

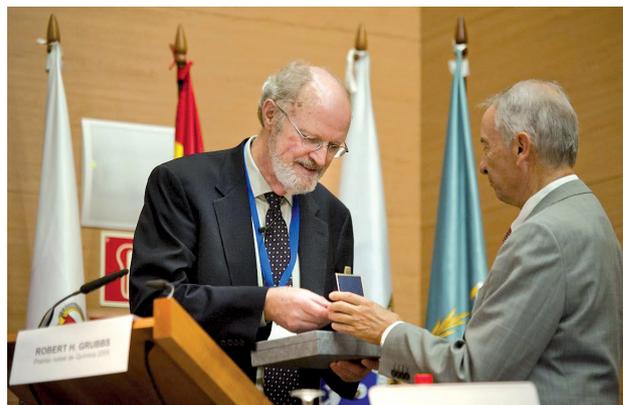
Química para un futuro mejor: reseñas de la XXXIV Biental de la Real Sociedad Española de Química

La XXXIV Reunion Biental de la RSEQ en Santander se ha estructurado alrededor de 10 simposios desarrollados en la ETSIIyT de la Universidad de Cantabria en el periodo comprendido entre el 15 y el 18 de septiembre de 2013. Los simposios se han programado bajo la coordinación de investigadores de reconocido prestigio, que se pueden consultar en el libro de resúmenes.

La reunión bienal ha tenido como lema “*Química para un Futuro Común*” y por ello hemos dedicado el 0,7% del presupuesto a promover las actividades de dos reconocidas ONGs con cuyas tarjetas hemos agradecido la colaboración de nuestros conferenciantes invitados.

Las actividades programadas han ocupado 72 sesiones de trabajo donde se han debatido más de 400 comunicaciones orales y más de 450 carteles. El congreso ha contado con 956 personas inscritas, de las cuales aproximadamente el 50% son jóvenes investigadores, índice indiscutible de la gran aceptación de la programación realizada.

Además de las presentaciones orales y carteles uno de los mayores atractivos de esta bienal han sido las conferencias plenarias. El premio Nobel de Química 2005, profesor Robert H. Grubbs del Instituto de Tecnología de California (EEUU), se encargó de impartir la conferencia de apertura. El lunes, la bienal contó con el galardonado con el premio Elhuyar Goldsmidt 2011, el profesor Alois Fürstner del Instituto Max-Planck (Alemania), y con el Presidente de la Federación Europea de Ingeniería Química (EFCE), profesor Richard Darton, de la Universidad de Oxford (Reino Unido). El martes impartieron conferencias plenarias dos de los principales exponentes de la investigación española en Química,



El profesor Luis Oro, presidente del Comité Científico, hace entrega de la insignia de la RSEQ al profesor Grubbs.

la profesora María Vallet-Regí y el profesor Nazario Martín, ambos de la Universidad Complutense de Madrid. La conferencia plenaria de clausura tuvo lugar el miércoles día 18 y correspondió al Presidente de la IUPAC, profesor Kazuyuki Tatsumi de la Universidad de Nagoya (Japón).

En la sesión de clausura merece destacarse la nominación de A Coruña como la sede de la Bienal de la RSEQ 2015, y la concesión de los Premios Wiley a los mejores carteles de Química Inorgánica, que recayó en un grupo de la Universidad de Granada; de Química Orgánica que se fue a la Universitat Rovira i Virgili; y de Ingeniería Química que correspondió al grupo de la Universidad de Las Palmas de Gran Canaria.



Miembros del Comité Organizador Local con (de izquierda a derecha) Jesús Jiménez Barbero, Robert Grubbs, Ángel Irabien y Luis Oro.



Sesión de apertura de la XXXIV Bienal de la RSEQ.

Esta Reunión ha sido posible por el trabajo, dedicación y esfuerzo del Comité Ejecutivo de la RSEQ constituido por Jesús Jiménez Barbero, Pedro Pérez Romero y Sonsoles Martín Santamaría y con la colaboración del Comité Local constituido por Ángel Irabien, Raquel Ibañez, Carmen Blanco, Enrique Álvarez-Guerra y Gabriel Zarca-Lago.

Una mención especial merecen los patrocinadores de Platino (Dynasol/Fundación Repsol), de Oro (Brucker, Lilly y Agilent Technologies) y de Plata [Solvay, Vertex, Scharlab, Aditya Birla (Gajano), Waters y Sigma Aldrich], así como Janssen, Wiley y numerosas organizaciones locales.

Como memoria de la reunión se ha publicado un documento electrónico (ISBN: 978-84-695-8511-5. Depósito Legal: SA-510-2013) editado por los organizadores con los resúmenes de las comunicaciones presentadas que muestran el panorama en 2013 de los principales resultados de la I+D+i española en el campo de la química y de la ingeniería química en el último bienio. Así mismo, se ha previsto la publicación de un número especial de la revista CTMC (*Current Topics in Medicinal Chemistry*) editado por Sonsoles Martín Santamaría y Pilar Goya Laza.

En resumen, un gran éxito de participación y calidad que permite visualizar el excelente estado de la investigación en química a pesar de las dificultades económicas y de las deficiencias de planificación con las que se encuentra la I+D+i en España.

Remitido por: **Ángel Irabien**,
Presidente del Comité Ejecutivo Local

Simposio de “Ingeniería química, medioambiente y energía” (IQ/MAMB)

Este simposio, celebrado dentro de la XXXIV Reunión Bienal de la RSEQ, ha sido el marco de debate de más de 150 investigadores. Durante tres días de trabajo se han celebrado ocho sesiones con la participación de 16 conferencias, impartidas por conferenciantes invitados, y de 46 presentaciones orales. Así mismo, se han discutido 72 presentaciones en forma de póster. El simposio, coordinado por los miembros del Comité Científico de la XXXIV Reunión Bienal, Arturo Romero Salvador (UCM) y Juan José Rodríguez Jiménez (UAM), ha combinado la participación de investigadores de reconocido prestigio con un gran número de jóvenes investigadores, convirtiéndose en una eficaz plataforma para el intercambio de conocimiento y para la interrelación entre los miembros de la comunidad científica en el ámbito de la ingeniería química, del medioambiente y la energía.

A través de las conferencias, impartidas por los profesores A. Arce (USC), J. García (UA), T. Cordero (UMA), D. P. Serrano (URJC), I. Ortiz (UC), G. Orcajo (URJC), E. Martín (USAL), J. Palomar (UAM), G. Villoria (UM), A. Galindo (Imperial College London), A. Santos (UCM), E. García (UAH), J. Ortega (ULPGC), S. Ordoñez (UNIOVI), J. Bilbao (EPV/EHU) y J. Adánez (CSIC), se ha presentado una excelente visión del estado del arte en temas de la máxima actualidad. Así, se trataron aspectos como el binomio agua-energía, el desarrollo y aplicación de líquidos iónicos, los avances en las tecnologías de membranas, el desarrollo de nuevas fuentes de energía basadas en el aprovechamiento de la biomasa y los residuos plásticos, la obtención de nuevos recursos hídricos, el conocimiento en profundidad



Conferencia durante el simposio IQ/MAMB.

de los procesos de oxidación avanzada para el tratamiento de las aguas, la combustión con captura de CO₂, el desarrollo y aplicación de nuevos catalizadores o la concepción de modelos termodinámicos y su utilidad en el ámbito de ingeniería química. Aspectos más detallados sobre la actividad de investigación que dentro de estos campos desarrollan los grupos españoles se han discutido a través de las comunicaciones orales y pósteres presentados en el simposio.

Remitido por: **Raquel Ibañez** (Universidad de Cantabria),
Daniel Gorri (Universidad de Cantabria),
Juan J. Rodríguez (Universidad Autónoma de Madrid)
y **Arturo Romero** (Universidad Complutense de Madrid).

Simposio de “Química inorgánica, química del estado sólido y cristalografía” (INOR)

El simposio INOR se desarrolló en seis sesiones de dos horas cada una, cinco de ellas dedicadas a presentaciones orales y, la última, orientada a la presentación y discusión de los pósteres, para dar tiempo a los jóvenes investigadores a defender sus trabajos. Durante las sesiones orales se presentaron conferencias de media hora de duración a cargo de seis investigadores propuestos por los grupos especializados, además de una conferencia del investigador galardonado con el premio de la especialidad en química inorgánica, que recayó en el profesor Teófilo Rojo de la Universidad del País Vasco. Se presentaron también 17 comunicaciones orales de 15 minutos. El número de carteles presentados en este simposio fue de 45.

Los conferenciantes invitados fueron L. M. Liz-Marzán (CIC biomaGUNE), A. Martín (UAH), A. Demourgues (CNRS-Université de Bordeaux), A. Fuentes (ICMAB-CSIC, Barcelona), F. J. Lahoz (CSIC, Zaragoza), y M. Armand (CIC energiGUNE), que impartieron conferencias de temáticas variadas.

Así mientras el Dr. Liz-Marzán habló sobre quiralidad nanoplasmódica y el Dr. A. Martín sobre complejos metalato, el Dr. A. Demourgues analizó los cambios de color asociados a distintas sales de Co^{2+} , y Zn^{+2} y se discutieron, con exquisito detalle, las estructuras cristalinas de una familia de aluminatos, silicatos (azules), óxidos (verdes) o hidroxofosfatos (violeta) de zinc y cobalto junto con otros derivados

análogos de tonalidades diversas. La profesora A. Fuertes realizó una revisión de la química de los oxinitruros, repasando aspectos de relevancia, como su extraordinaria dificultad de preparación, o sus particulares propiedades como fotocatalizadores o como materiales magnetorresistentes. El profesor F. Lahoz nos expuso la importancia que tiene el estudio estructural para entender la catálisis enantioselectiva. Las conferencias de los Dres. T. Rojo y M. Armand versaron sobre materiales avanzados para baterías de sodio y litio. El resto de ponencias también reflejaron esta variedad temática llevándonos desde aspectos teóricos de las interacciones en sólidos hasta las más innovadas aplicaciones de éstos. La sesión de póster resultó animada y estimulante y el cartel número 31 presentado por la joven N. Muñoz Padial y titulado: “*Superhydrophobic isorecticular porous metal-organic frameworks for the capture of harmful volatile organic compounds*”, de la Universidad de Granada, resultó premiado en esta sesión.

A las distintas sesiones de este simposio asistieron una media de unas 100 personas, destacando de una forma muy importante la presencia de jóvenes que superaba ampliamente el 60%. La reunión en Santander fue muy agradable y fructífera y deseamos que la gran participación de este año se mantenga en ediciones posteriores.

Remitido por: **María Isabel Arriortua** (Universidad del País Vasco) y **Pilar Gómez-Sal** (Universidad de Alcalá).

Mesa redonda sobre “Servicios científico-técnicos” (SCTGII)

El miércoles 18 de septiembre se celebró una mesa redonda en la que participaron 11 representantes de ocho Servicios Científico-Técnicos (SCTs) de toda España en el marco de la XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química. El evento fue moderado por la profesora María Isabel Arriortua Marcaida, directora de los SCT de la Universidad del País Vasco (SGIker) y por el profesor José Luis Arce Diego, director del área de investigación y organización de la Universidad de Cantabria.

Los temas principales que se trataron fueron los siguientes: 1) instrumentación y métodos de análisis singulares de cada SCT; 2) planes de formación promovidos por los SCT; 3) sistemas de gestión de calidad en los SCT; y 4) coordinación entre SCT.

Inicialmente cada representante realizó una breve presentación del estado actual de los servicios de su universidad haciendo especial hincapié en los temas descritos anteriormente. A continuación, en la mesa redonda, se inició un debate durante el cual se profundizó en el apartado de planes

de formación. En este sentido se planteó, de manera generalizada, la importancia de mantener un plan de formación continua para los técnicos. Con el fin de gestionar mejor este plan, se propuso promover un calendario de cursos de formación específicos de interés común a los que pudieran asistir técnicos de diferentes SCTs. Posteriormente, se trató el punto sobre sistemas de gestión de calidad en los SCTs. En general, se estableció que las acreditaciones en base a la norma ISO-17025 son necesarias en el caso de demandas concretas, aunque hay que tener en consideración el alto coste que supone su implantación. Por otro lado, se comentó el interés en implantar certificaciones de gestión de calidad según la ISO-9001 como base para futuras acreditaciones. Finalmente, todos los asistentes comentaron el gran interés de los temas tratados, con lo cual se planteó crear un foro de SCTs para reunirse en el futuro de manera periódica.

Remitido por: **José Luis Arce** (Universidad de Cantabria), **María Isabel Arriortua** (Universidad del País Vasco) y **David Hernández** (Universidad de Cantabria).

Simposio de “Educación, historia y divulgación” (EDH)

En los actos de la Bienal de la Real Sociedad Española de Química que ha tenido lugar en Santander entre el 15 y el 18 de septiembre, el 18 de septiembre se celebró un simposio sobre Educación, Historia y Divulgación de la Química organizado por los grupos de Historia de la Ciencia y de Didáctica e Historia de la Física y la Química, en el que intervinieron los siguientes conferenciantes: B. Herradón del CSIC que de forma amena trató de “La Historia como herramienta en la enseñanza de las ciencias: los fundamentos de la química”; M. Martínez-Ripoll del CSIC, disertó brillantemente sobre “Claroscuros y esplendor de la cristalografía”; J. Pérez-Pariente del CSIC hizo un interesante resumen de la “Historia de la catálisis en Europa y España”; y J. Casado de la Universidad de Salamanca cerró el acto con una sugestiva charla sobre un tema tan actual como “Objetivos sociales en la evaluación de la investigación”.

En el intermedio de esas cuatro conferencias se presentaron ocho comunicaciones orales y ocho pósteres relacionados con temas de historia y de enseñanza de la química que tuvieron una buena acogida entre los presentes por la variedad de temas tratados. El simposio fue seguido por gran número de los participantes en la bienal que intervinieron en los coloquios correspondientes.

