Ciencias Químicas por la UCM en 1973. Realizó estancias postdoctorales en el Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Munich, con el Prof. R. Huisgen, y en el Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Lausanne, con el Prof. P. Vogel. Desde su retorno del extranjero ha ocupado distintos puestos académicos en la UCM. Tras un breve periodo como Catedrático y Director del Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Extremadura, se reincorporó definitivamente a la UCM, donde en la actualidad es Catedrático del Departamento de Química Orgánica de la Facultad de Ciencias Químicas de la UCM, del cual fue Director entre los años 2002-2004. Entre sus restantes méritos académicos destaca el haber sido Vicedecano de Investigación de la Facultad de Química de la UCM, y profesor visitante en las Universidades de Toulouse, California-Riverside, ESCPI-Paris, Lausanne y Bordeaux-I. Ha publicado más de 250 trabajos científicos entre artículos, revisiones, y patentes, y ha dirigido una treintena de tesis doctorales. La mayoría de sus antiguos doctorandos ocupan hoy en día puestos de investigadores en la industria o son profesores de universidad. Desde hace diez años, el Prof. Plumet es miembro electo de la Junta de Personal Docente e Investigador de la UCM por el sindicato UGT, siendo también Director del Gabinete de I+D+i de UGT-Madrid.

A su currículo académico se une ahora la investidura como *Doctor Honoris Causa* por el Instituto Nacional Politécnico de Toulouse.

Remitido por: **Aurelio G. Csáky**
Departamento de Química Orgánica
Universidad Complutense de Madrid

VI Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ Sigma-Aldrich (Granada, 22–25/11/2009)

La RSEQ y Sigma-Aldrich vienen patrocinando desde el año 2004 un Simposio de Investigadores Jóvenes dirigido a investigadoras e investigadores menores de 35 años, socias/os de la RSEQ. Este congreso trata de facilitar la difusión de los resultados de la investigación de las nuevas generaciones de químicos y fomentar el establecimiento de relaciones de cooperación científica entre ellos para contribuir al desarrollo de una investigación científica interdisciplinar en el campo de la química.

El VI Simposio de Investigadores Jóvenes se celebró en el Salón de Grados de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Granada, entre los días 23 y 25 de Noviembre de 2009. El

número de participantes, procedentes de todas las universidades españolas, Consejo Superior de Investigaciones Científicas y otros centros de investigación españoles y extranjeros, superó el centenar. En el Simposio se impartieron 4 conferencias invitadas (30 minutos), presentadas por los investigadores jóvenes premiados por la RSEQ en 2009, 36 comunicaciones orales (20 min.) y 67 carteles. El Comité Científico y Organizador estuvo constituido por Nazario Martín (Universidad Complutense de Madrid, Presidente de la RSEQ), Jesús Jiménez Barbero (CSIC, Secretario de la RSEQ), Juan Manuel Salas Peregrín (Universidad de Granada, Presidente del Comité), Enrique Oltra Ferrero



Participantes en el VI Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ Sigma-Aldrich. Fotografía Iris Sancho Sanz.

(Universidad de Granada), Enrique Álvarez-Manzaneda Roldán (Universidad de Granada), José María Moreno Sánchez (Universidad de Granada), Juan Manuel Cuerva Carvajal (Universidad de Granada) y Antonio Rodríguez Diéguez (Universidad de Granada, Secretario del Comité). El Comité Local de la Universidad de Granada estuvo formado por Tania Jiménez Trujillo, Alba Millán Delgado, Ana Martín Lasanta, Iris Sancho Sanz, Marta Ester López Viseras, Fátima Linares Ordóñez, Silvia Titos Padilla y Antonio Jesús Calahorra Casanova, revelando la clara apuesta por la química de las jóvenes investigadoras del siglo XXI.

La financiación del Simposio corrió a cargo de la RSEQ, Sigma-Aldrich, la Sección Territorial de la RSEQ de Granada, el Grupo Especializado de Jóvenes Investigadores Químicos (JIQ) y la Universidad de Granada. También se recibieron generosas aportaciones del Ayuntamiento de Granada y la Federación Granadina de Empresarios de Hostelería.

El Simposio rebasó todas las previsiones de participación y mantuvo un elevado nivel científico, tanto en las conferencias invitadas como en las comunicaciones orales y los carteles, presentando los resultados más recientes de la actividad científica desarrollada por los jóvenes investigadores en su Tesis Doctoral, estancias post-doctorales y/o tras su reincorporación a la investigación científica en España.



Miembros del Comité Científico y Organizador junto a los galardonados con los Premios de Investigadores Noveles RSEQ-Sigma-Aldrich 2009. En la primer fila, de izquierda a derecha: Emilio M. Pérez, Israel Fernández, Fernando López y Bartolomé Simonet. Fotografía Iris Sancho Sanz.

• Entrega de Premios SUSCHEM-Grupo de Jóvenes Investigadores Químicos (GE-JIQ)

Durante el desarrollo del VI Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ Sigma-Aldrich, se llevó a cabo la entrega de los Premios SUSCHEM Predoc, Postdoc y Tesis, que habían sido fallados el 24 de julio de 2009.

Durante una de las sesiones del congreso, el presidente del Grupo Especializado de Jóvenes (JIQ) Juan Luis Delgado, el secretario de dicho grupo Santiago Gómez, así como uno de los vocales del mismo, Antonio Rodríguez, entregaron los premios a los galardonados de cada una de las categorías.

