

Noticias de la RSEQ

Jesús Jiménez-Barbero galardonado con el Premio Internacional en Química de Carbohidratos Roy L. Whistler 2010

La Organización Internacional de Carbohidratos (International Carbohydrate Organization, ICO) ha distinguido con el Premio Internacional en Química de Carbohidratos Roy L. Whistler 2010 al Prof. Jesús Jiménez-Barbero, del Centro de Investigaciones Biológicas, CIB-CSIC, y Secretario General de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ).

Este premio fue fundado por la ICO en 1984 en honor del Prof. Roy L. Whistler, con la finalidad de reconocer a los científicos que hayan realizado, y estén realizando en la actualidad, contribuciones de excelencia a la química y la bioquímica de carbohidratos. El premio se concederá en el transcurso del 25 International Carbohydrate Symposium (ICS), que tendrá lugar en Tokio del 1 al 6 de agosto de 2010, en el que el Prof. Jiménez-Barbero impartirá la conferencia de apertura.

Jesús Jiménez-Barbero (licenciado en Ciencias Químicas, UAM, 1982) se doctoró en 1987 en el campo de la química de carbohidratos bajo la supervisión de los Profs. Bernabé y Martín-Lomas. Ha realizado varias estancias postdoctorales en diversos centros de investigación europeos y de Estados Unidos. En 1988 obtuvo la plaza de Científico Titular en el IQO-CSIC y desde 2002 es Profesor de Investigación en el CIB-CSIC. También ha sido Profesor Invitado de varias universidades europeas: École Normale Supérieure de París, Université Pierre et Marie Curie de París y Università Milano-Bicocca. Es miembro del equipo editorial de varias revistas internacionales (*Chem. Eur. J.*, *Org. Biomol. Chem.*, *Glycoconj. J.*, *Carbohydr. Res.*, *J. Carbohydr. Chem.*, *Eur. J. Org. Chem.*) y, desde 2004, es el Secretario General de la RSEQ. Actualmente es el Gestor del Programa de Química Básica (BQU) del Plan Nacional de Investigación del Ministerio de Ciencia e Innovación. Ha publicado más de 300 artículos en revistas internacionales, impartido más de 130 conferencias en congresos e instituciones nacionales e internacionales, y dirigido 14 Tesis Doctorales. Sus aportaciones han sido reconocidas mediante el Premio Janssen-Cilag en Química Orgánica de la RSEQ en 2003 y el Premio del Grupo de RMN de la RSEQ en 2008.

Dentro del campo de la ciencia de carbohidratos, las investigaciones de Jesús Jiménez-Barbero han contribuido a desen-

marañar las bases moleculares del reconocimiento de oligosacáridos por receptores en solución, a través de un enfoque multidisciplinar, por el que siempre ha apostado, mediante el empleo de síntesis de carbohidratos, bioquímica de proteínas y biología molecular, modelado molecular y espectroscopía de RMN.

Merece la pena destacar sus estudios sobre las interacciones de oligosacáridos con lectinas de ricina, heveína y, más recientemente, galectinas, contribuyendo de forma significativa al entendimiento de las interacciones mediadas por carbohidratos en procesos biológicos.

Desde el principio de su carrera como investigador el Prof. Jiménez-Barbero se interesó por el gran potencial de la espectroscopía de RMN aplicada a la investigación en carbohidratos. Es considerado como uno de los pocos expertos que no sólo aplican técnicas de RMN, sino que también desarrollan métodos avanzados de RMN para el estudio de propiedades conformacionales de carbohidratos y de sus interacciones con proteínas o con otros carbohidratos. Su visión inter y multidisciplinar de la investigación, unida a su amplia experiencia en RMN, se ha traducido en numerosas colaboraciones con científicos de otras áreas en todo el mundo.

Por todo ello, la RSEQ y, en particular, el Comité Editorial de *Anales* y el Grupo Especializado de Hidratos de Carbono, quiere transmitir desde esta página la felicitación a Jesús Jiménez-Barbero por este reconocimiento internacional a su labor investigadora.