Remitido por: **Manuela Martín-Sánchez**,
Universidad Complutense de Madrid.



De izquierda a derecha. Julio Casado, José María Hernández y Manuela Martín-Sánchez.

Simposio de “Química analítica, aplicaciones en alimentos, química agrícola y sensores” (QA)

Este simposio fue seguido por 57 investigadores. El simposio estuvo organizado en 4 sesiones los días 17 y 18 de septiembre y constó de cinco conferencias invitadas (una sexta tuvo que cancelarse a última hora por problemas de salud del conferenciante) y seis comunicaciones orales. Se presentaron, además, 20 comunicaciones flash y 34 pósteres. Durante el simposio se han puesto de manifiesto algunas de las últimas tendencias en la química analítica así como la interfase cada vez más amplia con otras ciencias como la biología molecular, la química clínica, la ciencia de materiales o la nanociencia y la nanotecnología con objeto de poder diseñar sistemas analíticos cada vez más rápidos, eficientes y que tengan un menor coste. En este sentido, la síntesis y las aplicaciones analíticas de las micro- y nano-partículas magnéticas ha sido un tema ampliamente debatido durante las sesiones que han contado con amplia asistencia y una gran participación por parte de los asistentes. Las conferencias invitadas trataron temas como: “*electrochemical biosensors*

for clinical applications”, “*metallomics and metabolomics in exposure experiments of laboratory mice for environmental metal toxicity assesment*”, “*desarrollo y aplicación de métodos quimiométricos para el análisis de datos ómicos ambientales*”, “*aportaciones de la química analítica a la investigación biomédica: del análisis de fármacos a la metabolómica*” y “*magnetic nanoparticles decorated with β -cyclodextrins for cancer biomarker recognition*”. Es importante resaltar que el simposio ha acogido también presentaciones dedicadas a la mejora e innovación tecnológica de varios procesos industriales implicados en la industria agroalimentaria, así como, en la utilización de subproductos de dicha industria con objeto de obtener un valor añadido importante. Todo ello dio lugar a interesantes discusiones científico-tecnológicas que ponen de manifiesto la estrecha relación de la química analítica con este sector industrial.

Remitido por: **José Manuel Pingarrón**,
Universidad Complutense de Madrid.

Evento satélite “El papel de los centros e institutos tecnológicos en el sistema de ciencia-tecnología español” (ES-CENTEC)

En los últimos 30 años, la ciencia ha tenido un desarrollo notable en España, con una repercusión internacional aceptable. En concreto, en el campo relacionado con la química, la ingeniería química, la energía, la bioquímica, el medio ambiente y los materiales, entre los años 1996 y 2010, los investigadores españoles han publicado más del 3% de los artículos científicos mundiales, entre el 2,6% y el 3,6% según las anteriores especialidades, y con una alta repercusión en citas, de 1,2 como media, un 20% por encima del nivel medio. Esto supone estar entre el 9º y el 11º puesto en número de publicaciones y entre el 3º y el 17º en citas a nivel mundial.

Sin embargo, no se ha conseguido algo parecido en tecnología, en innovación y en la aplicación de los conocimientos científicos. En número de patentes éramos los décimosexto del mundo en 2007, estamos en el puesto 17 en 2011, y con apenas el 51-52% de dichas patentes presentadas por las empresas, cuando en otros países este porcentaje rara vez baja del 85%. En innovación, apenas el 0,5% de facturación a nivel mundial de productos de alta tecnología es española, esto supone el puesto 26º, o en el tantas veces citado “índice de competitividad”, en el puesto 35º del mundo en 2011 y en el 39º según los datos de 2012. Y lo peor es que nuestros responsables quieren mejorar este puesto *¡bajando salarios!*, cuando parece que sería mejor dedicar más recursos a la I+D+i.

Este problema, la desconexión entre ciencia y sector productivo, aunque se han hecho muchos intentos, no ha sido superado, ni siquiera hemos avanzado significativamente en todos estos años.

Esta ya es razón suficiente para plantear en este congreso científico una mesa redonda sobre el papel de los centros e institutos tecnológicos, como instituciones más cercanas a la transferencia de conocimiento. Además, otro de los proble-

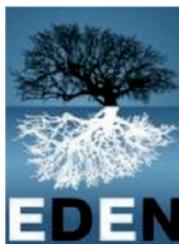
mas acuciantes de nuestro sistema de ciencia y tecnología, y lamentablemente en los últimos años de otros muchos sectores, es la renovación generacional. Dar una esperanza a los jóvenes, en este caso científicos y tecnológicos, que no pase por la emigración, que no proyección exterior.

Para ello, se ha contado con una variada representación de distintos centros e institutos. Son centros muy variados, tanto en cuanto a su temática principal, como a lo que respecta a cómo entienden su desarrollo y relación con el entorno. Los ponentes que intervinieron fueron: Carlos Feliú, hasta hace unos meses Director del Instituto de Tecnología Cerámica, asociado a la Universitat Jaume I de Castellón; María Pascual de Zulueta, coordinadora General de Difusión y Marketing de la Fundación GAIKER, en el Parque Tecnológico de Zamudio en Bizkaia; Sixto Malato, Director de la Plataforma Solar de Almería, una ICTS del CIEMAT; y Miquel Rovira, Director del *Centre Tecnològic* de Manresa. También se contó con una breve presentación del Centro Tecnológico Nacional de Descontaminación del Mercurio, de las Minas de Almadén, en Ciudad Real, Castilla La Mancha, a cargo de Ana Conde.

Estos ponentes realizaron una breve presentación sobre cuál es el quehacer de su centro o instituto y su papel en su región y ámbito profesional o industrial de influencia.

Posteriormente, hubo un animado debate sobre el papel de estos centros e institutos en el sistema de ciencia y tecnología español, cuáles son sus principales logros, anhelos y sus perspectivas, y cuáles son las oportunidades que ofrecen para jóvenes investigadores y tecnólogos.

Remitido por: **Félix García-Ochoa Soria**
(Universidad Complutense de Madrid)
y **Manuel Álvarez Guerra**
(Universidad de Cantabria).



IV Encuentro sobre Dendrímeros EDEN

SANTIAGO DE COMPOSTELA, JANUARY 23rd - 24th, 2014

Simposio “Nuevos retos de la electroquímica” (NRELECT)

Este simposio, celebrado el martes 17 de septiembre, fue organizado por el Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ y coordinado por los profesores Vicente Montiel (Universidad de Alicante), Manuel Rodrigo (Universidad de Castilla-La Mancha) y Ane Miren Urriaga (Universidad de Cantabria). El simposio se desarrolló en tres sesiones. El formato general de cada sesión consistió en la presentación de comunicaciones orales de 10 minutos cada una, seguidas de una conferencia invitada de 30 minutos que precedió a un coloquio relacionado con la temática de la sesión siendo coordinada por el/la presidente/a de cada una de la sesiones desarrolladas. La primera de ellas, presidida por la profesora Elvira Gómez (Universidad de Barcelona), se inició con la bienvenida y apertura realizada por el presidente del Grupo de Electroquímica el profesor Vicente Montiel. A continuación, se presentaron cinco comunicaciones orales y una conferencia invitada impartida por el profesor Enrique Herrero (Universidad de Alicante) que plantearon nuevos desarrollos en el campo del diseño de procesos electroquímicos desde el punto de vista fundamental. La segunda sesión presidida por el profesor José Manuel Pingarrón (Universidad Complutense de Madrid) se centró en la presentación de los nuevos avances en el campo de los sensores y biosensores electroquímicos; se desarrolló mediante 6 comunicaciones orales y una conferencia invitada impartida por la profesora Paloma Yáñez-Sedeño (Universidad Complutense de Madrid). Por último, y bajo la presidencia del profesor Manuel Rodrigo (Universidad de Castilla-La Mancha), se presentaron contribuciones relacionadas con la aplicación de la electroquímica



Asistentes al simposio NRELECT.

en el medioambiente y en la obtención y empleo de la energía; tres presentaciones *flash* de pósteres seguidas de cinco comunicaciones orales y una conferencia invitada impartida por el profesor Enric Brillas (Universidad de Barcelona). Además de las sesiones se presentaron una serie de comunicaciones mediante distintos pósteres.

Remitido por: **Vicente Montiel**,
Universidad de Alicante.

Simposio de “Química en la frontera con la biología” (QBIO)

El simposio QBIO contó con 12 conferencias invitadas, 8 conferencias seleccionadas, 6 comunicaciones orales, 24 comunicaciones *flash* y 48 carteles. Como conferenciantes invitados se contó con los profesores L. Brunsveld (Universidad Técnica de Eindhoven), T. Ward (Universidad de Basilea) y L. Banci (Universidad de Florencia) cuya participación fue patrocinada por Janssen-Cilag y los Grupos Especializados de Química Biológica y RMN, respectivamente, así como con C. Barbas (USP-CEU), F. Díaz (CIB-CSIC), J. Granja (USC), V. Guallar (BSC-CNS), I. Haro (IQAC-CSIC), M. C. Jiménez-Molero (UPV), J. Mareque (CIC biomaGUNE), J. Rojo (IIQ-CSIC) y A. Somoza (IMDEA Nanociencia). Las contribuciones abarcaron diversos aspectos relacionados con la química biológica, cubriendo en gran medida las características multidisciplinarias de esta área científica. Los ponentes disertaron sobre reconocimiento molecular, diseño de fármacos, glicobiología, nanociencia, metabolómica, química computacional, péptidos, productos naturales y fotoquímica, en el contexto amplio de la frontera entre la química y la biología, mostrando así distintos abordajes, protocolos y métodos para el entendimiento y la manipulación de procesos biológicos relevantes.

El Grupo Especializado de Química Biológica concedió dos premios a las dos mejores comunicaciones *flash* (Anna Laromaine del ICMB-CSIC y Nuria Rodríguez de la USC) y un premio al mejor cartel (Alfonso Latorre del IMDEA Nanociencia).



Premiados por el Grupo Especializado de Química Biológica (de izquierda a derecha): Nuria Rodríguez, Anna Laromaine y Alfonso Latorre.

Desde el comité organizador local, se contó con la coordinación de Ignacio Fernández del Olmo y los voluntarios Esther Santos (UNICAN), César Martínez (UAM) y Ricardo Abejón (UNICAN), que estuvieron “al pie del cañón” en todo momento.

Remitido por: **Sonsoles Martín-Santamaría**,
Universidad CEU San Pablo.

Evento satélite “Institutos de investigación” (ES-INSINV)

El evento satélite “Contribuciones de la Química a la sociedad. El papel de los institutos de investigación como fuente de empleo cualificado” contó con la presencia de los ponentes Miquel Pericás (ICIQ), Fernando Cossío (IKERBASQUE), María Vallet-Regí (UCM) y Jesús Santamaría (Instituto de Nanociencia de Aragón). Los ponentes, moderados por S. Martín-Santamaría (USP-CEU), departieron sobre distintos modelos de gestión y de investigación eficaces, haciendo énfasis en las posibilidades de trabajo que pueden ofrecerse a los jóvenes investigadores y en la evolución y diseño de su carrera científica. Se comparó la gestión pública frente a la privada, resaltando las ventajas y posibles inconvenientes de los modelos extremos y de posibles soluciones intermedias. Entre otros aspectos, se destacó la importancia de disponer de modelos ágiles de captación y retención de talento investigador. También se resaltó la importancia de trabajar en colaboración para compartir recursos y permitir el abordaje de problemas desde distintas disciplinas y, finalmente, se lanzó un mensaje de estímulo para los jóvenes: el cambio ha venido muchas veces del empuje y avance de personas concretas.

Remitido por: **Sonsoles Martín-Santamaría**,
Universidad CEU San Pablo.



De izquierda a derecha, Miquel Pericás, Fernando Cossío, Sonsoles Martín-Santamaría, Jesús Santamaría y María Vallet-Regí.

Simposio “Nanociencia y nanotecnología” (NANO)

El simposio de nanociencia y nanotecnología ha contado con 244 investigadores interesados en este tema multidisciplinar. El simposio transcurrió durante tres días contando con seis sesiones. Se impartieron 13 conferencias invitadas por expertos de reconocido prestigio nacional e internacional, además de 29 comunicaciones orales y 12 comunicaciones *flash*. Asimismo, se presentaron 45 carteles. Cabe destacar el alto grado de participación en todas las sesiones con aulas llenas e intervenciones en prácticamente todas las comunicaciones presentadas. No cabe duda de que una de las razones del éxito de este simposio es la amplia interdisciplinariedad y transversalidad que se le ha conferido; englobando aspectos sintéticos de nanomateriales y una amplia gama de aplicaciones relevantes que van desde su utilización como materiales, para el almacenamiento eficiente de energía, hasta el diseño de dispositivos de (bio)sensorización. Buena prueba de ello son los temas tratados en algunas de las conferencias invitadas: “*Aryl extended calix[4]pyrrole scaffolds in supramolecular chemistry*”, “*Dendrimers-modified solid supports towards nanostructured materials for clinical diagnostics*”, “*Evolución morfológica y óptica de nanopar-*

tículas de oro recubiertas de plata”, “*Fotocatalizadores para combustibles solares*”, “*Porphyrin nanostructures on surfaces and chiral assemblies in solution*”, “*Gated silica mesoporous materials for controlled release and sensing applications*”, “*Nanomateriales híbridos para el diseño de biosensores electroquímicos*”, “*Nanoscale metal-organic frameworks synthesis and assembly in the air and on surfaces*”, “*Synthesis of metallic nanoparticles: assembly based on coordination chemistry and development of enzyme-nanoparticle hybrid systems*” o “*Large scale ab-initio simulations in nanoscience*”.