En primer lugar se entregó a Emilio Pérez Álvarez, Doctor en Químicas por la Universidad de Edimburgo, el **Premio Postdoc** que le distingue como autor de la mejor publicación científica postdoctoral de 2008. Posteriormente, se entregó a Daniel García Velázquez, Licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de La Laguna, el **Premio Predoc** que le acredita como autor de la mejor publicación científica de 2008, en cualquier área de la Química, de un no doctor menor de 35 años. Por último, se llevó a cabo la entrega del **Premio Tesis**, que acredita a su ganador como autor de la mejor tesis

El VI Simposio de Investigadores Jóvenes se inició la tarde del domingo 22 de noviembre con la entrega de la documentación y un cóctel de bienvenida a los participantes en el Hotel Luna de Granada. El acto de inauguración del Simposio, presidido por Antonio Ríos Guadix, Decano de la Facultad de Ciencias de Granada, tuvo lugar el lunes 23 de noviembre, con la entrega de los Premios de la RSEQ y Sigma-Aldrich para Investigadores Jóvenes del año 2009 a Bartolomé M. Simonet (Universidad de Córdoba), Israel Fernández (Universidad Complutense de Madrid), Fernando López (Instituto de Química Orgánica General, CSIC) y Emilio M. Pérez (Universidad Complutense de Madrid). Entregaron los premios Jesús Jiménez Barbero, Secretario de la RSEQ y Javier Márquez, Director de Sigma-Aldrich España que, a continuación, realizó una presentación de las actividades de la empresa en nuestro país. Posteriormente comenzaron las actividades científicas del Simposio, con la conferencia invitada a cargo de Bartolomé M. Simonet, Premio Investigador Joven de la RSEQ 2009, y 7 comunicaciones orales. La sesión de tarde comenzó con 3 comunicaciones orales y finalizó con la conferencia invitada de Israel Fernández, Premio Investigador Joven de la RSEQ 2009, seguida de 2 comunicaciones orales. El martes 24 de noviembre se impartieron las conferencias invitadas de Fernando López y Emilio M. Pérez, Premios Investigadores Jóvenes de la RSEQ 2009, y 14 comunicaciones orales. Al día siguiente, en la mañana del miércoles 25 de noviembre se presentaron 11 comunicaciones orales. Las sesiones de carteles tuvieron lugar en el *hall* de la Facultad de Ciencias los días 23 y 24 de noviembre con presencia de los autores responsables durante las pausas para el café que se sirvió a media mañana y media tarde.

Finalizadas las sesiones científicas, el Comité Científico y Organizador hizo entrega de los premios a la mejor presentación oral y al mejor cartel a Emilio M. Pérez y M. Celeste Bernini respectivamente. Finalmente, Juan Manuel Salas, Presidente de la Sección Territorial de la RSEQ de Granada, clausuró el Simposio.

Más información disponible en la página web del Simposio: http://qiserver.ugr.es/sigma_aldrich/.

Remitido por: **Enrique Oltra**
Vocal del Comité Científico y Organizador.

doctoral en cualquier área de la química defendida durante el año 2008, a los padres del galardonado Manuel Moliner Marín debido a que éste se encuentra en Estados Unidos realizando una estancia postdoctoral.



Acto de entrega de los premios SUSCHEM-JIQ 2009: el presidente, secretario y vocales del GE-JIQ junto a los galardonados.

Con la entrega de estos tres premios se concluyeron los actos asociados a la convocatoria de premios SUSCHEM del año 2009, con lo que se emplaza a los socios de la RSEQ que quieran participar en los mismos a estar atentos a la próxima publicación de la convocatoria de 2010.

Remitido por: **Grupo especializado de Jóvenes Investigadores Químicos**

VIII Jornada Científica del Instituto de Ciencia Molecular de la Universidad de Valencia y Entrega del Premio Elhuyar-Goldschmidt 2009 de la RSEQ

El pasado 18 de diciembre tuvo lugar en los locales del Parque Científico de la Universidad de Valencia (campus de Burjassot-Paterna) la VIII Jornada Científica del Instituto de Ciencia Molecular (ICMol) dirigido por el Prof. Eugenio Coronado Miralles. La jornada se celebra anualmente y tiene como objetivo la presentación y acercamiento de temas de actualidad en el campo de la nanociencia y la nanotecnología molecular a la comunidad científica (estudiantes, profesores e investigadores). La inauguración de la jornada contó con la presencia del Director General de Política Científica de la Generalitat Valenciana D. Vicente Bellver, la Decana de la Facultad de Química Dña. Pilar Campins y el Vicerrector de Investigación de la Universidad de Valencia D. Esteban Morcillo. El Director del Instituto presentó una breve memoria de las actividades del mismo, que puso de manifiesto el gran papel que el ICMol juega en el ámbito científico de la Comunidad Valenciana y su enorme proyección tanto nacional como internacional.