Remitido por:

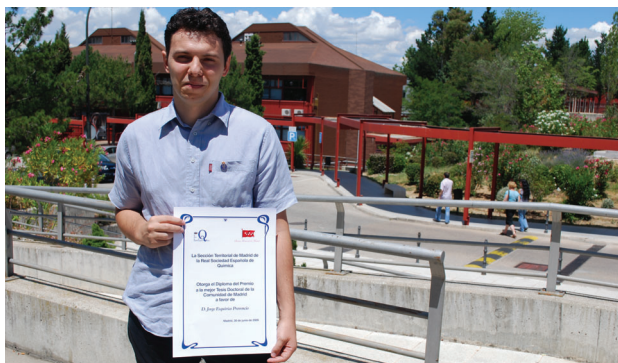
Ramón Estévez Cabanas
Departamento de Química Orgánica
Universidad de Santiago de Compostela
Presidente del Grupo Especializado
de Hidratos de Carbono
Sonsoles Martín Santamaría
Departamento de Química
Universidad San Pablo CEU
Comité Editorial *Anales* de Química

Sección Territorial de Madrid – Acto de entrega del Premio a la mejor Tesis Doctoral en Química (2007–2008) de la Comunidad de Madrid

El pasado día 30 de junio de 2009, en el Salón de Actos de la Facultad de Farmacia de la Universidad San Pablo CEU (Campus de Montepíncipe), tuvo lugar el acto de entrega del Premio a la mejor Tesis Doctoral en Química de la Comunidad de Madrid. En la presente edición, correspondiente al curso 2007-2008, se concedió el premio al Dr. Jorge Esquivias por el trabajo titulado "N-sulfoniliminas coordinantes en reacciones de adición y cicloadición catalizadas por metales de transición", co-dirigido por los Drs. Juan Carlos Carretero González y Ramón Gómez Arrayás, de la Universidad Autónoma de Madrid.

El acto fue presidido por Dña. Beatriz de Pascual-Teresa,

Decana de la Facultad de Farmacia, y Dña. M^a del Carmen de la Torre Egido, Presidenta en funciones de la Sección Territorial de Madrid de la Real Sociedad Española de Química. En el mismo acto, el Dr. Bernardo Herradón García, Director del Instituto de Química Orgánica General del C.S.I.C., impartió la conferencia titulada: "La Química en peligro ¿podremos salvarla? Los científicos y la divulgación". En su exposición, el Dr. Herradón analizó la situación actual de la Química, aludiendo principalmente a su "mala imagen social", por la que el apelativo químico se utiliza como sinónimo de tóxico o contaminante. En este sentido, recalco la importancia de la divulgación de la Química por parte de los



Sección Territorial de Málaga – Acto de entrega de los premios del 2º Concurso de Química "La Química es Divertida"

El pasado día 2 de junio en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Málaga tuvo lugar la entrega de los Premios del 2º Concurso de Química que con el título "La Química es Divertida" ha organizado la Sección Territorial de Málaga de la Real Sociedad Española de Química con la colaboración de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Málaga.

El concurso estaba dividido en dos categorías dirigidas a Profesores y Alumnos de la provincia de Málaga de Educación Secundaria Obligatoria, por un lado, y de Bachillerato, por otro. En cada una de estas categorías se han repartido tres premios por valor de 600, 400 y 200 €, respectivamente.

El jurado, integrado por los profesores Juan Teodomiro López Navarrete, en su calidad de Presidente de la Sección Territorial de Málaga de la RSEQ, José Joaquín Quirante Sánchez, Decano de la Facultad de Ciencias, Teresa Lupión Cobos, Asesora de Formación del CEP Málaga, Rafael Suau Suárez, Catedrático de Química Orgánica de la Universidad de Málaga, y Ezequiel Pérez-Inestrosa Villatoro, Secretario y Tesorero de la ST-Málaga de la RSEQ, decidieron por unanimidad otorgar los siguientes premios según categorías:

Enseñanza Secundaria Obligatoria:

3^{er} PREMIO: Al equipo del Colegio Salliver coordinado por el Profesor Fernando Nogales Pérez e integrado por alumnos de 3º de secundaria, por el trabajo titulado: "Quimijuegos Reunidos".

2º PREMIO: Al equipo del I.E.S. Bezmiliana coordinado por las Profesoras Inmaculada Durán Torres y Ana M^a Martínez Martín e integrado por alumnos de 4º de ESO, por el trabajo titulado: "Pasamos un rato divertido con la Química".

1^{er} PREMIO: Al equipo del Colegio Salliver coordinado por el Profesor Fernando Nogales Pérez e integrado por alumnos de Primer ciclo de ESO por el trabajo titulado: "Atrévete con la teoría cinético-molecular". Este premio ha sido donado por los alumnos a la Fundación Cudeca (Cuidados del Cáncer).

Bachillerato

3^{er} PREMIO: Al equipo del Colegio Salliver coordinado por el Profesor Fernando Nogales Pérez e integrado por alumnos de 1º de Bachillerato por el trabajo titulado: "Qué cosas tiene la Química".

profesionales dedicados a ella y, muy especialmente, la necesidad de impartir la Química entre los estudiantes de Bachillerato y Educación Secundaria de una forma atractiva y moderna.