Por otra parte, dentro del simposio se procedió a la entrega del premio Lilly al Dr. Juan Luis Delgado (IMDEA-Nanociencia), que impartió la conferencia titulada “*Nuevos materiales orgánicos para la preparación de dispositivos fotovoltaicos*”. Asimismo, la presidenta del grupo especializado de Nanociencia de la RSEQ, la Dra. Ángela Sastre, hizo entrega, en el marco del simposio, de los premios del grupo.

Remitido por: **José Manuel Pingarrón**,
Universidad Complutense de Madrid.

Evento satélite “Productos naturales, sondas moleculares en sistemas biológicos” (ES-PRONAT)

Durante este evento se hizo entrega de los premios GEPRONAT 2012 del Grupo Especializado de Química de Productos Naturales de la RSEQ, en su segunda edición. Estos premios pretenden apoyar y promover la investigación científica de calidad en el área de productos naturales, así como premiar la labor científica individual de sus investigadores que por su trayectoria científica de excelencia hayan destacado en la investigación en algunas de las facetas de la química y de la transferencia de tecnología al sector industrial en química de productos naturales. Además, se premia a jóvenes investigadores que destacasen por su labor científica en España o en estancias en centros internacionales de investigación.

Las tres modalidades de los premios de investigación GEPRONAT 2012 son: excelencia en la investigación en productos naturales; transferencia tecnológica al sector empresarial y creación de empresas de base tecnológica; y al investigador novel en química de productos naturales.

Tras la apertura del acto por parte del Sr. Presidente del Grupo Especializado, el Secretario del Grupo, D. José Javier Fernández Castro, realizó una semblanza de los premios GEPRONAT 2012, dando lectura de los aspectos más destacados de los currículos de los galardonados. A continuación, se entregaron las correspondientes medallas de plata del GE de Química de Productos Naturales de la Real Sociedad Española de Química.

El premio joven investigador en química de productos naturales fue otorgado a la Dra. Ana Raquel Díaz-Marrero, de la Universidad de La Laguna, Tenerife. La Dra. Díaz-Marrero se doctoró en 2003, obteniendo el premio a la mejor tesis leída en la Facultad de Química y el premio extraordinario de la Universidad de La Laguna en la división de Ciencias Experimentales y Técnicas. Posteriormente, como becaria posdoctoral MECD/Fullbright, realizó una estancia, en el grupo del profesor Raymond J. Andersen, en la Universidad de British Columbia, Canadá. A lo largo de su trayectoria profesional ha publicado 44 artículos científicos y dos capítulos de libro, ha codirigido una tesis doctoral y participa en la codirección de otras 3 tesis doctorales y un trabajo de máster.

El premio a la transferencia de tecnología al sector empresarial recayó en el profesor Emilio Molina, de la Universidad de Almería, por su contribución al desarrollo de biodiésel y ácidos grasos en general a partir de microalgas. Es responsable del grupo de investigación de Biotecnología de Microalgas Marinas desde su creación en 1992 (grupo que ha recibido el premio de investigación 2007, por la transferencia de conocimiento a las compañías del sector biotecnológico, de la Fundación Mediterránea, Consejo Social de la Universidad de Almería). Ha dirigido 18 tesis doctorales y es coautor de 196 artículos científicos, 15 capítulos de libros y de 11 patentes de invención.

Por último, el premio a la excelencia en investigación en esta segunda edición de los premios GEPRONAT 2012



Participantes en el evento ES-PRONAT.



Los premiados y parte de la junta de gobierno del GEPRONAT.

le correspondió al profesor Luís Castedo, de la Universidad de Santiago de Compostela, por su dilatada carrera investigadora en química orgánica y por ser artífice de la creación de la escuela compostelana de química de productos naturales. La ingente labor investigadora desarrollada por el profesor Castedo ha dado como resultado la realización de 78 tesis doctorales, la publicación de cerca de 500 artículos científicos y de varios capítulos de libros. Así mismo ha sido galardonado con varios premios, entre ellos, la Medalla de Investigación de la RSEQ, la Medalla de Honor del Instituto Universitario “Antonio González” de la Universidad La Laguna y el prestigioso Premio Galicia de Investigación 2003 “Antonio Casares y Rodrigo”, siendo nombrado además Dr. *Honoris Causa* por la Universidad del País Vasco en 2009.

El acto se cerró con la intervención del Presidente del Grupo Especializado.

Remitido por: **Isidro González-Collado**,
Presidente del GE de Química de Productos Naturales.

Simposio “Síntesis orgánica” (SIN)

Con un total de seis sesiones científicas durante los días 16 y 17 de septiembre, en el simposio de Síntesis Orgánica se han impartido 12 conferencias invitadas, tres de ellas por los profesores extranjeros Yujiro Hayashi (Tohoku University), Jean Suffert (Université de Strasbourg) y Walter Leitner (Aachen University), 10 comunicaciones orales cortas, 25 comunicaciones *flash* y 37 pósteres.

El simposio ha cubierto los distintos ámbitos de la síntesis orgánica. En él se han presentado resultados relevantes en el desarrollo de nuevas metodologías de síntesis, y en los campos de la síntesis de productos naturales y de compuestos bioactivos o de interés estructural. Se ha prestado especial atención a la síntesis enantioselectiva mediante organocatálisis o mediante el uso de auxiliares

quirales, y a la utilización de catalizadores, tanto metálicos como no metálicos, en procesos sintéticos. Se han discutido procesos de química sostenible, que generan un menor impacto medioambiental, tales como, reacciones en agua o secuencias sintéticas en las que se utiliza el concepto de “*pot economy*”. Se han presentado también ciertos tipos de dendrímeros y de péptidos modificados de potencial interés en biomedicina, así como estudios de reconocimiento molecular.

Un aspecto altamente estimulante, que merece ser destacado, ha sido la elevada participación de jóvenes investigadores y la masiva asistencia a todas las sesiones.

Remitido por: **Joan Bosch**,
Universidad de Barcelona.

Simposio “Educación en química” (ED-Q)

En el marco de la XXXIV Reunión Bienal de la RSEQ celebrada en Santander, tuvo lugar un simposio específico dedicado a la Educación en Química. Dicho simposio, con estructura de mesa redonda, se dividió en dos sesiones tituladas “La Ingeniería Química y la Química en la Ingeniería” y “Los estudios de Química”.

En la primera sesión intervinieron un total de cinco ponentes. En primer lugar, se abordó el estado actual de los estudios de ingeniería química en España así como sus excelentes perspectivas de futuro, destacando la importancia de que el graduado tenga la mayor versatilidad posible. Seguidamente, se presentó la evolución de los estudios de química en los estudios de ingeniería de telecomunicaciones, biomédica, aeronáutica e industrial en diversas escuelas. Se evidenció la necesidad de mantener y reforzar la presencia de la química en dichas titulaciones como elemento esencial para la empleabilidad y desarrollo profesional de los ingenieros del futuro. Adicionalmente, se plantearon cuestiones de relevancia como la necesidad de hacer más atractivos los contenidos, la actual estructura de los grados y la conveniencia del actual número de centros que imparten similares titulaciones en España.

En la segunda sesión intervinieron dos ponentes. En ambas intervenciones se destacó el imprescindible papel que la química ha jugado, juega y seguirá jugando en el desarrollo de la sociedad actual y de cómo su estudio riguroso en las titulaciones de ciencias es capaz de formar a los profesionales del mañana.



Ponentes y asistentes en la primera mesa redonda del simposio.

Al término de la sesión tuvo lugar un turno de debate con los asistentes, destacando entre otros puntos, una estructura de grado y máster asimilable a la europea, la necesidad de racionalizar los estudios de ciencias en España, y la importancia de la divulgación de la química, no sólo en secundaria sino en edades más tempranas, como un mérito más a valorar en los currículos de los investigadores.

Remitido por: **Antonio Domínguez-Ramos**,
Universidad de Cantabria.

Evento Satélite “Innovación y empleo para jóvenes investigadores” (ES-INNJOV)

Este evento satélite se articuló en torno a la mesa redonda titulada “Opciones de innovación y empleo para jóvenes investigadores”, en la que participaron como conferenciantes invitados el profesor Carlos Negro (presidente del Foro Química y Sociedad), la profesora Pilar Goya (miembro de la Comisión de Ética del CSIC), el profesor Javier García-Martínez (cofundador de *Rive Technology*) y el profesor Manuel Galán (fundador de las empresas Carbueros Europe y Bionaturis).

Durante el transcurso de la mesa redonda, el profesor Carlos Negro destacó el importante papel del sector químico en España, al generar más de 500.000 empleos directos e inducidos y representar el 11% del PIB industrial. Además, se caracteriza por ser un sector altamente innovador, al concentrar una cuarta parte de la inversión en I+D+i de la industria española y el 10% del total de tesis leídas en nuestro país. Asimismo, se destacó que los profesionales químicos pueden trabajar en multitud de sectores (alimentación, aeronáutico, energético..., además del químico y farmacéutico tradicionales), por lo que la interdisciplinariedad es fundamental en el ejercicio de su trabajo. Finalizó su intervención resumiendo los principales resultados alcanzados por el portal de empleo del Foro Químico y Sociedad (www.laboris.net/quimica/), único específico del sector en la actualidad.

A pesar del desfavorable contexto económico actual, los profesores Javier García Martínez y Manuel Galán señalaron al emprendimiento como una oportunidad muy interesante para aquellos profesionales que, contando con capacidad, conocimiento y esfuerzo, no encuentran empleo como trabajadores por cuenta ajena. Durante las presentaciones de las empresas que estos profesores fundaron, se insistió en la necesidad de contar con un plan de negocio sólido y que genere la confianza suficiente para permitir obtener financiación suficiente para superar el “Valle de la Muerte” (período



Ponentes y organizadores del ES-INNJOV.

inicial de toda empresa en que su flujo de caja es negativo) y consolidarse.

Por su parte, la profesora Pilar Goya comentó la importancia de las buenas prácticas científicas para el desarrollo de la carrera de cualquier investigador, por lo que la presión para la obtención de resultados nunca debería inducir a malas prácticas científicas (FFP: falsificación, fabricación de datos y plagio). Se estima que un 2% de los trabajos de investigación adolecen de FFP siguiendo una tendencia creciente durante los últimos años. Para luchar contra este fraude, la Dra. Goya informó que en numerosos países y organismos se han desarrollado códigos de buenas prácticas, y se han organizado ya tres congresos mundiales sobre integridad en la investigación.

Remitido por: **Carlos Negro**,
Universidad Complutense de Madrid y Foro Química y Sociedad.

Simpósio “Estructura y reactividad: de la teoría al experimento” (ESTR)

La comprensión, mejora y desarrollo de procesos químicos es, cada vez más, una temática transversal, que rompe las tradicionales barreras del pasado siglo entre distintos campos de la química. En esta nueva perspectiva, el modelaje y la simulación computacionales se dan la mano con un amplio espectro de técnicas experimentales con el fin de obtener una descripción detallada, a nivel molecular, de las especies presentes en un medio de reacción y de sus transformaciones. Poner de manifiesto esta multilateralidad, reuniendo a investigadores de distintos campos, ha sido el objetivo del simposio “Estructura y reactividad: de la teoría al experimento” que ha tenido lugar en el marco de la XXXIV Reunión Bienal de la RSEQ. El simposio ha reunido a químicos computacionales, con una larga experiencia en investigación colaborativa con grupos experimentales, con químicos experimentales orgánicos e inorgánicos, y especialistas en técnicas como la espectroscopia de masas de ionización por electrospray, la resonancia magnética nuclear y la fuente de luz sincrotrón. La reunión ha mostrado, en un ambiente participativo y de franca discusión, la



Sesión del simposio ESTR.

potencialidad de un enfoque multilateral en el estudio de la reactividad química.

Remitido por: **Agustí Lledós**,
Universidad Autónoma de Barcelona.

Noticias de las Secciones Territoriales y Grupos Especializados

Convocatoria de premios PREMIOS GEPRONAT 2013 del GE de Química de Productos Naturales

Se convocan los Premios 2013 del Grupo Especializado Química de Productos Naturales, Premios GEPRONAT 2013, en las siguientes modalidades: **premio a la investigación en química de productos naturales**, para premiar la labor científica individual de investigadores, por su trayectoria científica de excelencia en química de productos naturales; **premio a investigadores noveles del GE de Química de Productos Naturales**, para premiar la labor científica de jóvenes investigadores, menores de 40 años, que hayan destacado por su labor científica en España o en estancias en centros internacionales de investigación; y **premio a la transferencia de tecnología al sector industrial**

y a la creación de EBTs, para premiar trayectorias científicas relevantes de investigadores, en el área de productos naturales, cuyos resultados de investigación hayan sido transferidos al sector industrial o hayan dado lugar a empresas de base tecnológica consolidadas en el sector industrial nacional o internacional.

Las propuestas de candidatos deberán enviarse al GEPRONAT hasta el 15 de Noviembre de 2013, preferiblemente por correo electrónico a jjfercas@ull.es o isidro.gonzalez@uca.es.

Remitido por: **Isidro González-Collado**,
Presidente del GE de Química de Productos Naturales.