La jornada contó con la participación del Prof. Dirk M. Guldi de la Universidad Erlangen-Nürnberg, al cual se le hizo entrega del Premio Elhuyar-Goldschmidt 2009 de la RSEQ por parte del Prof. Nazario Martín, presidente de la misma. El Prof. Martín resaltó las contribuciones del Prof. Guldi en el área de la conversión de energía solar en energía eléctrica utilizando materiales orgánicos como alternativa a la tecnología actual basada en los semiconductores inorgánicos. El Prof. Martín enfatizó el enorme impacto del trabajo del Prof. Guldi en la comunidad científica internacional, que se traduce en un número de citas por encima de las 12.000 y un índice *h* de 58. El Prof. Guldi agradeció la concesión del Premio Elhuyar-Goldschmidt, cuyo prestigio es avalado por la talla científica de los investigadores que lo han recibido. Agradeció igualmente la dedicación, esfuerzo y buen hacer de su equipo cien-

tífico, sin el cual no hubiese sido posible alcanzar el galardón que ahora se le otorga. Hizo finalmente una mención especial a su esposa y a su familia, que soportan y a veces sufren la extrema dedicación que el trabajo científico conlleva.

La jornada contó con otros dos conferenciantes, el Prof. Fernando Briones del Instituto de Microelectrónica de Madrid del CSIC, premio Jaime I de Nuevas Tecnologías del año 2005, y el Prof. Manuel Yáñez de la Universidad Autónoma de Madrid, Premio de Química Física de la RSEQ del año 2001.

Las conferencias del Prof. Guldi y del Prof. Briones abordaron de forma complementaria el tema de la energía solar y de los progresos realizados en la construcción de células solares para la conversión y aprovechamiento de dicha energía. El Prof. Guldi centró su charla en la utilización de nanoestructuras de carbono y, en particular, de nanotubos de carbono, para el desarrollo de células fotovoltaicas orgánicas. Por su parte, el Prof. Briones habló de los últimos avances en células solares utilizando semiconductores inorgánicos diferentes del silicio, los cuales han permitido obtener eficiencias superiores al 40%. La charla del Prof. Yáñez mostró, mediante numerosos ejemplos, el enorme potencial de la Química Cuántica para racionalizar las propiedades del enlace químico. El Prof. Yáñez explicó mediante cálculos químico-cuánticos las sorprendentes diferencias que existen entre las propiedades de enlace de elementos del mismo grupo de la tabla periódica. La jornada finalizó, como viene siendo habitual, con una comida informal que permitió la degustación de unas excelentes paellas y la interacción entre todos los participantes.

Remitido por: **Enrique Orti**
Instituto de Ciencia Molecular
Universidad de Valencia



El Prof. Nazario Martín, presidente de la RSEQ, hace entrega al Prof. Dirk M. Guldi del Premio Elhuyar-Goldschmidt 2009.



De izquierda a derecha: Prof. N. Martín, Prof. E. Coronado, Prof. D. M. Guldi, Prof. M. Yáñez y Prof. F. Briones.

In Memoriam Antonio Gómez Sánchez

El 6 de octubre de 2009 fallecía en Sevilla Antonio Gómez Sánchez, Profesor de Investigación del CSIC, a los ochenta y tres años de edad. Era el último representante del grupo que, bajo la dirección de D. Francisco García González, constituyó el núcleo original de una escuela de investigación que, inmediatamente después de la guerra civil, inició y desarrolló los estudios sobre química de hidratos de carbono en España.

Criado en el sevillano barrio de San Bernardo, Antonio conservaba nítidos recuerdos de los tiempos de guerra y de postguerra que le tocó vivir en su infancia y primera juventud y de sus primeros años universitarios en la Sevilla de los cuarenta. Defendió su tesis doctoral, realizada bajo la supervisión de García González y Fernández-Bolaños, en la Universidad Central en 1952, y en 1955, ejerciendo ya como Profesor Adjunto de la Universidad de Sevilla, consiguió por oposición una plaza de Colaborador Científico del CSIC con destino en la Sección de Sevilla del Instituto de Química Alonso Barba. Entre sus compañeros de promoción estaban Ramón Madroñero, Félix Serratos, Eldiberto Fernández Álvarez y José Luis Bretón. Pertenecía, por tanto, a una generación de químicos orgánicos del CSIC que, formados en los duros años cuarenta y primeros cincuenta, trabajando en condiciones casi siempre precarias, iniciaron en los sesenta, como investigadores independientes, el largo proceso de normalización de nuestra ciencia tras el desplome y el vacío ocasionados por la guerra civil. Hombre culto y refinado, dotado de excelente memoria, era un placer oírle hablar sobre las universidades, el CSIC y la química española en aquellos años.

En 1956 se trasladó a la Universidad de Birmingham en cuyo Departamento de Química permaneció hasta 1959 realizando una nueva tesis (PhD) bajo la supervisión de Maurice Stacey, sucesor de Sir Norman Haworth, y de S. A. Barker. Esta estancia en Birmingham tuvo una profunda influencia en su posterior desarrollo como científico y en su modo de estar en la vida: siempre hubo algo de británico en su forma de enfocar los problemas, en sus gustos o, incluso, en su modo de vestir. Años más tarde, en 1974, obtuvo de la misma Universidad el título de doctor en ciencias (DSc) siendo después admitido, ya en los ochenta, como *Fellow de la Royal Society of Chemistry*.



Antonio Gómez Sánchez (1926–2009).