La RSEQ quiere transmitir desde esta página la felicitación al Dr. Esquivias y a sus directores de Tesis por esta distinción.

Remitido por: **Sonsoles Martín Santamaría**
Departamento de Química
Universidad San Pablo CEU
Comité Editorial *Anales* de Química

2º PREMIO: Al equipo del I.E.S. Bezmiliana coordinado por las Profesoras Inmaculada Durán Torres y Ana M^a Martínez Martín e integrado por alumnos de 1º de Bachillerato por el trabajo titulado: "Cómo hacer jabón en una clase y no fracasar en el intento".

1^{er} PREMIO: Al equipo del Colegio Cerrado de Calderón coordinado por las Profesoras Ana Carmen López Sánchez y M^a Ángeles Marín Carmona e integrado por alumnos de 1º de Bachillerato por el trabajo titulado: "Química divertida".



Los integrantes del jurado del 2º Concurso de Química "La Química es Divertida" junto con algunos de los estudiantes galardonados.

La Sección Territorial de la RSEQ en Málaga ha pretendido con este concurso, por un lado, promover, desarrollar y divulgar la disciplina de la Química, tanto en su aspecto de ciencia pura como en el de sus aplicaciones; y por otro, estimular la creatividad de los alumnos de Secundaria Obligatoria y Bachillerato hacia el conocimiento de la Ciencia como una parte fundamental de nuestra vida.

La organización felicita a todos los galardonados y al conjunto de alumnos que han participado en este concurso, y les anima a seguir participando en ediciones posteriores, y se complace en patrocinar este tipo de actividades que acercan la ciencia en general y la química en particular al gran público.

Remitido por: **Juan T. López Navarrete**
Presidente de la Sección Territorial
de la RSEQ en Málaga

Grupo de Jóvenes Investigadores Químicos - Fallo de los I Premios SUSCHEM de Jóvenes Investigadores Químicos

El jurado de la primera edición de los Premios SUSCHEM ESPAÑA, con los que se pretende otorgar un reconocimiento público a la labor de los jóvenes investigadores en el ámbito de la Química en nuestro país, falló el pasado 15 de julio dichos galardones en sus seis categorías.

Para el jurado, en esta primera convocatoria ha sido destacable tanto el elevado grado de participación –con 90 candidaturas admitidas– como la alta calidad de los trabajos presentados, datos que vienen a corroborar el importante potencial de las actuales generaciones de investigadores en España. La instauración de estos galardones ha sido promovida por el Grupo Especializado de Jóvenes Investigadores Químicos (JIQ) de la RSEQ, la Asociación Nacional de Químicos de España (ANQUE), el Consejo General de Colegios de Químicos de España y la Federación Empresarial de la Industria Química Española (FEIQUE).



Los Premios SUSCHEM, dirigidos a jóvenes menores de 36 años, incorporan seis categorías diferentes: **Innova**, **Divulga** y **Futura**, y las categorías **Predoc**, **Postdoc** y **Tesis**, el Jurado, ha decidido otorgar por unanimidad estos galardones a:

Innova: Premio al mejor currículum investigador desarrollado en una o varias de las siguientes áreas: biotecnología industrial, nuevos materiales, nanotecnología o diseño de reacciones y procesos. **Silvia Cabrera Herranz**, Doctora en CC Químicas por la Universidad Autónoma de Madrid por su sobresaliente currículum investigador desarrollado en el área de Diseño de Reacciones y Procesos.

Divulga: Premio al autor de la mejor contribución de divulgación científica en cualquier área de la química en medios no especializados. **Alberto Fernández Tejada**, Licenciado en Química por la Universidad de La Rioja, por su destacado trabajo de divulgación "Diseño y Síntesis de coadyuvantes basados en glicoconjugados para la preparación de vacunas contra el cáncer" publicado en diversos medios de comunicación no especializados.

Grupo de Didáctica e Historia – Jornadas sobre la Química como materia básica de los Grados de Ingeniería

En la última década, y debido principalmente al conocido como proceso de Bolonia, ha tenido lugar una reestructuración profunda de la enseñanza universitaria. El Real Decreto 1393/2007, de 29 de octubre, por el que se establece la ordenación de las enseñanzas universitarias oficiales en España, indica que cada plan de estudios de Grado deberá contener un mínimo de 60 créditos europeos (ECTS) de formación básica, de los que, al menos 36, estarán vinculados a algunas materias determinadas para cada rama de conocimiento. Estas materias deberán concretarse en asignaturas con un mínimo de seis créditos cada una y serán ofer-

Predoc: Premio al autor de la mejor publicación científica, con número de página de 2008, en cualquier área de la química, y que no estuviera en posesión del título de doctor a 31 de diciembre de 2008. **Daniel García Velázquez**, Licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de La Laguna, por su excelente publicación científica "*Instantaneous Low Temperature Gelation by a Multicomponent Organogelator Liquid System Based on Ammonium Salts*".