VI Reunión Química Orgánica del Mediterráneo (VI REQOMED)

Entre los días 19-21 de Junio tuvo lugar en Granada la sexta edición de REQOMED con la participación de alrededor de 130 investigadores de España y diferentes países del arco mediterráneo y América. Las sesiones científicas se celebraron en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Granada y hubo doce conferencias invitadas. La Dra. Duñach (Universidad de Niza, Francia) expuso resultados sobre procesos de ciclación catalizados por superácidos de Lewis, con aplicaciones en la construcción de moléculas olorosas de interés en Perfumería. El Dr. Pérez-Inestrosa (Universidad de Málaga) habló de la síntesis de nuevos dendrímeros y sus posibles aplicaciones médicas. El Dr. Pischel (Universidad de Huelva) contó sus experiencias en el empleo de cucurbiturilos y su asociación con diferentes moléculas buscando aplicaciones en la liberación de fármacos, sensores etc. El Dr. Caballero (Universidad de Murcia) presentó los últimos avances en la utilidad del enlace de halógenos en la construcción de diferentes entidades moleculares de interés. El Dr. Gonzalo Blay (Universidad de Valencia) presentó la puesta a punto de procesos catalíticos de alquilación asimétrica de enonas. La charla del Dr. Sansano (Universidad de Alicante) versó sobre la síntesis asimétrica de pirrolidinas quirales con actividad antiviral C, mediante cicloadiciones 1,3-dipolares. La Dra. Pla-Quintana (Universidad de Gerona) disertó sobre nuevos avances en ciclaciones [2+2+2] catalizadas por Rh acompañado con ligandos del tipo de los fosforamiditos que mejoran enantioselectividades. La conferencia del Dr. Casas-Solvas (Universidad de Almería) trató sobre la preparación de neoglicoconjugados basados en ciclodextrinas, dendrímeros y nanopartículas. El Dr. Macías Sánchez (Universidad de Cádiz) expuso los resultados de la utilización del sesquiterpene cariofileno en ciclaciones-reordenamientos hacia moléculas con actividad antifúngica contra *Botrytis cinérea*. La Dra. Díaz (Universidad de Tarragona) comentó los avances de procesos catalizados por metales de transición en la síntesis de productos naturales. El Dr. Shafir (Universidad Autónoma de Barcelona e ICIQ Tarragona) presentó nuevas aplicaciones del PIFA en diferentes acoplamientos carbono-carbono. Finalmente el Dr. García-Granados expuso sus experiencias en la transferencia de tecnología y la problemática de la burocracia legal, para la puesta en marcha de empresas de base tecnológica.



Participantes en el VI REQOMED.



Entrega de premios Sigma-Aldrich a los mejores pósteres del VI REQOMED (los premiados están en la fila superior).

Además, el programa científico se completó con 21 comunicaciones orales y más de 80 comunicaciones en formato póster. Los comités científico y organizador seleccionaron los seis mejores carteles que recibieron sendos premios subvencionados por la firma Sigma-Aldrich en la sesión de clausura. Paralelamente el programa de actividades lúdico-sociales llevó a los participantes a una visita guiada por el Albaicín que finalizó con una copa de bienvenida en el incomparable

marco del antiguo convento de Santa Paula, además se celebró una cena en el Palacio de los Córdovas ubicado junto al río Darro, amenizada por un espectáculo flamenco en directo.

Desde el Comité Organizador agradecemos las ayudas recibidas desde los grupos especializados de Química Orgánica y Productos Naturales y de la sección territorial de Granada de la RSEQ, de la Facultad de Ciencias, del Departamento de Química Orgánica, el Instituto de Biotecnología y el Vicerrectorado de Política Científica e Investigación de la Universidad de Granada,

del Excelentísimo Ayuntamiento de Granada y de Sigma-Aldrich. Agradecemos igualmente la participación y deseamos manifestar que esta reunión científica gestada hace años en la Universidad de Alicante por el Dr. Miguel Yus se ha consolidado plenamente y ofrece un marco complementario al de otras reuniones como las de la Real Sociedad Española de Química.

Remitido por: **Alejandro Fernández Barrero**,
Universidad de Granada,
Presidente del Comité Organizador VI REQOMED.

XXXIV Reunión del Grupo de Electroquímica de la RSEQ y XV Encuentro Ibérico de Electroquímica

La XXXIV Reunión del Grupo de Electroquímica de la RSEQ (GE-RSEQ) y el XV Encuentro Ibérico de Electroquímica tuvieron lugar entre el 15 y el 17 de julio de 2013 en la Universidad de Valencia (Fundación Universidad-Empresa ADEIT), contando con la asistencia de 200 participantes. La reunión fue organizada por el profesor Francisco Vicente Pedrés (Presidente) y el Dr. José Juan García Jareño (Secretario).

La apertura de la reunión fue presidida por el rector de la Universidad de Valencia. La reunión se organizó en cuatro simposios paralelos con la presentación de 18 comunicaciones invitadas, 82 comunicaciones orales y 82 carteles. Se impartieron conferencias plenarias por los profesores Mirna Urquidi-Macdonald (USA), Artur J. M. Valente (Portugal), H. Perrot (Francia) y Digby D. Macdonald (USA).

Se celebró la asamblea general del grupo especializado en la que se informó sobre la gestión de la nueva página web, se aprobó el Reglamento del grupo adaptado a la nueva normativa de la RSEQ y se entregó el premio al ganador del concurso para el logotipo del grupo y que ha recaído en D. Manuel Montiel Argaiz del departamento de Química Física de la Universidad de Barcelona. Asimismo el Dr. Álvaro Colina Santamaría, como miembro del comité organizador de la próxima XXXV Reunión

del Grupo, informó sobre el futuro encuentro del próximo año 2014 en la ciudad de Burgos. Se entregaron los premios CIDETEC 2012 (ver siguiente reseña).

Durante el desarrollo de la reunión, tuvo lugar la defensa de los proyectos de tesis del programa interuniversitario de doctorado “Electroquímica. Ciencia y Tecnología” y la defensa de los “trabajos fin de máster (TFM)” de la primera promoción del máster interuniversitario “Electroquímica. Ciencia y Tecnología”.

También es de destacar el Foro “La Electroquímica en la Industria” (Mesa Redonda sobre “Formación, Producción, Investigación), en el que intervinieron 12 ponentes (empresas, centros tecnológicos y centros públicos de investigación).

La Junta directiva y el presidente del comité organizador de la reunión quieren agradecer a todos los asistentes la participación y el espíritu de colaboración que ha existido durante la reunión. Queremos trasladar nuestro reconocimiento a nuestros patrocinadores IK4 Cidetec, Gomensoro y Trallero and Schelle. Pueden seguirnos a través de nuestra página web <http://rsequelectroquimica.com/>

Remitido por: **Junta directiva del Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ.**



Participantes en el congreso.

La excelencia en ELECTROQUÍMICA premiada por los IX Premios CIDETEC 2012

El profesor D. Antonio Aldaz Riera y el investigador D. Paramaconi Rodríguez Pérez fueron galardonados con los IX premios CIDETEC, entregados por el director general del centro tecnológico vasco IK4-CIDETEC, el Dr. F. Javier Rodríguez, en el seno de la XXXIV Reunión del Grupo especializado de Electroquímica de la RSEQ y XV Encontro Ibérico de Electroquímica celebrado en Valencia del 15 al 17 de Julio.

El profesor Antonio Aldaz, miembro del departamento de Química Física y del Instituto Universitario de Electroquímica de la Universidad de Alicante, recibió los 6.000 euros, el trofeo y el diploma acreditativo del premio CIDETEC 2012 en la modalidad de *Trayectoria Científica en Electroquímica*. El jurado, compuesto por siete expertos en la materia, decidió premiar su amplia y destacada trayectoria científica en el área de la electroquímica. Asimismo, fue entregado el Premio CIDETEC 2012 en la modalidad de *Investigación Científica en Electroquímica*, dotado con 6.000 euros y diploma acreditativo, al Dr. Paramaconi Rodríguez, actualmente en la *School of Chemistry* de la Universidad de Birmingham, por el artículo: "The promoting effect of adsorbed carbon monoxide on the oxidation of alcohols on a gold catalyst" publicado en la revista *Nature Chemistry* **2012**, *4*, 177–182. Ambos premiados impartieron sendas conferencias después de la entrega de los premios.

Los premios CIDETEC se han convertido en un referente de la excelencia en la electroquímica española y en una seña de identidad de las actividades del grupo especializado de Electroquímica de la RSEQ. En este sentido, hay



De izquierda a derecha: el Dr. F. Javier Rodríguez, Director General de IK4-CIDETEC; el Dr. Antonio Aldaz; el Dr. Paramaconi Rodríguez; el Dr. Enric Brillas, Presidente del jurado evaluador de los premios y el Dr. Vicente Montiel, Presidente del GE de Electroquímica de la RSEQ.

que señalar que ya ha sido convocada la X edición de los Premios CIDETEC de Investigación Científica y de Jóvenes Investigadores en su edición 2013. La convocatoria se puede consultar en <http://www.cidetec.es/cas/index.aspx> y <http://rsequelectroquimica.com/>

Remitido por: **Junta directiva del Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ.**

Premio "Marcial Moreno Lectureship" para jóvenes investigadores de la ST de Cataluña



Dr. Cramer.

El primer premio de la sección catalana de la RSEQ (RSEQ-CAT) "Marcial Moreno Lectureship" para jóvenes investigadores de hasta 40 años ha sido concedido a Nicolai Cramer (*Laboratory of Asymmetric Catalysis and Synthesis*, EPFL, Lausanne). Nicolai Cramer impartirá dos conferen-

cias sobre "Asymmetric C-H Functionalizations: A Quest for Efficient Ligand Systems" en diciembre con motivo de recibir este premio. La primera tendrá lugar el jueves día 12 en el ICIQ (Tarragona) y la segunda el viernes día 13 en el *Institut de Recerca Biomèdica/Departamento de Química Orgànica de la Universitat de Barcelona*.

Nicolai Cramer estudió química en la Universidad de Stuttgart y en 2005 obtuvo el doctorado en la misma universidad bajo la dirección del profesor S. Laschat. Después de una estancia en la Universidad de Osaka, se incorporó al grupo del profesor B. M. Trost en la Universidad de Stanford como investigador postdoctoral en 2006. En el periodo 2007-2010 trabajó en el ETH Zurich (asociado del profesor E. M. Carreira) donde consiguió la habilitación. Desde el año 2010 ocupa su posición actual en la EPF-Lausanne. Su investigación abarca las transformaciones enantioselectivas catalizadas por metales y su implementación para la síntesis de moléculas con actividad biológica.

Remitida por: **Antonio Echavarren**,
Presidente de la ST de Cataluña.

Educación

Ciencia en acción



Estudiantes y alumnos del IES Bezmiliana (El Rincón de la Victoria, Málaga) durante una demostración de química.

El fin de semana del 4 al 6 de octubre se celebró la fase final de la decimocuarta edición del concurso Ciencia en Acción. Tuvo lugar en el Paraninfo de la Universidad del País Vasco en Bilbao, donde se dieron cita más de 500 participantes que hicieron las más de 100 demostraciones seleccionadas como finalistas en las 17 modalidades en las que se divide el concurso. Entre estas modalidades, podemos mencionar materiales didácticos, puesta en escena, demostraciones prácticas en matemáticas, física, geología, tecnología, biología, sostenibilidad y química.

Como es habitual, las actividades fueron seguidas por numeroso público. Durante el certamen también se contó con dos conferencias. La inaugural fue impartida por Jesús Etcheverry y trató sobre *La magia y la ciencia*, incluyendo diversas números de ilusionismo, tanto del ponente como de magos colaboradores. La conferencia de clausura, *A graduate student's story*, fue excepcional. Fue impartida por una gran científica, Jocelyn Bell, la primera persona que detectó un púlsar, cuando realizaba la tesis doctoral con el profesor Hewish (Premio Nobel de Física, 1974, por el descubrimiento de los púlsares). En su conferencia, la Dra. Bell expuso sus vivencias de estudiante de doctorado, antes y después del gran hallazgo. Sin duda, Jocelyn Bell dio una gran lección científica al joven público asistente.

Aunque en Bilbao se celebró la fase final, el concurso empezó a principios del año en curso; a través de una fase previa en la que se seleccionan a los participantes en la fase final. En esta edición del concurso, la RSEQ ha participado por primera vez como entidad colaboradora con una pequeña aportación económica y proponiendo personas para los jurados. En la fase previa, las personas propuestas por la RSEQ fueron Héctor Busto, Javier García-Martínez, Juan Manuel Gutiérrez-Zorrilla, Bernardo Herradón, Juan José Iruín, Inés

Pellón, Pascual Román, César Tomé, Daniel Torregrosa, y Paloma Yáñez-Sedeño; que formaron parte de diversos jurados, aparte del específico de química.

En la fase final, estuvieron varios miembros de la RSEQ: Héctor Busto (en la modalidades de matemáticas, y física y sociedad), Pascual Román (en la modalidad de puesta en escena) y Bernardo Herradón, Juan José Iruín e Inés Pellón (en la modalidades de química, biología, y sostenibilidad). Este último jurado, presidido por Bernardo Herradón, también contó con Marta Saloña (UPV), Sergio López (Antares) y Javier Ramírez (CosmoCaixa).

En los últimos años, el número de participantes en la modalidad de química y la calidad de las demostraciones ha aumentado espectacularmente. En esta fase final hubo 11 demostraciones de química y fue realmente complicado elegir a los ganadores, todos ellos presentando actividades divulgativas y de gran valor didáctico. Se concedieron dos primeros premios y dos menciones de honor, que recayeron en:

- Primer premio: **Tinta magnética adhesiva**. Presentado por Margarita Merida (*Agrupamento de escolas de azambuja, Lisboa*). Por su originalidad con varias actividades de valor formativo, como la obtención de la caseína de la leche y el empleo de colorantes naturales cuyo color varía con el pH; planteado como un proyecto de investigación. Los experimentos se pueden repetir sin dificultad y las explicaciones son adecuadas.
- Primer premio: **Jugando con la tabla periódica**. Presentado por Antxon Anta (Colegio Alemán, San Sebastián). Es un trabajo realizado por estudiantes que, de manera original, didáctica y atractiva, explican el sistema periódico, uno de los conceptos fundamentales en química. También se destaca que han abordado aspectos relacionados con la seguridad y medio ambiente.
- Mención de honor: **Química en el arte**. Presentado por Fina Guitart (CESIRE-CDEC, Barcelona). Usando como hilo conductor la ciencia que hay en el trabajo artístico y en su identificación, se ha hecho un trabajo muy completo, homogéneo, coherente con valor didáctico; que permite enseñar muchos conceptos de química.
- Mención de honor: **Iones y electrones**. Presentado por Josep M. Valls (*Escola Pia Nostra Senyora, Barcelona*). En la que se expone una colección de experimentos de electroquímica, una parte de la química que a los alumnos les cuesta entender. Son demostraciones sencillas, realizadas con materiales al alcance de todos y que proporcionan resultados muy evidentes. Las experiencias se explican de un modo muy riguroso, con alto valor formativo.