Aunque Antonio desarrolló toda su carrera investigadora en el CSIC, alcanzando la categoría de Investigador Científico en 1961 y de Profesor de Investigación en 1971, siempre tra-

bajó en locales de la Universidad de Sevilla, primero en la Cátedra, en la antigua Fábrica de Tabacos, y luego en el Departamento de Química Orgánica, en el campus de Reina Mercedes. Esto y su decidido gusto por la docencia al más alto nivel le permitieron jugar un importante papel en los cursos de doctorado de la Facultad de Ciencias. Así fue como, en los primeros sesenta, popularizó en Sevilla el uso de las técnicas físicas, muy particularmente la espectroscopía de RMN, como herramienta indispensable en la determinación estructural de moléculas orgánicas. Igualmente contribuyó de modo importante a generalizar la utilización de la aproximación mecanística en la interpretación y la racionalización de los resultados y en el diseño de las condiciones experimentales de los procesos de síntesis. Su labor en la Universidad, sin embargo, no se limitó a esta actividad docente sino que participó activamente en la vida académica, desempeñando con generosidad otras funciones cuando se le requirieron.

Como investigador predicó con el ejemplo publicando artículos esencialmente basados en la utilización de la espectroscopía de RMN muchos años antes de que se instalara el primer equipo en Sevilla. Dentro del tema general iniciado por García González, su labor fue fundamental en el estudio de formación de derivados del pirrol por reacción de aminoazúcares con compuestos β -dicarbonílicos. En estos trabajos su principal interés derivó hacia los aspectos mecanísticos del proceso y este enfoque químico físico orgánico de su investigación prevaleció en años posteriores cuando sus intereses se diversificaron con incursiones en otros temas: antibióticos aminoglicosídicos, nitro-olefinas, nitro-enaminas, azúcares de cadena larga o la reacción de Maillard, este último tema iniciado en un intento de acercar su investigación a la ciencia y tecnología de alimentos cuando, como resultado de avatares administrativos, quedó formalmente adscrito al Instituto de la Grasa.

A lo largo de toda su carrera Antonio mantuvo una relación, tan intensa como le fue posible, con grupos de investigación fuera de España e intentó estar presente en todos los eventos internacionales relacionados con sus intereses científicos. Esta internacionalización de su actividad se institucionalizó con su nombramiento por la Real Sociedad Española de Química como representante de España en la *International Carbohydrate Organization* y en la *European Carbohydrate Organization*, representaciones que mantuvo hasta su jubilación en 1991.

Fue secretario y después presidente de la sección local de la Real Sociedad en Sevilla y académico de número de la Real Academia Sevillana de Ciencias en la que sirvió durante años como primer secretario.

Con Antonio Gómez Sánchez se pierde uno de los últimos supervivientes de una destacada generación de químicos orgánicos del CSIC. Una generación de indiscutibles maestros que con su esfuerzo, su inteligencia y su dedicación consiguió revitalizar y modernizar la química orgánica española.

Remitido por: **Manuel Martín-Lomas**
CIC biomaGUNE
Parque Tecnológico de San Sebastián

Noticias científicas relevantes

Espectrometría de masas para la detección de tumores

Un equipo de investigadores húngaros y alemanes ha presentado un nuevo dispositivo basado en la combinación de herramientas quirúrgicas y la espectrometría de masas que permitiría, de forma sencilla y rápida, el análisis y la identificación de tejido vivo durante el tratamiento quirúrgico del cáncer (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 8240–8242).

El nuevo sistema consta de un electrodo quirúrgico que evapora e ioniza el tejido al entrar en contacto con él. A continuación y a través de una bomba Venturi, los iones son transferidos al espectrómetro de masas (Figura 1). La evaporación, ionización y análisis de los tejidos se lleva a cabo en un intervalo de 0,1-0,15 s, de ahí que esta nueva técnica lleve por nombre REIMS, cuyas siglas en inglés significan espectrometría de masas de ionización y evaporación rápida (*Rapid evaporative ionization mass spectrometry*).

Según los autores, cada tejido posee un espectro de masas REIMS característico. Por ejemplo, las células cancerígenas poseen una composición fosfolipídica distinta a la de otras células sanas. Esta nueva técnica no sólo permite identificar tejido cancerígeno, sino que también permite determinar la necrosis y su grado de extensión.



Figura 1. Científicos alemanes y húngaros proponen un nuevo montaje experimental para analizar tejido vivo, que podría ser aplicado para la identificación de tejido cancerígeno durante la extirpación de tumores.

Química con ordenadores: modelización de reacciones en superficies

Desentrañar los mecanismos de las reacciones que ocurren en superficies, especialmente relevantes en procesos de catálisis, es más que un frívolo ejercicio académico. Las reacciones de moléculas en fase gas con metales tienen una tremenda importancia práctica, ya que la producción de la mayoría de compuestos sintéticos involucra, en mayor o menor medida, tales procesos.

Hasta ahora, sólo era posible hacer predicciones semi-cuantitativas sobre las reacciones molécula-superficie. Pero un reciente avance, ha permitido dar un importante paso hacia el entendimiento cuantitativo de cómo las moléculas interactúan con las superficies.

Un equipo internacional de científicos de España, los Países Bajos, Noruega, Argentina y Estados Unidos, entre los que figura Cristina Díaz del Departamento de Química de la Universidad Autónoma de Madrid, ha mostrado que una clase

importante de reacciones molécula-superficie, en concreto la disociación de hidrógeno molecular en superficies metálicas, ahora puede ser modelizada con ordenadores alcanzando precisión química (< 1 kcal/mol), (*Science* **2009**, *326*, 832–834).

Actualmente, la teoría permite estudiar mecano-cuánticamente la reacción de moléculas diatómicas con superficies metálicas, considerando los 6 grados de libertad de la molécula, y aplicando las aproximaciones de Born-Oppenheimer y de superficie estática. La precisión que se logra depende críticamente de la fortaleza de las interacciones interatómicas, descritas por la superficie de energía potencial (SEP). Las limitaciones inherentes a la teoría del funcional de la densidad (DFT), usada en cálculo de estas SEPs, han impedido hasta la fecha una descripción cuantitativa de las reacciones catalizadas por superficies. Mediante la incorporación de la llamada *aproximación de parámetro específico de reacción* a la teoría DFT estándar, este grupo de científicos ha conseguido una descripción cuantitativa de las interacciones molécula superficie.

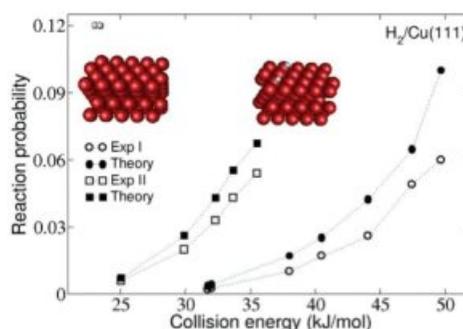


Figura 2. Mediante la implementación de la aproximación de parámetro específico de reacción, un grupo internacional de investigadores ha conseguido modelizar con precisión química la reacción de disociación de H_2 sobre una superficie metálica de Cu (111).

Detectado nuevo compuesto de argón y silicio

La preparación de compuestos derivados de gases nobles sigue suponiendo hoy en día todo un desafío para los químicos, resultando especialmente complicada la síntesis de complejos que contienen los átomos más ligeros de este grupo, como el argón y el neón.

A partir del reactivo superelectrófilo SiF_3^{2+} , átomos argón y un espectrómetro de masas tándem, dos investigadores de la República Checa han conseguido preparar el primer compuesto covalente de argón y silicio, $Ar-SiF_2^{2+}$ (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 8788–8790).

La clave de este descubrimiento reside en la elección del SiF_3^{2+} como electrófilo para la reacción de sustitución nucleófila que conduce al compuesto de $Ar-SiF_2^{2+}$ (Figura 3). Entre las características de este electrófilo destacan su altísima energía de recombinación (22,4 eV), su baja energía de enlace Si-F [$D(F_2Si^{2+}-F)=1,97$ eV] y la elevada energía de ionización del grupo saliente F (17,4 eV).

Experimentos análogos realizados con átomos de neón revelaron, en comparación con el argón, rendimientos mucho más bajos, atribuibles probablemente a la formación del complejo de $Ne-SiF_2^{2+}$ a partir del estado excitado del precursor de

SiF_3^{2+} . A diferencia del compuesto de Ar-SiF_2^{2+} , el equipo de investigadores checo no confía en poder aislar el compuesto de neón y silicio debido a la baja fortaleza de sus enlaces.

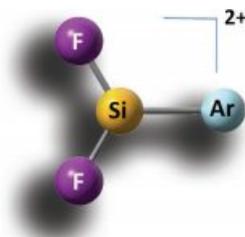


Figura 3. Mediante una reacción de sustitución nucleófila científicos checos han preparado el primer compuesto covalente de argón y silicio, Ar-SiF_2^{2+} .

Nuevo catalizador no metálico para reacciones de hidrogenación

El hidrógeno molecular no sólo es considerado el combustible del futuro sino que hoy en día constituye un reactivo clave en las industrias farmacéutica, agro- y petroquímicas y alimentaria.

Los catalizadores más comúnmente empleados en reacciones de hidrogenación suelen ser compuestos de metales de transición, aunque hoy en día se conoce un gran número de sistemas no metálicos capaces de catalizar este proceso elemental. A esta lista se incorpora la molécula de [60]fullereno que, en presencia de luz ultravioleta y bajo presión de 1 atm de H_2 , cataliza de modo selectivo y con rendimientos comparables a los obtenidos con catalizadores metálicos la reacción de hidrogenación de nitrobenzoceno a anilina, Figura 4. Aunque por el momento el equipo de investigadores de la universidad de Nanjing en China que dirige esta investigación desconoce el mecanismo mediante el cual transcurre esta reacción, resultados preliminares de sus investigaciones apuntan a la formación de un complejo excitado entre las moléculas de C_{60} , H_2 y el nitroderivado aromático, que activaría el H_2 transfiriendo los átomos de H y formando el amino derivado (*J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 16380–16382).

La utilización de derivados carbonados, como alternativa a los catalizadores basados en derivados de metales pesados, permitiría recortar de forma importante los costes de producción en la industria, al mismo tiempo que disminuir considerablemente el impacto medioambiental de este tipo de reacciones.

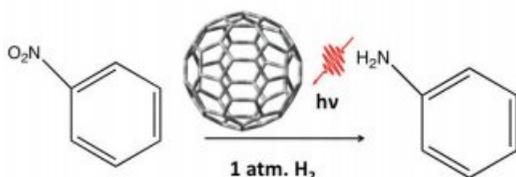


Figura 4. La irradiación de la nitroderivados aromáticos en presencia de moléculas de [60]fullereno y H_2 conduce a la formación de aminas aromáticas, con rendimientos comparables a los obtenidos con catalizadores de metales de transición.