Remitido por: **Bernardo Herradón**, RSEQ.

¡Una tabla con mucha química!

Piedra Rosetta de la naturaleza, en palabras de Rudy Baum, editor de *Chemical & Engineering New*. *La compilación del conocimiento más compacta y significativa que el hombre haya elaborado*, según el astrónomo Harlow Shapley. La tabla periódica es el icono por excelencia de la química y de los químicos.

Durante las últimas semanas, desde nuestras cuentas de Facebook (<http://cort.as/609w>) y Twitter (@RSEQUIMICA), se propuso compartir distintas tablas periódicas entre toda la comunidad química, que demostró ser muy activa en las redes sociales, llegando a recibirse más de 60 tablas periódicas de todo tipo, desde cortinas de baño, tazas y delantales a tablas con muestras de elementos químicos reales.

Además, gracias a la comunidad virtual de apasionados de la química hemos podido recoger tablas periódicas de varias ciudades y de distintos países. Desde México a Australia, pasando por Reino Unido y por distintas ciudades españolas, hemos podido viajar con la tabla periódica.

Puedes leer más sobre la tabla periódica y las aportaciones de nuestros seguidores en redes sociales en el post *Breve historia de la Tabla Periódica: Del cuaderno de Lavoisier a Twitter* publicado por Bernardo Herradón (@QuimicaSociedad) y Luis Moreno (@luisccqq) en el blog *El cuaderno de Calpurnia Tate*.



La tabla periódica en objetos de la vida cotidiana.



Tabla periódica en diversos lugares del mundo.

Remitido por: **Luis Moreno-Martínez** (Universidad Complutense de Madrid) y **Bernardo Herradón** (RSEQ)



Grupo Especializado de Química Biológica
Real Sociedad Española de Química

2nd Meeting of the RSEQ Chemical Biology Group
First Announcement

Date: February 4-5, 2014.
Venue: Paraninfo de la UPV/EHU. Av. Abandoibarra 3. 48009 Bilbao.

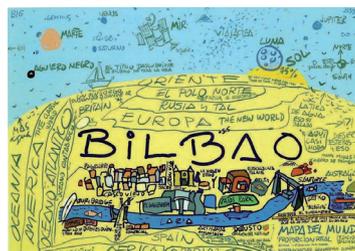
The Spanish Chemical Biology Group will celebrate its 2nd society meeting in **Bilbao the 4 and 5 of February (2014)**. The meeting will bring together a panel of outstanding researchers in the field of chemical biology. The scientific program will be completed with oral communications selected from the submitted abstracts. In a near future, more information will be available at the group's web page (www.quimicabiologica.es). You can also contact with Oscar Millet (omillet@cicbiogune.es), anytime.

The 2nd Meeting of the RSEQ Chemical Biology Group will be coordinated with the XIV Iberian Peptide Meeting (Bilbao, February 5-6 of 2014).

Looking forward to meet you in Bilbao!
Oscar Millet

Invited Speakers

- Teresa Carlomagno, EMBL Heidelberg**
- Ernest Giralt, IRB Barcelona**
- Tim Liedl, LMU Munich**
- Daniel Müller, ETH Zurich**
- Leonardo Pardo, UAB Barcelona**
- Kevin Plaxco, UCSB Santa Barbara**
- Manuel Serrano, CNIO Madrid**
- Nicolas Winssinger, Univ. Genève Ginebra**



Olimpiada Internacional de Química (IChO 2013)

Este año 2013, la 45ª Olimpiada Internacional de Química (IChO), se ha celebrado del 15 al 24 de julio en la Universidad Estatal de Moscú, Rusia. El número de países participantes aumenta, llegando este año a 77. La incorporación de los nuevos países participantes requiere, según los estatutos de la olimpiada, la asistencia previa de una delegación del país solicitante, durante dos años como observador, es decir sin la participación de estudiantes. Este año han asistido delegaciones de tres países observadores que irán incorporándose en los próximos años. El equipo español estuvo formado por cuatro alumnos, David Prieto Rodríguez (del IES Doctor Fleming, Asturias), Damiá Torres La Torre (del IES Guadassuar, Valencia), Sergio Cuesta Galisteo (del colegio Joyfè, Madrid), y Felipe Cano Córdoba (del Colegio Sant Pere, Islas Baleares).

El examen consistió, como es habitual, en una parte teórica con ocho problemas; y otra, de laboratorio. Cada parte tuvo cinco horas de duración. El examen de laboratorio consistió en la realización de dos prácticas, una de química orgánica y otra de química física. Esta última práctica requirió la realización de medidas con un viscosímetro bastante frágil que requirió gran destreza y habilidad para su correcto manejo. El número total de estudiantes participantes fue de 291.

La ceremonia de clausura y entrega de medallas tuvo lugar en el edificio del rectorado de la Universidad de Moscú. Las cinco primeras medallas de oro correspondieron a China, China, China-Taipei, Corea y China. España consiguió dos medallas de bronce, Damiá Torres y David Prieto, y una mención de honor, Sergio Cuesta.

Hanoi (Vietnam) albergará la sede de la 46ª Olimpiada Internacional de Química, (IChO 2014), del 20 al 29 de julio del próximo año, con la participación de 80 países. Estará



De izquierda a derecha: Vicente Martí-Centelles, David Prieto, Felipe Cano, Sergio Cuesta, Damiá Cano y Nerea Iza.

organizada por la Universidad de Ciencias y la Universidad Nacional de Educación de Hanoi. La presentación de la próxima sede la realizaron el rector de la Universidad de Ciencias y el Ministro de Educación de este país. En su presentación, describieron la gran importancia de este evento humano y científico ya que consigue unir a jóvenes científicos de diferentes países, que hablan diferentes idiomas, que tienen diferentes religiones, creencias y costumbres, con un denominador común: su dedicación al estudio de la química.

La información sobre la olimpiada se encuentra en la dirección <http://bit.ly/170dSuA>, junto con once números de la revista de la olimpiada, *Catalyzer* (<http://bit.ly/1g3L09r>), que se edita durante la celebración del evento y describe las actividades diarias, comentarios, fotos y anécdotas ocurridas durante estos días. La sede de la IChO2015 será Baku (Azerbaijan).

Remitido por: **Nerea Iza**,
Universidad Complutense de Madrid.

XI Concurso de “Química, Sociedad y Medio Ambiente”

La Universidad Rey Juan Carlos celebró el pasado 13 de junio la undécima edición del Concurso de “Química, Sociedad y Medio Ambiente” en la que participaron 137 alumnos de segundo de Bachillerato, matriculados en la asignatura de Química durante el curso académico 2012-2013 en institutos y colegios de la Comunidad de Madrid y Toledo.

La prueba consistió en 45 preguntas tipo test sobre cuestiones generales de química y aspectos industriales, medioambientales y sociales relativos a la química. Todas las preguntas estuvieron relacionadas con los contenidos recogidos en el currículo oficial de la Comunidad de Madrid para la materia de Química de segundo curso de bachillerato. Las preguntas dieron más de un quebradero de cabeza a estos alumnos, que manifestaron que habían sido más complicadas que los exámenes de las pruebas de acceso a la universidad. A los alumnos de cada centro les acompañaron sus profesores, quienes pusieron en valor la oportunidad que les ofrece este concurso para expresar sus conocimientos en química y para acercar la ciencia a los estudiantes de una forma más atractiva.

La entrega de premios tuvo lugar el 24 de junio y se otorgaron a los diez mejores resultados. El concurso contempla diez premios de entre 50 y 600 euros, además de una enciclopedia para el ganador. Este año el primer premio ha



Organizadores y ganadores del concurso.

sido para Sergio Cuesta Galisteo, alumno del Colegio Joyfè de Madrid.

Este concurso está organizado por los Departamentos de Tecnología Química y Ambiental y Tecnología Química y Energética, con la colaboración del Grupo Editorial Anaya y la empresa Köttermann Systemlabor, S.A.

Remitido por: **Irene Vega**,
Universidad Rey Juan Carlos.

Año Internacional de la Cristalografía

Master en Cristalografía y Cristalización. Un master internacional recomendado por la Unión Internacional de Cristalografía (IUCr) y la Asociación Europea de Cristalografía (ECA)

El *Master en Cristalografía y Cristalización* (MCC) ofrece una visión unificada del estudio de los cristales, de sus propiedades y de sus aplicaciones en las distintas disciplinas científicas/técnicas que se consideran como “usuarias” de la cristalografía, incluyendo la química estructural, la ciencia de materiales, la biología estructural, el crecimiento de cristales, la cristalización industrial, la ingeniería química, la nanotecnología, la farmacología, la mineralogía y la física del estado sólido.

La coordinación y la enseñanza de este master está a cargo de un equipo internacional de investigadores de distintas instituciones europeas con reconocido prestigio en el campo de la cristalografía y cristalización. Más de 50 profesores de 12 países aseguran que los alumnos se encontrarán con un ambiente de marcado carácter internacional e interdisciplinario. De hecho, todo el master se imparte en inglés, incluyendo las presentaciones y trabajos de los alumnos.

La enseñanza del MCC es teórica y práctica, con un sesgo hacia la práctica y se estructura en tres módulos con contenidos coordinados.

En un primer módulo de 28 ECTS se imparten los fundamentos de la cristalografía, la cristalización, la difracción, y la resolución y refinamiento de estructuras. Estas cuatro materias básicas se imparten en Sevilla (España) de octubre a diciembre. Durante estos meses iniciales, los alumnos también aprenden a escribir artículos de investigación, a realizar presentaciones orales e informes profesionales. El quinto curso de este módulo troncal es una asignatura llamada *Cristalografía y Sociedad* donde se discuten el impacto de los avances científicos y tecnológicos de la cristalografía en la vida cotidiana. Al finalizar los cursos básicos del módulo 1, los estudiantes deciden el laboratorio europeo en el que realizarán los trabajos prácticos tutelados, el tema de su tesis de maestría y su supervisor@. La decisión se toma con la ayuda de los profesores y directores del master.

El segundo módulo de 14 ECTS consiste en una estancia de dos meses de trabajo práctico tutelado. Durante este tiempo, el alumno se integra en el trabajo diario de un laboratorio de investigación especializado en el tema de su elección.

Estos créditos se pueden tomar en un solo laboratorio (14 créditos, 2 meses) o dos laboratorios (7 créditos, 1 mes) entre los 16 laboratorios que actualmente se ofrecen en España y en otros países europeos. Durante este período el estudiante trabaja con los científicos del laboratorio en un problema práctico que será la base experimental de su tesis de maestría.

El tercer módulo (6 ECTS) incluye cursos avanzados de especialización opcionales. Los estudiantes deben elegir, siempre con la ayuda de su tutor@ y de los directores de master, dos o tres de los cursos internacionales de una semana de duración ofrecidos por el master.

La tesis de maestría de 12 ECTS implica la preparación, redacción y presentación de un proyecto de documento que contiene los resultados del trabajo de los estudiantes en los módulos 2 y 3 y una presentación oral de los mismos resultados. El trabajo escrito debe cumplir con los requisitos de calidad y las “Instrucciones para Autores” de una revista especializada en el campo, mientras que la presentación oral, seguida de una discusión abierta, se da en el formato de una reunión científica.

El Master en Cristalografía y Cristalización (MCC), así como el doctorado correspondiente están integrados en el Programa Oficial de Posgrado de la Universidad Internacional Menéndez Pelayo (UIMP) y el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), en el marco del Espacio Europeo de Educación Superior. Tiene una duración de un año académico y una valoración de 60 ECTS.

Más información se puede encontrar en la página web (<http://lafactoria.lec.csic.es/mcc>) o a través de correo electrónico. Los interesados pueden contactar con antiguos estudiantes del MCC a través de la página de Facebook (<https://www.facebook.com/groups/284546588237110/>).

Remitido por: **Fermín Otálora y Juan Manuel García-Ruiz**
Laboratorio de Estudios Cristalográficos, Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra, CSIC-Universidad de Granada;
(otalora@csic.es, juanmanuel.garcia@csic.es).

Fermín Otálora y Juan Manuel García-Ruiz son director y exdirector del MCC, respectivamente.



El Master en Cristalografía y Cristalización combina enseñanza teórica (a) y práctica, tanto en el aula (b) como en visitas a laboratorios de investigación (d) y a empresas (e). La programación del master está organizada para permitir el máximo rendimiento de nuestro excelente profesorado, y la mayor interacción con el alumnado (c).

Reunión de asociaciones de cristalógrafos italianos, españoles y suizos (MISSCA 2013)

Durante los días 9-12 de septiembre se celebró en Como (Italia) el primer *Meeting of the Italian, Spanish and Swiss Crystallographic Associations* (MISSCA 2013). Este evento, continuación de los celebrados entre el Grupo Especializado de Cristalografía y Crecimiento español (GE3C) y la Asociación Italiana de Cristalografía (AIC) en Copanello (2007) y Oviedo (2010), ha reunido a más de 200 científicos de los países organizadores y circundantes, con una asistencia importante de jóvenes investigadores. El MISSCA 2013 ha cubierto la mayor parte de las ramas de la cristalografía, desde las pequeñas moléculas hasta las proteínas y el crecimiento cristalino, teniendo muy presente las conexiones con otras áreas científicas próximas.