Enlaces C-C aromáticos rotos mediante la inserción de complejos de wolframio

Junto a la activación selectiva de enlaces C-H, la adición oxidativa de enlaces C-C a metales de transición juega un papel fundamental en la síntesis de moléculas orgánicas com-

plejas. A pesar de la dificultad que entrañan este tipo de transformaciones, debido a la inercia de los enlaces C-C, científicos de la Universidad de Columbia en Nueva York han conseguido romper un enlace C-C aromático a través de la inserción de un centro metálico de wolframio (*Nature* **2010**, *463*, 523–526).

En busca de sistemas capaces de activar enlaces C-N en anillos aromáticos, los autores del descubrimiento observan un inusual comportamiento del complejo de wolframio $\text{W}(\text{PMe}_3)_4(\eta^2\text{-CH}_2\text{PMe}_2)$. En presencia del compuesto aromático no tensionado de quinoxalina, se genera como producto el *o*-diisocianobenceno derivado de la Figura 5, en lugar de un complejo de coordinación η^6 , tal y como cabía esperar según lo observado en reacciones de complejos análogos de otros metales de transición como molibdeno. Este complejo entre el W y el ligando diisocianuro presenta, además, propiedades estructurales que difieren de las observadas para otros isocianuros de metales de transición, como por ejemplo una desviación bastante pronunciada de la geometría lineal sobre el átomo de N, lo que sugiere una hibridación sp^2 y no sp para este átomo.

El aspecto más prometedor de este estudio es, sin embargo, su potencial generalización a otro tipo de sistemas, aportando nuevos métodos para la funcionalización de moléculas orgánicas.

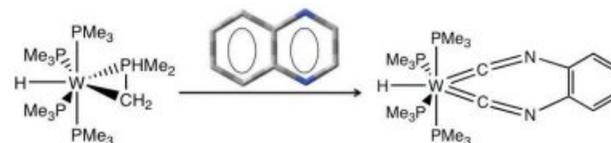


Figura 5. Investigadores de la Universidad de Columbia presentan un complejo de wolframio capaz de insertarse en enlaces C-C aromáticos.

Dos al mismo tiempo

Investigadores del instituto Max Planck de fisiología molecular de Dortmund en Alemania presentan la estructura cristalina de la primera proteína capaz de albergar en su sitio activo, simultáneamente, dos enantiómeros de una mezcla racémica, cuando lo común es que ambos enantiómeros enlacen individualmente al receptor biológico y además uno de ellos no posea la actividad deseada (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 9084–9087).

La enzima en cuestión es la PhzA/B perteneciente a las Burkholderia cepacia R18194 e involucrada en la biosíntesis de fenacina en bacterias. Entre las funciones de la fenacina destaca la producción de especies reactivas de oxígeno con actividad antibiótica.

La Figura 6 muestra la estructura cristalina del sitio activo de la enzima enlazado a dos moléculas del ácido 5-bromo-2-(piperidin-3-il-amino) benzoico con quiralidades opuestas. Las conclusiones de este trabajo permiten descartar que el enlace simultáneo de los dos enantiómeros al sitio activo sea debido a un efecto cooperativo entre ligandos, y sin embargo revelan que el porcentaje de cada enantiómero unido al sitio activo es dependiente de la concentración de la mezcla racémica.

Este nuevo descubrimiento podría tener importantes implicaciones en las primeras etapas del diseño de nuevos fármacos, realizadas normalmente a partir de mezclas racémicas debido al elevado coste que supone producir compuestos enantioméricamente puros.

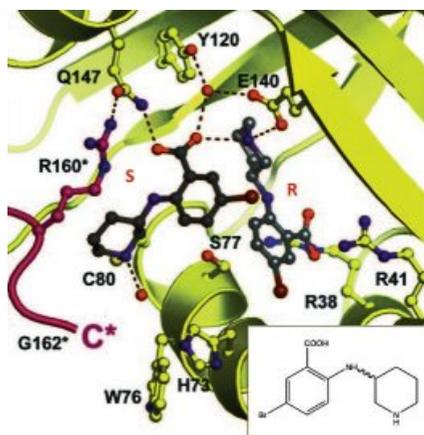


Figura 6. La enzima PhzA/B perteneciente a la *Burkholderia cepacia* R18194 es capaz de albergar simultáneamente en su sitio activo los isómeros *R* y *S* del ligando ácido 5-bromo-2-(piperidin-3-il-amino) benzoico.

Primer análogo de silicio para la molécula de benceno

No es hasta el año 1981, tras la publicación de la síntesis del primer compuesto estable con un enlace doble Si=Si por West, Fink y Milch, (*Science* **1988**, 214, 1343–1344), cuando comienza la búsqueda de compuestos aromáticos de silicio.

Experimentalmente, se sintetiza un isómero no aromático del hexasilaprismano en 1993 y a partir del 2000 se consigue aislar los compuestos aromáticos de estructura plana sila- y 1,2-disilabenceno. Por otro lado, cálculos teóricos predicen una estructura en forma de silla para la molécula de hexasilabenceno, análogo del benceno con átomos de silicio.

Recientemente, científicos del Imperial College de Londres han preparado el primer sistema aromático basado en un esqueleto de 6 átomos de silicio, de fórmula Si_6R_6 (Figura 7), siendo R el sustituyente 2,4,6-triisopropilfenilo (*Science* **2010**, 327, 564–566). La síntesis se basa en el acoplamiento de dos ciclotrisilanos en presencia de litio/naftaleno. El análisis topológico de la densidad electrónica, utilizando el método de *átomos en moléculas* de Bader, revela para este sistema una estructura tricíclica formada por dos anillos de Si_3 y un fragmento central de tipo Si_4 .

Para diferenciar la distribución heterogénea los 6 electrones σ , π y no enlazantes sobre los átomos de silicio en este isómero, de la distribución uniforme en la molécula benceno, los autores del trabajo han acuñado el nuevo término: *aromaticidad dismutacional*.

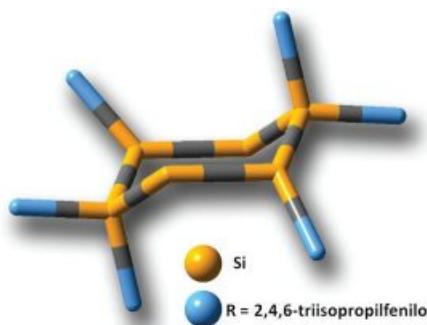


Figura 7. Investigadores del Imperial College de Londres han sintetizado el compuesto hexasilabenceno, análogo de silicio de la molécula de benceno.

La proteína verde fluorescente en acción

Una de las principales aplicaciones de la proteína verde fluorescente, o GFP por sus siglas en inglés, presente en la medusa *Aequorea victoria*, es su uso como marcador genético. Hoy en día se sabe que su bioluminiscencia tiene origen en la transferencia de un protón desde el residuo Tyr66 al Glu222 (Figura 8) cuando la proteína es excitada con luz de longitudes de onda de 397 nm, aunque el mecanismo completo a nivel molecular sigue siendo aún desconocido.

Para profundizar en este aspecto, un equipo de científicos del Departamento de Química de la Universidad de California, mediante la técnica conocida como espectroscopía Raman de femtosegundos, ha conseguido *captar* los movimientos nucleares involucrados en el proceso de transferencia de protón, registrando espectros vibracionales resueltos temporalmente del cromóforo excitado de la GFP, pudiendo obtener, así, una película del mecanismo que da lugar a la forma fluorescente de la proteína (*Nature*, **2009**, 462, 200–204).

La espectroscopía Raman ultrarápida inicia el proceso fotoquímico a través de un pulso de femtosegundos. A continuación, a partir de un pulso Raman de picosegundos seguido de un pulso Raman de 20 fs se obtienen espectros Raman que, tras ser debidamente interpretados, proporcionan instantáneas estructurales de la proteína cada 25 femtosegundos.

De los resultados de esta investigación se desprende que es la flexión simétrica fuera del plano del grupo fenoxilo la responsable de la transferencia del protón fenólico al residuo Wat22, lo que refuerza al mismo tiempo el enlace de hidrógeno ya existente entre los dos residuos. Esto se traduce en variaciones en la posición e intensidades de las dos frecuencias tomadas como referencia, la tensión C-O y C=N, y localizadas en extremos opuestos del cromóforo.

Este trabajo no sólo ha conseguido arrojar luz sobre el mecanismo que subyace a la formación del estado fluorescente de la GFP, si no que permite comprender mejor el proceso de transferencia de protón, fundamental en muchos procesos biológicos.

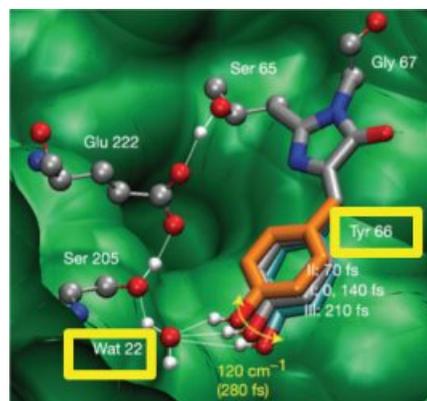


Figura 8. La flexión simétrica fuera del plano del grupo fenoxilo optimiza la geometría del cromóforo preparándolo para el proceso de transferencia de protón, responsable de la formación del estado fluorescente de la GFP.

Complejos de Europio para el diagnóstico de lesiones óseas

Un equipo de investigadores irlandeses presenta el primer agente de contraste basado en un complejo de Eu(III) luminescente que permite obtener imágenes de tejido biológico óseo (*J. Am. Chem. Soc.* **2009**, 131, 17542–17543).

Los huesos constituyen un tejido dinámico que se remodela y repara de forma continua. La aplicación repetida de carga sobre el hueso o situaciones de estrés mecánico sobre el mismo pueden dar lugar a la formación de microgrietas, que debido a la naturaleza de la matriz orgánica y de la hidroxipatita del hueso pueden ser complicadas de distinguir del tejido óseo sano.

A través de sus tres sustituyentes iminodiacetato, el cicleno de Eu(III) diseñado por el equipo irlandés enlaza selectivamente los residuos de Ca(II) expuestos en la matriz consecuencia de la rotura (Figura 9). Tras la excitación indirecta del complejo de europio, a través de una antena naftalénica covalentemente unida al cicleno del lantánido, se produce la emisión luminescente del complejo, lo que permite localizar la lesión ósea.

De la comparación de las imágenes de microscopía confocal láser de barrido registradas para distintas muestras de tejido óseo expuestas al complejo luminescente de lantánido, resulta fácil distinguir el tejido óseo sano del dañado (Figura 9).

En estos momentos, los autores del trabajo investigan las propiedades fotofísicas de complejos análogos de Gd(III), para su aplicación como agentes de contraste.