El congreso se organizó en torno a 12 microsímposios centrados en temáticas punteras, que se pudieron llevar a cabo al disponer de una masa crítica de participantes tras la unión de las tres asociaciones. Algunos de los títulos de los microsímposios, que citamos a continuación, nos dan idea de la multidisciplinariedad de intereses de la reunión: *Macromolecular assemblies and viruses; Structure and properties of inorganic and organic thin films; Molecular compounds and intermolecular interactions; Membrane proteins and drug design; Aperiodic, nano and defective materials, Crystallography for intelligent materials; Advances in crystal growth and crystallization methods; y Quantum crystallography.*

Durante los días del congreso se impartieron cinco conferencias plenarias, 12 conferencias invitadas, 36 presentaciones orales y se han defendido 102 pósteres. La representación española incluyó más de 70 cristalógrafos que contribuyeron con 14 contribuciones orales y más de 40 pósteres. En el acto de la inauguración del congreso el profesor Juan Manuel García-Ruiz (Laboratorio de Estudios Cristalográficos, IACT-CSIC-UGR) recibió la Medalla MISSCA 2013, como premio a sus relevantes aportaciones científicas y a su extraordinaria capacidad como divulgador de la ciencia, impartiendo la conferencia titulada “*Crystals and (my) life*”.



Sesión científica del MISSCA 2013.

Finalmente, tras la interesante y estimulante conferencia de la jornada de clausura “*Chiral crystallization with non classical crystal growth and enantiodiscrimination through oriented attachment*” impartida por el profesor Cristóbal Viedma (UCM), se celebró una mesa redonda dedicada al año internacional de la Cristalografía (IYCr2014), en la que se expusieron las actividades que se han diseñado hasta el momento por parte de la Unión Internacional de Cristalografía (IUCr) en general, y de las asociaciones italiana, española y suiza, en particular.

La sede de la reunión fue el magnífico palacio Villa Olmo en las orillas del Lago Como, donde los participantes pudieron disfrutar de extraordinarias vistas mientras comentaban las sesiones del día en torno a un buen café. Información adicional sobre el congreso puede encontrarse en la página web <http://bit.ly/GPem0z>.

La Asamblea general del GE3C, celebrada el día 11 de septiembre, ratificó el alto valor añadido de estas reuniones entre grupos especializados de distintos países y planteó el realizar la siguiente reunión en España en el año 2016.

Remitido por: **Pilar Gómez-Sal** y **Avelino Martín**, miembros de la Junta de Gobierno del GE3C.



Participantes en el MISSCA 2013.

Cristalización en la Escuela

El concurso *Cristalización en la Escuela* es una actividad que utiliza un formato ya experimentado, de gran éxito, desarrollado en los últimos años en el Laboratorio de Estudios Cristalográficos del CSIC con la dirección de Juan Manuel García-Ruiz. Este concurso nació en el año 2009 en una edición creada por García-Ruiz y Juan López Garriga, que se organizó conjuntamente entre centros educativos de Andalucía y Puerto Rico con la ayuda logística del Parque de las Ciencias de Granada. A través de los años, el concurso ha ido sufriendo modificaciones y mejoras, tanto en los materiales utilizados, como en el desarrollo de los protocolos de uso. Se han organizado ediciones del concurso en Asturias (2010), Andalucía (2009, 2013), Cataluña (2012, 2013) y una, a escala estatal (2011), en la que participaron un número reducido de centros de varias comunidades autónomas y cuya final se desarrolló en Granada.

Con motivo de la declaración por la Asamblea General de las Naciones Unidas del año 2014 como el Año Internacional de la Cristalografía, el Grupo Español de Cristalografía y Crecimiento de Cristales (G3C) ha querido organizar este curso académico el concurso a nivel nacional. Se van a realizar siete finales previas en siete zonas territoriales (Andalucía, Aragón, Asturias, Canarias, Cataluña, Madrid, y Valencia). Los ganadores de estas finales participarán en una final estatal que se celebrará en la sede central del CSIC en Madrid.

El objetivo principal del Concurso de Cristalización, dirigido a estudiantes de ESO y bachillerato, es aprovechar el atractivo natural que posee el fenómeno de la cristalización con objeto de enseñar a los alumnos cómo se hace y disfruta la ciencia, y cómo se compite en los ámbitos científicos, a través de un formato de concurso que utiliza todos los ingredientes del método científico: desde la investigación en el laboratorio, hasta la presentación de resultados en un congreso científico. El concurso propuesto posee un formato original que cuenta con cuatro fases o actividades claramente definidas:

Actividad 1. Captación y formación del profesorado de secundaria

Se llevarán a cabo un mínimo de siete cursos para profesores de educación secundaria (uno por cada sede territorial) durante los meses de octubre-noviembre con objeto de dotarles de herramientas necesarias para la realización de los experimentos de cristalización con sus alumnos. Al mismo tiempo, se pretende convencer a los profesores de la importancia de la cristalografía y la cristalización, que suele estar ausente en los programas docentes oficiales en todos los niveles educativos. Esta es la parte más importante del concurso, en el sentido de que se enseñará a los docentes la importancia y trascendencia de la cristalografía como fuente para la resolución de problemas industriales o en el estudio del binomio estructura-propiedad en numerosas áreas de desarrollo tecnológico. Todos estos conceptos serán ejemplificados con procesos y productos que utilizamos y consumimos en nuestra vida diaria.

Actividad 2. Realización de experimentos y seguimiento del concurso (investigadores-profesores-alumnos)

Durante alrededor de 3-4 meses (diciembre 2013-marzo 2014) del curso académico, los profesores de secundaria trabajarán con sus alumnos en la realización de experimentos de cristalización que les permitirá adquirir conocimientos en el campo de la cristalografía y la cristalización. En esta fase será fundamental el contacto directo y constante entre los profesores, los alumnos y los investigadores responsables en cada sede territorial, de manera que exista un flujo continuo de información entre los mismos y el aprovechamiento sea el máximo posible (esta comunicación será articulada a través de la creación de una comunidad virtual alrededor del concurso, ver actividad 4). Los estudiantes utilizarán un kit didáctico que permite crecer cristales de ADP (fosfato amónico) visualmente impactantes y a la vez con suficiente contenido científico para atraer su atención y fomentar su espíritu investigador.

Con este material, y naturalmente con el soporte inmediato de sus profesores, los alumnos podrán entender conceptos fundamentales de la cristalización (solubilidad, concentración, sobresaturación, nucleación y crecimiento de cristales) que tienen aplicación en multitud de procesos relacionados con cualquiera de las áreas de las ciencias e ingenierías. Además de ello, se les facilitará una guía didáctica que contiene una selección de numerosas fotografías y videos de crecimiento cristalino que debido a su atractiva belleza motivarán al estudiante a adentrarse en el fascinante mundo de la cristalización, a la vez que le ayudarán a entender formalmente los procesos y mecanismos implicados en el crecimiento cristalino. Con la ayuda de esta guía didáctica, el estudiante será capaz de ejecutar experimentos reales de cristalización que mejoraran el proceso de enseñanza-aprendizaje enriqueciéndose de manera dinámica y activa. Por tanto, a través de una actividad de aprendizaje entretenida y estimulante, los alumnos desarrollarán un entendimiento sólido de los conceptos implicados en los experimentos a la vez que se fomenta el interés general por la ciencia.



Espectaculares cristales de ADP, obtenidos en el IES Manuel Romero (Villanueva de la Concepción, Málaga).



Cristal gigante de sulfato de cobre (II), cristalizado en el IES Bezmiliana (El Rincón de la Victoria, Málaga).

Actividad 3. Final del concurso de cristalización

La labor experimental realizada por los estudiantes en sus centros será presentada y compartida en una acción final a modo de congreso científico. Se realizarán siete finales territoriales: Andalucía, Aragón, Asturias, Canarias, Cataluña, Madrid, y Valencia. Los ganadores de estas finales participarán en una final estatal, que previsiblemente se celebrará en la sede central del CSIC en Madrid. Las finales tendrán lugar durante un día, con un formato novedoso que simula un verdadero “Congreso Científico”. En función de la participación en cada centro, cada profesor elegirá uno o dos grupos de tres alumnos de su centro. Cada equipo de tres alumnos presentará una maqueta de los cristales obtenidos acompañada de un póster, con formato científico, en el que se detallarán los objetivos, materiales, métodos, resultados y conclusiones del

trabajo. Los alumnos deberán presentar sus resultados experimentales a un jurado de expertos cristalógrafos que valorarán la calidad del trabajo. Las finales territoriales se realizarán previsiblemente a finales de abril de 2014. La final estatal reunirá un máximo de 50 grupos finalistas, elegidos entre los mejores trabajos presentados a las finales territoriales, y se celebrará a lo largo de un día completo, previsiblemente en la primera quincena de mayo.

Actividad 4. Creación de una comunidad virtual alrededor del concurso

Ya que sólo un grupo relativamente pequeño de estudiantes (1000 alumnos aproximadamente) podrá participar en las finales del concurso, la idea que se persigue es que, a través de las nuevas tecnologías, el resto de los alumnos y otras personas interesadas puedan observar en directo parte de esas finales y plasmar sus opiniones al respecto. En otras palabras, se busca crear una comunidad virtual que actúe paralela e integrada a la comunidad presencial. Para lograr este objetivo se plantea una estrategia conjunta que une el uso de nuevas tecnologías con las redes sociales. Una opción factible es instalar una mesa o puesto de exposición conectado con una cámara IP en la sede de la final que deberá tener conexión ágil a Internet. Esta cámara permitiría hacer una conexión en vídeo-streaming a través de la cual el resto de los estudiantes, desde sus institutos y a través de internet, podrían observar una exposición breve (2 ó 3 minutos) de cada uno de los grupos participantes. Al mismo tiempo, se crearán perfiles en Facebook y Twitter utilizando, por ejemplo, el nombre “Cristales en el aula” y el hashtag en Twitter #cristales_aula. Los perfiles en las redes sociales, y sobre todo el hashtag en Twitter, servirán para que los alumnos puedan ir comentando en directo sus impresiones de las imágenes de la final. Los perfiles en redes sociales también servirán para que durante el desarrollo del concurso, todos los involucrados (estudiantes, profesores, investigadores) puedan comentar sus dudas, adelantos, expectativas; e incluso, para avivar el sentido de la competitividad, propio y necesario en el avance de la ciencia.

Remitido por: **Juan Manuel García-Ruiz**,
Laboratorio de Estudios Cristalográficos,
Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra,
CSIC-Universidad de Granada.

Identificando sustancias tóxicas

El sarín (**1**) es un compuesto organofosforado, desarrollado originalmente como pesticida en 1939 en Alemania y que es usado como arma química debido a su extrema potencia como agente nervioso. En 1993 su producción y almacenamiento fue declarada ilegal en la *Convención sobre Armas Químicas*. Su mecanismo de acción se basa en su capacidad de actuar como un potente inhibidor de la enzima acetilcolinesterasa, mediante su reacción con un residuo de serina presente en el sitio activo de dicha enzima. La inhibición de la acetilcolinesterasa lleva a una acumulación de acetilcolina en las sinapsis que finalmente conduce al fallecimiento de la víctima por asfixia, ya que se produce una parálisis de los músculos implicados en la respiración.

El empleo indiscriminado de gas sarín contra la población civil en Siria ha sido denunciado recientemente. Desafortunadamente, el empleo de dicho agente nervioso con fines maliciosos no es nuevo. El sarín ya fue empleado por el régimen de Sadam Hussein contra la población kurda en 1988 o en el atentado terrorista perpetrado en el metro de Tokio por la secta *Verdad Suprema* en 1995.

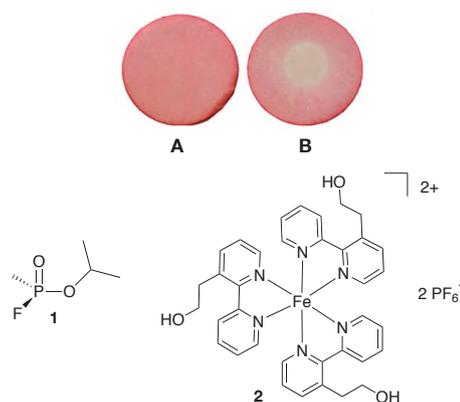
Se han desarrollado diferentes dispositivos sensores basados en técnicas cromatográficas o espectrométricas para la detección de agentes nerviosos organofosforados, pero presentan algunos inconvenientes relacionados con su elevado precio, baja selectividad, limitada portabilidad o complejidad de uso. Hay, por tanto, una necesidad de desarrollar nuevos métodos que permitan la detección de dichos agentes nerviosos de una manera rápida, barata y sobre todo de uso sencillo para la población civil.

Investigadores del LITEN (*Laboratory for Innovation in New Energy Technologies and Nanomaterials*), en Grenoble (Francia), han descrito recientemente (*Chem. Commun.* **2013**, *49*, 8946–8948) un nuevo método cromogénico para la detección de compuestos organofosforados basado en el cambio de color que se observa en un complejo de coordinación de hierro (tal como **2**) cuando es expuesto a dichas sustancias, incluida el sarín. El complejo **2** en disolución presenta un color rosa intenso, pero cuando dicha disolución se expone a la presencia de sarín, se observa una decoloración significativa. Esto se debe a que **2** es capaz de reaccionar con dicho agente nervioso a través de los grupos hidroxilo, lo que provoca una serie de cambios conformacionales en los ligandos del complejo que impiden su coordinación con el hierro.

Con el objetivo de evaluar la capacidad de este sistema para detectar agentes nerviosos en fase gaseosa (un reto mucho más complicado que en fase líquida, debido a la menor concentración de especies detectables), los autores sumergen un trozo de papel en una disolución de **2** durante unos segundos (**A** en la Figura) y a continuación lo exponen durante varios minutos a vapores de clorofosfato de difenilo (DPCP), un compuesto empleado en este tipo de investigaciones como modelo de diferentes agentes nerviosos, observándose una decoloración del papel en la zona expuesta a dichos vapores (**B**). Desafortunadamente, cuando el proceso se repite con una muestra de gas sarín, no se aprecia decoloración alguna. La menor reactividad del gas sarín se debe a la mayor energía de disociación que presenta el enlace P-F en comparación al enlace P-Cl del DPCP.