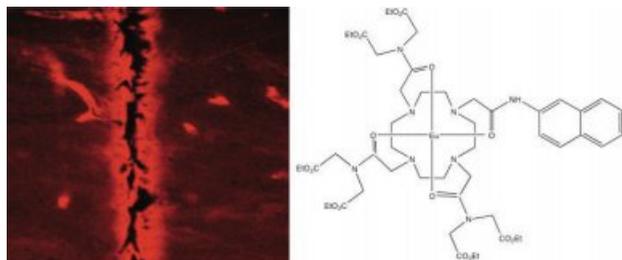


Figura 9. Agentes de contraste basados en complejos de Eu(III) luminescentes permiten la detección de microgrietas óseas.

El giro inesperado de los enzimas

En 1948, Pauling sugiere que la actividad catalítica de los enzimas se debe a su habilidad para estabilizar los estados de transición (ETs). Estos puntos estacionarios constituyen el punto más alto en energía en el camino de reacción, siendo necesario superar esta barrera energética para generar los productos. A través de la estabilización de los ETs, los enzimas consiguen disminuir esta barrera acelerando la reacción química.

Sin embargo, esta regla parece no cumplirse para el caso de los agujeros oxoaniónicos, presentes en multitud de enzimas. Estos centros activos constan de dos grupos capaces de formar enlaces de hidrógeno (EHs) con los oxígenos carbonílicos de los sustratos, (Figura 10) que se hacen más fuertes a medida que avanza la reacción. Cabe esperar que el agujero oxoaniónico sea más eficaz cuanto más estabilice el ET.

A partir del estudio de las estructuras tridimensionales de más de 400 enzimas con agujeros oxoaniónicos, Jonathan Goodman y Luis Simón, de las Universidades de Cambridge y Salamanca, han encontrado que los EHs entre el centro activo de estos enzimas y los ETs de los sustratos se encuentran girados casi 90° con respecto a la posición ideal para la estabilización del ET (*J. Org. Chem.* DOI: 10.1021/jo901503d). Cálculos mecanocuánticos sobre modelos sencillos, y estudios sobre estructuras semejantes de otras moléculas, muestran que esta disposición es incluso menos favorable en lo que respecta a la interacción enzima-sustrato. En este caso, la dis-

minución de la barrera no se consigue a base de estabilizar el ET si no a base de no estabilizar en exceso los reactivos.

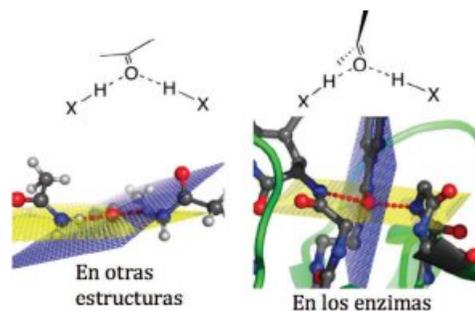


Figura 10. El complejo que se forma entre el agujero oxoaniónico de un enzima y el estado de transición de sustratos aniónicos oxigenados no adopta la estructura más estable posible, lo que evita la sobreestabilización de los reactivos permitiendo, así, acelerar el proceso químico.

Nanocintas de polímeros de coordinación altamente conductoras

Un polímero MMX consiste en una sucesión infinita monodimensional de subunidades dimetálicas puenteadas por halógenos. Algunos de ellos presentan un comportamiento metálico a temperatura ambiente en la fase cristal. Recientemente, investigadores de los grupos encabezados por Félix Zamora y Julio Gómez de los Departamentos de Química Inorgánica y Física de la Materia Condensada de la Universidad Autónoma de Madrid, han desarrollado diversos métodos de adsorción en superficie para este tipo de compuestos que, finalmente, les ha permitido depositar el polímero MMX $[Pt_2I(S_2CCH_3)_4]_n$ en superficies aislantes. Así han aislado nanocintas de longitud micrométrica compuestas por unas pocas cadenas de este polímero (~ 10 cadenas). Utilizando microscopía de fuerza atómica han demostrado que estas nanoestructuras conducen altos valores de densidad de corriente, *aprox.* $3 \cdot 10^4$ A/cm² (Figura 11), (*Nature Nanotechnology*, 2010, 5, 110–115). Estos excelentes resultados superan en varios órdenes de magnitud las corrientes observadas tanto para compuestos metal-orgánicos como para moléculas orgánicas aisladas en superficie, y además sobre distancias mucho más largas. Este trabajo pone de relieve el potencial de estos polímeros para aplicaciones de electrónica molecular.

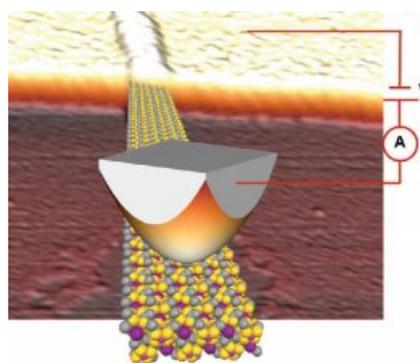


Figura 11. Representación artística de las medidas de conducción realizadas sobre una nanocinta de $[Pt_2I(S_2CCH_3)_4]_n$ depositada sobre una superficie de mica. La nanocinta se encuentra parcialmente cubierta con un macroelectrodo de oro y contactada en su extremo con una punta de oro del microscopio de fuerza atómica.