Por lo tanto, estos resultados preliminares permiten la detección de sarín en fase líquida; aunque en fase gaseosa, el método debe ser mejorado. Para ello aún queda una gran capacidad de maniobra, que incluye tanto modificaciones en la estructura química de los ligandos del complejo de hierro, con el objetivo de aumentar su reactividad; y la determinación de la cantidad óptima de complejo impregnado que permita la detección visible de trazas de sarín en fase gaseosa. En conclusión, esta investigación ofrece una nueva aproximación para el desarrollo de nuevos sensores para la detección de agentes nerviosos.

Para conocer más sobre la química y bioquímica del sarín y compuestos relacionados, se aconseja leer el post escrito por César Menor-Salván en el blog *Noticias de un espía en el laboratorio* (<http://bit.ly/1hn2HBB>, visitada el 03/10/2013).



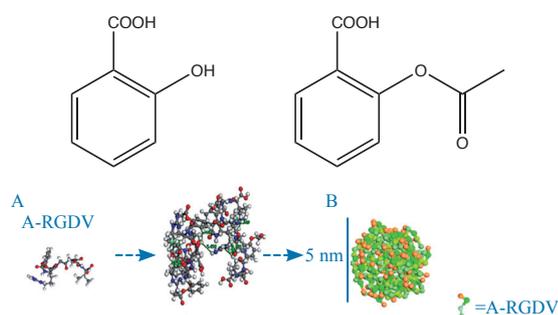
Reinventando la aspirina

Ya en el siglo V a.C., Hipócrates, padre de la medicina, usaba un preparado de hojas y corteza de sauce para tratar los dolores y la fiebre de sus pacientes. A mediados del siglo XVIII se realizó el primer estudio que demostró que las cortezas de sauce tenían un efecto antipirético. A partir de ese momento, muchos químicos trataron de aislar el principio activo. Raffaele Piria, en 1838, logró obtener de forma pura el ácido salicílico (<http://abt.cm/G6DUh>, visitada el 04/10/2013), principio activo de la corteza de sauce. Más adelante, Felix Hoffmann, que trabajaba en los laboratorios Bayer, obtuvo el crédito de ser el primero en sintetizar el ácido acetilsalicílico, aunque este descubrimiento está en discusión (*Brit. Med. J.* **2000**, *321*, 1591–1594). El ácido acetilsalicílico es realmente un profármaco del ácido salicílico; cuyas principales consecuencias son más rápida absorción y menos daño en el estómago. A finales del siglo XIX se estudiaron sus propiedades analgésicas y antiinflamatorias y comenzó a comercializarse con el conocido nombre de aspirina.

Actualmente, se siguen encontrando aplicaciones de la aspirina. Se ha estudiado su uso en el tratamiento de la diabetes, del cáncer, del Alzheimer, etc. Uno de sus usos más comunes actualmente (además de uso como agente antiinflamatorio no esteroídico, analgésico y antipirético) es el de antiagregante plaquetario para evitar la formación de trombos sanguíneos, especialmente en pacientes que ya han sufrido algún infarto

de miocardio (*Circulation* **1995**, 92, 2841–2847). En USA, 60 millones de personas toman aspirina para reducir el riesgo de ataque al corazón. Pero la aspirina no siempre funciona, hay muchos pacientes que no responden a este tratamiento; pues en ellos, la aspirina no es capaz de evitar las agregaciones de plaquetas. En estos casos se trata a los pacientes con fármacos mucho más agresivos. ¿Es esa la única solución? Por fortuna no, **pues la química puede ayudarnos.**

Recientemente, investigadores de tres universidades chinas parecen haber hallado la forma de hacer la aspirina eficaz en los pacientes “resistentes” (*ACS Nano* **2013**, 7, 7664–7673). En este artículo describen la modificación de la aspirina. Para ello, han anclado covalentemente a la aspirina una corta secuencia de aminoácidos (Arg-Gly-Asp-Val, en adelante RGDV) que es reconocida por las integrinas, unas glicoproteínas presentes en las plaquetas y muy importantes en la coagulación por ser capaces de unirse a la fibrina. Gracias a esta secuencia RGDV, se consigue la liberación eficaz y específica del fármaco en la zona afectada (el trombo).



Además de la síntesis de la aspirina modificada con el tetrapéptido RGDV (A), el artículo describe un estudio completo de las propiedades de este novedoso fármaco. En primer lugar, estudian la formación de tetrámeros (A) mediante espectroscopía de RMN y espectrometría de masas por *electrospray*. También se realiza un completo estudio de microscopía (TEM, SEM y AFM) que permite descubrir como la aspirina-RGDV forma nanopartículas de 50 nm de diámetro, formadas por 24 de los anteriormente mencionados tetrámeros (B), estables en el plasma sanguíneo de rata. Su estabilidad se comprueba también mediante ESI-MS. Por último, se estudia con detalle el mecanismo de interacción entre las integrinas y el tetrapéptido y como, gracias a esta interacción, el fármaco es capaz de liberar la aspirina en el trombo, haciendo que el fármaco llegue de manera exclusiva a la zona afectada.

Hay que destacar que gracias a la química y a los avances más recientes en nanotecnología y en bioquímica puede reinventarse un fármaco que se utilizaba hace más de 2500 años.

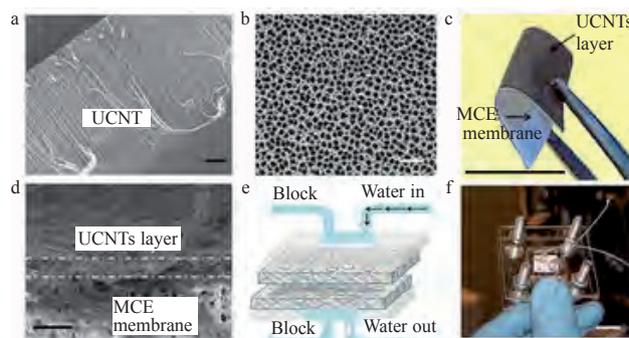
Nanotubos de carbono para purificar y desalinizar agua

Las tecnologías para la purificación y desalinización del agua, como la ósmosis inversa y procesos térmicos, implantadas a gran escala, requieren gran cantidad de energía, lo que supone unos elevados costes, unido a la dificultad que supone implantar estos sistemas en determinados países. El uso de dispositivos portátiles podría evitar estos inconvenientes y satisfacer las necesidades de agua potable. Estos sistemas, común-

mente, son de carbón activo y pueden resultar efectivos en la eliminación de contaminantes orgánicos y metales pesados, pero presentan una limitada capacidad para eliminar la sal del agua. Actualmente, los nanotubos de carbono se utilizan en el tratamiento del agua ya que presentan una gran superficie, una propiedad perfecta para la filtración; y son fáciles de modificar, lo que permite variar sus propiedades al alterar su superficie.

Un equipo de investigadores, de la *Singapore University of Technology and Design*, han desarrollado membranas de nanotubos de carbono ultra-largos modificadas con plasma, perfectas para eliminar contaminantes orgánicos, metales y sal del agua (*Nature Commun.* **2013**, 4, 2220). Estas membranas exhiben ultra alta capacidad específica de adsorción de sal, sobrepasando el 400% en peso, lo que supone dos órdenes de magnitud mayor que los actuales sistemas basados en carbón activo. Además, estas membranas podrían integrarse en dispositivos portátiles de purificación de agua.

Los investigadores planean ampliar su investigación utilizando otros materiales, como el grafeno, material que posee similitudes con los nanotubos de carbono pero es considerablemente más denso y fuerte.



Avanzando hacia una nanotecnología basada en la plata

Debido a la amplia variedad de potenciales aplicaciones en campos como la biomedicina, catálisis, óptica o electrónica; el área de la nanotecnología centrada en la síntesis y estudio de nanopartículas es un campo de intensa actividad investigadora.

Aunque la plata presenta una serie de características muy atractivas para su empleo en la preparación de nanopartículas (como son su relativa abundancia y bajo precio), el oro ha sido el gran dominador dentro de este área de investigación en los últimos años, debido principalmente a su estabilidad y facilidad de uso. A diferencia del oro, la plata presenta una conocida tendencia a oxidarse, lo cual ha sido un factor limitante a la hora de plantearse el desarrollo de nanomateriales basados en este metal. A pesar de los esfuerzos sintéticos realizados en las dos últimas décadas, la preparación de nanopartículas de plata que presentan una estabilidad a largo plazo suficientemente duradera como para poder desarrollar aplicaciones prácticas había resultado hasta ahora una tarea infructuosa.

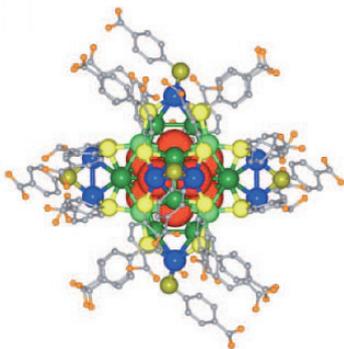
Investigadores de la Universidad de Toledo (Ohio), el Instituto de Tecnología de Georgia y la Universidad de Texas, han descrito un sencillo protocolo sintético que permite la producción de nanopartículas de plata ultraestables de un único tamaño molecular, en grandes cantidades y con

un rendimiento cuantitativo (*Nature* **2013**, *501*, 399–402). Para lograr estos resultados, los autores del trabajo han desarrollado una aproximación basada en el uso de ácido *p*-mercaptobenzóico (*p*-MBA) como ligando estabilizante, ya que dicho ligando es capaz de formar una capa “protectora” en torno al núcleo de átomos de plata de las nanopartículas, confiriéndoles una estabilidad sin precedentes.

La síntesis comprende la reducción de un precursor soluble en disoluciones semiacuosas, en presencia de cationes alcalinos y un disolvente coordinante. Por otro lado, hay que resaltar que dicho protocolo permite la obtención de las nanopartículas de plata con elevada pureza, sin necesidad de llevar a cabo ningún tipo de separación de las nanopartículas en función de su tamaño. Empleando técnicas de ionización por electrospray y análisis elemental, los autores han determinado que la fórmula molecular de las nanopartículas corresponde a $M_4Ag_{44}(p\text{-MBA})_{30}$, donde M son contraiones alcalinos. Además, son capaces de determinar que las cuatro cargas negativas del complejo están localizadas en el núcleo de plata y no en los grupos carboxilato presentes en los ligandos.

Entre otros aspectos, cabe destacar que tanto el tamaño de las nanopartículas, como su composición y estequiometría es independiente de los cambios en los parámetros experimentales, como por ejemplo la naturaleza del disolvente o la concentración de los reactivos empleados en la síntesis. Los autores también describen que la estabilidad de las nanopartículas de plata obtenidas es aproximadamente siete veces superior a la observada en nanopartículas de oro similares. Otro aspecto interesante es la escalabilidad del método, ya que permite obtener hasta 140 g de $M_4Ag_{44}(p\text{-MBA})_{30}$ en una única operación sintética. La posibilidad de llevar a cabo la preparación en escala de kilogramos es una posibilidad fácilmente realizable. La estructura cristalina de las nanopartículas (ver la Figura) presenta una elevada simetría, observándose la presencia de 4 de los 5 sólidos platónicos (la excepción es el tetraedro).

Sin duda, esta investigación es un excelente punto de partida que va a permitir el desarrollo de nuevas aplicaciones de este tipo de nanopartículas basadas en plata en diferentes áreas tecnológicas.



Desvelando la estructura de micelas

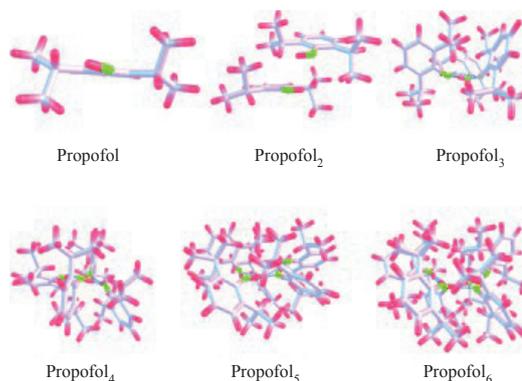
Si miramos jabón en una mezcla acuosa con un microscopio, podremos ver que el jabón crea unas macroestructuras totalmente ordenadas, formadas por numerosas moléculas que tienen dos partes, una polar y otra apolar. La parte polar es hidrófila, por lo que queda rodeada por las moléculas de agua;

mientras que los grupos apolares, que son hidrófobos, se esconden entre otras moléculas de jabón interaccionando entre sí. Así aparecen esas estructuras globulares llamadas micelas, que conforman un entorno completamente diferente al del disolvente en el que se encuentran inmersas. Esta propiedad de formar micelas resulta crucial para los seres vivos y permite, por ejemplo, la existencia de las membranas celulares. También tiene usos farmacológicos, ya que un medicamento puede viajar “escondido” en el interior de las micelas protegido del entorno hasta ser liberado en la parte del organismo donde tiene que ejercer su función. Aunque estos hechos son bien conocidos, su estudio se había limitado a sistemas macroscópicos, formados por muchas moléculas, en fase líquida.

Un avance considerable en el estudio de las micelas y las interacciones responsables de su formación ha sido descrito recientemente (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *125*, 7772–7775) por un equipo de científicos de las universidades del País Vasco, La Rioja y Valladolid; los cuales han conseguido crear micelas sin necesidad de un entorno líquido y determinar con extrema precisión su estructura.

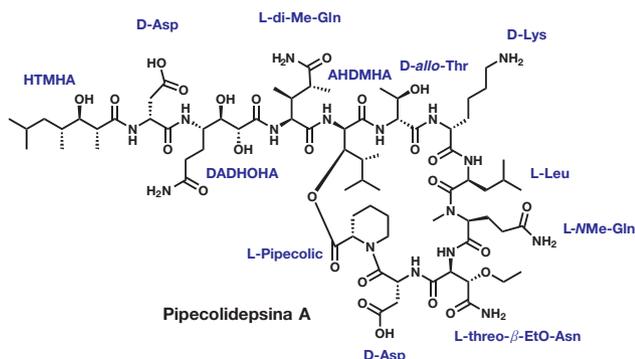
Entre las moléculas anfífilas, esto es, aquellas que como el jabón tienen un extremo hidrófilo y el otro hidrófobo y tienen la capacidad de formar micelas, se encuentra el propofol (2,6-diisopropilfenol), un anestésico ampliamente utilizado en cirugía. Los investigadores, coordinados por José A. Fernández de la UPV/EHU, han realizado su estudio con este anestésico, en fase gas, lo que permite seleccionar las moléculas sin interacciones de cualquier otra molécula del entorno. Emplearon para ello un complejo sistema experimental, que les permitió formar agregados de tamaño creciente de moléculas de propofol, y determinar sus parámetros estructurales mediante una combinación de técnicas espectroscópicas láser y cálculos mecánico-cuánticos, llevados a cabo en los superordenadores de la Universidad del País Vasco (UPV/EHU) y de la Fundación i2BASQUE.

Los investigadores pudieron crear, aislar y determinar que las moléculas de propofol se autoorganizan, sin necesidad de estar en un entorno líquido, formando una estructura de micela inversa, es decir, con un núcleo hidrófilo estabilizado por enlaces de hidrógeno, y una envoltura hidrófoba formada por la interacción de la parte apolar de todas las moléculas del propofol, estabilizada por fuerzas dispersivas. Las interacciones que forman las micelas inversas descritas en este artículo son las mismas que gobiernan el plegamiento de las proteínas y la interacción entre moléculas biológicas, por lo que las conclusiones alcanzadas en este trabajo podrían ser extrapolables a otros sistemas biológicos relevantes.



Síntesis total de un antitumoral de origen marino

Los organismos marinos siguen siendo una fuente de sustancias químicas estructuralmente atractivas y biológicamente interesantes. En 2008, investigadores de PharmaMar aislaron una serie de ciclodepsipéptidos de la esponja *Homophyma lamellosa*, hallada en las costas de Madagascar; entre los compuestos aislados cabe destacar la pipecolidepsina A, que es activa *in vitro* frente a las células tumorales de once tejidos: pulmón, próstata, colon, páncreas, ovario, sarcoma, leucemia, hígado, riñón, estómago y mama. Esta alta actividad biológica hace a la pipecolidepsina A un candidato para futuros desarrollos farmacéuticos. Sin embargo, el suministro a partir de fuentes naturales es insuficiente para ensayos preclínicos, por lo que es conveniente recurrir a métodos sintéticos para su obtención.



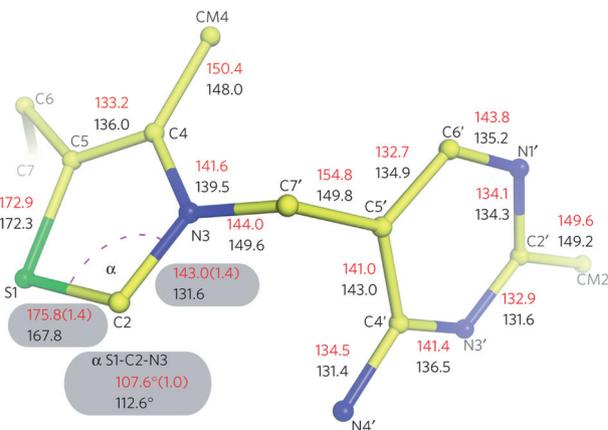
En un reciente artículo (*Nature Comm.* **2013**, *4*, 2352) se ha publicado la primera síntesis total de la pipecolidepsina. En la misma han colaborado científicos de la Universidad de Barcelona, PharmaMar, la Universidad de KwaZulu-Natal (Sudáfrica) y el Instituto de Investigación Biomédica, liderados por Fernando Albericio. La pipecolidepsina A pertenece a la familia de los ciclodepsipéptidos *head to side chain* (de cabeza a cadena lateral). Muchas de estas moléculas han mostrado actividad contra, además de células cancerosas, el virus del sida, bacterias resistentes de diversos tipos y hongos. En concreto, la pipecolidepsina A es un depsipéptido de once aminoácidos y un ácido con estructura compleja y funcionalidad sensible. De los 11 aminoácidos, siete son no naturales, lo que ha implicado que se ha tenido que idear una estrategia de síntesis para cada uno. La síntesis del ciclodepsipéptido se ha desarrollado mayoritariamente en fase sólida; lo que ha proporcionado 4 miligramos de la molécula objetivo. Con esta muestra se ha podido comprobar que la actividad de la molécula sintética es comparable a la de la fuente natural, con actividad antitumoral en los tejidos indicados anteriormente. La investigación prosigue, iniciándose un programa para simplificar la síntesis, obtener análogos sintéticos, rebajar el tiempo y coste de producción, y conseguir más cantidad de pipecolidepsina A para empezar con las pruebas preclínicas.

Carbenos estables en el sitio activo de una enzima

Los carbenos son especies singulares en química. Sus seis electrones confieren a estos compuestos un especial modelo de reactividad. Es una especie sumamente inestable, pero los químicos han sido capaces de “domarla” y darle cierta estabilidad. Los catalizadores de Grubbs y toda su extensa química son un buen ejemplo.

La actividad catalítica de la tiamina (vitamina B₁) fue propuesta por Ronald Breslow en 1958 para las reacciones de condensación benzoínica. Posteriormente, un mecanismo catalítico similar fue propuesto para la reacción de Stetter. Ya en 1958, Breslow llegó a sugerir que el heterociclo tiazolio del difosfato de tiamina (la coenzima derivada de la vitamina B₁) podía existir potencialmente como un carbeno de corta duración. Esta coenzima participa en importantes procesos metabólicos, como por ejemplo en el paso de piruvato a acetaldéhidro en la fermentación alcohólica o en el paso de piruvato a acetil-CoA, previo a la incorporación de este último en el ciclo del ácido cítrico.

En un reciente y excelente trabajo, publicado en *Nature Chemical Biology* (**2013**, *9*, 488–490), investigadores de la Universidad de Göttingen han dado un gran paso en la comprensión del mecanismo de catálisis de la tiamina. En la publicación presentan los datos espectroscópicos y estructurales de la tiamina unida a la correspondiente enzima en un complejo no covalente con el sustrato que va a catalizar. Esos datos evidencian la existencia de un carbeno estable mostrando la estructura tridimensional de la enzima y el cofactor carbeno. El título del artículo no puede ser más revelador: “*Observation of a stable carbene at the active site of a thiamin enzyme*”.



Como afirman los autores, el estudio demuestra que los carbenos estables no sólo son una invención de los químicos inteligentes, son también una consecuencia de la química innata del cofactor tiamina. Además, la interacción del carbeno con las proteínas permite destacar el versátil arsenal químico de la naturaleza. Sorprendentemente, el carbeno se estabiliza en la enzima a pH fisiológico y temperatura ambiente y en disolución acuosa, condiciones bajo las cuales se preveía que los carbenos podían sufrir una descomposición inmediata. Esta investigación puede sentar las bases para el desarrollo de nuevas clases de carbenos biomiméticos para su empleo en química orgánica.

Progresos en la química del uranio

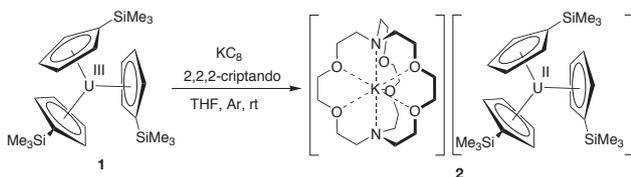
El uranio es un elemento químico metálico perteneciente a la serie de los actínidos. Con un número atómico de 92, el uranio es el elemento con mayor peso atómico de todos los elementos que se encuentran en la naturaleza. Su abun-

dancia en la corteza terrestre es aproximadamente 500 veces mayor que la del oro y similar a la del estaño. Dada su gran importancia estratégica, debido tanto a su uso como fuente de energía nuclear como a las implicaciones medioambientales relacionadas con la generación de residuos altamente contaminantes tras su uso, el estudio de su química es un área de intensa actividad.

Una de las características fundamentales de cualquier metal es la medida en la que puede ceder electrones para dar lugar a especies cargadas con diferentes grados de oxidación. Este aspecto central de la química de los metales lleva estudiándose desde hace más de un siglo, y las reglas que delimitan los estados de oxidación accesibles para cualquier metal están bastante bien definidas. El uranio presenta diversos estados de oxidación: +3, +4, +5 y +6. Los primeros intentos de sintetizar moléculas con U^{2+} en su estructura se remontan al año 1980. Sin embargo, los resultados no fueron concluyentes y no se encontraron evidencias sólidas de la presencia de U^{2+} . También se ha confirmado la presencia de U^{2+} en fase gas, pero hasta este momento la preparación de una molécula aislable con U^{2+} en su estructura no había sido descrita. La identificación de nuevos estados de oxidación es un acontecimiento relevante.

En un artículo publicado recientemente (*J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 13310–13313), investigadores de la Universidad de California han descrito la preparación, aislamiento y caracterización de un complejo molecular con U^{2+} en su estructura. La metodología desarrollada por los autores de este trabajo consiste en hacer reaccionar el complejo de U^{3+} (**1**), con un reductor potente como es el sistema potasio-grafito intercalado (KC_8) en presencia de un criptando (en particular el 2,2,2-criptando) para dar lugar al complejo de U^{2+} (**2**). Los criptandos son una familia de ligandos multidentados sintéticos, desarrollados en la década de los 1960s por el químico Charles Pedersen (trabajo por el que recibió el Premio Nobel de Química en el año 1987 junto a Lehn y Cram) y que poseen una elevada afinidad por una serie de cationes.

El complejo **2** es estable a temperatura ambiente durante varios días y su estructura es confirmada mediante estudios de difracción de rayos X. Para descartar la posibilidad de que **2** sea realmente un complejo de U^{3+} que posea un ligando hidruro no detectado en el estudio de rayos X, los autores realizan una serie de elegantes experimentos donde mediante reacciones con diversos reductores y estudios de RMN y cristalográficos son capaces de desechar tal posibilidad. Finalmente, llevan a cabo estudios computacionales y de espectroscopia UV/vis con el objetivo de examinar las energías de las posibles configuraciones electrónicas del ion U^{2+} en el complejo **2**.



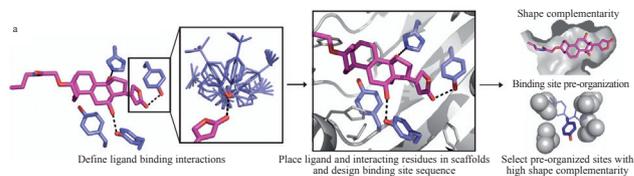
Sin duda, esta investigación aporta nuevas opciones para la exploración tanto de la reactividad como de las propiedades físicas de compuestos con uranio y pone de

manifiesto que las propiedades fundamentales de este metal tan importante por diversos motivos no están aun totalmente delimitadas.

Diseño computacional de proteínas

Un grupo de la Universidad de Washington, ha publicado en la revista *Nature* (**2013**, *501*, 212–216) un artículo donde proponen una revolucionaria metodología computacional para el diseño de mutaciones en proteínas, modulando así su afinidad hacia sus respectivos ligandos. En la actualidad, las aproximaciones experimentales se enfrentan a este problema usando técnicas que generan un gran número de ensayos que, en muchos casos, ni siquiera son suficientes para explorar el inmenso número de posibilidades. Los autores del artículo describen un método computacional capaz de proponer un reducido conjunto de mutaciones candidatas a mejorar la interacción entre la proteína y el ligando, habiendo sido capaces de probarlo en mutantes de una proteína de función desconocida (PDBID-1Z1S) y mejorar la afinidad hacia el esteroide digoxigenina (DIG). Mediante esta aproximación se han generado sólo 17 candidatos de los cuales dos han mostrado una gran afinidad hacia el compuesto y, más aún, la proteína que se predijo como la mejor candidata de manera teórica fue de hecho la que mostró una mayor afinidad.

El programa diseñado sitúa alrededor del ligando aminoácidos aislados capaces de proporcionar una buena interacción, para después buscar la concordancia entre esas interacciones ideales y la estructura de la proteína mediante la búsqueda de posiciones en la cadena peptídica que sean compatibles con dichas mutaciones. En el caso estudiado en el artículo, se optimizaron las interacciones de enlaces de hidrógeno de tirosinas o histidinas con los grupos polares del ligando DIG y fuerzas de empaquetamiento hidrófobas producidas por residuos de tirosina, fenilalanina y triptófano. Dichas interacciones fueron insertadas en los sitios de unión a DIG, seleccionando las 17 candidatas basándose en cálculos de energía de unión, complementariedad de superficies y capacidad de pre-organización de la proteína antes de unirse al ligando. Posteriormente se realizaron ensayos de “*yeast display*” y citometría de flujo, donde se pudo comprobar la afinidad de los distintos candidatos. Este método de diseño computacional de proteínas abre la puerta al desarrollo de nuevas generaciones de fármacos, biosensores y agentes diagnósticos.



Noticias redactadas por:
Héctor Busto (Universidad de La Rioja),
Fernando Gomollón-Bel (ISQCH-UZ-CSIC),
Javier Klett (Universidad CEU-San Pablo),
Enrique Mann (IQOG-CSIC),
Yolanda Pérez (Universidad Rey Juan Carlos),
César Tomé-López (Cuaderno de Cultura Científica, UPV/EHU),
Bernardo Herradón (IQOG-CSIC).