Postdoc: Premio al autor de la mejor publicación científica, con número de página de 2008, en cualquier área de la química, y que estuviera en posesión del título de doctor a 1 de enero de 2008. **Emilio Pérez Álvarez**, Doctor en Químicas por la Universidad de Edimburgo, por su excelente publicación científica "*Self-Organization of Electroactive Materials: A Head-to-Tail Donor-Acceptor Supramolecular Polymer*".

Tesis: Premio al autor de la mejor tesis doctoral en cualquier área de la química que haya sido defendida durante el año 2008. **Manuel Moliner Marín**, Doctor en Químicas por la Universidad Politécnica de Valencia, por la gran calidad científica de su tesis doctoral "Síntesis de Nuevos Materiales Microporosos Mediante Técnicas De Alta Capacidad ("*High-Throughput*")" así como el elevado número de publicaciones científicas de alto impacto derivadas de la misma.

Futura: Premio al mejor expediente académico de la licenciatura de química, o cualquier otra titulación relacionada con la ciencia y la tecnología química y cuyo título se hubiera obtenido en 2008. **Rodrigo Casanovas Perera**, Licenciado en Química por la Universitat de Illes Balears, por el brillante expediente académico acreditado en la Licenciatura de Químicas.

Para más información se puede visitar la web: <http://qiserver.ugr.es/JIQ/>

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

nocimientos básicos de la Química General, Química Orgánica e Inorgánica y sus aplicaciones en la Ingeniería".

En este contexto de cambio, con objeto de facilitar la información y la toma de decisiones, así como de contrastar opiniones y compartir experiencias, se organizó una Jornada específica, que intentó cubrir tanto aspectos metodológicos (aprendizaje basado en competencias, elaboración de guías docentes, aplicación del crédito ECTS, aprendizaje activo, uso de las TIC, nuevas formas de evaluación, etc.), como epistemológicos (¿qué contenidos deberían plantearse?) y de otro tipo (estructura de las enseñanzas de Química en uno o dos semestres, papel de la Química en las Ingenierías, etc.).

La Jornada fue auspiciada por el Grupo de Didáctica e Historia de la Física y de la Química de la Real Sociedad Española de Química y el Grupo de Innovación Educativa de "Didáctica de la Química", de la Universidad Politécnica de Madrid, y se celebró en la E.T.S. de Ingenieros Navales de la Universidad Politécnica de Madrid, el 2 de julio de 2009.

Participaron una centena de profesores de universidades de casi toda la geografía española. En la inauguración, el Director del Centro donde se celebró, D. Jesús Panadero, resaltó la importancia de la Química en la Ingeniería Naval (aceros, materiales compuestos, corrosión, pinturas, deterioro de materiales en medio salino, transporte de mercancías,

tratamiento de aguas, etc.). Por parte de la RSEQ, intervinieron D^a. Pilar Goya y D^a. Pilar Escudero, quienes indicaron cómo la Química es una Ciencia con fuertes implicaciones en amplios campos del saber. D^a. Rosa M. González Tirados y D. Santiago Miguel, como profesores de la Universidad Politécnica de Madrid, enfocaron sus intervenciones en la necesidad de renovación de las metodologías educativas. Posteriormente, en tres sesiones, se trataron los siguientes temas: Objetivos y contenidos, metodología educativa, y evaluación del proceso formativo y otros aspectos. Se finalizó con un debate sobre la temática general tratada. Los textos de los trabajos presentados en dicho evento se recogieron en un libro con el título de "La Química como materia básica de los grados de Ingeniería" (ISBN 978-84-7484-216-6 y accesible en la dirección Web: <http://www.etsii.upm.es/diquima/vidacotidiana/Libro.htm>) elaborado por un total de 45 autores. En un futuro número de esta revista se incluirá el análisis de las conclusiones principales de la Jornada.

Remitido por:

Gabriel Pinto

Comité Editorial *Anales* de Química
Vicepresidente del Grupo de Didáctica e Historia
De las RR. SS. EE. De Química y de Física



Fotografías de algunos de los participantes en la Jornada.

El impulso de la cultura científica española en *Cell*

Cell, la revista con el índice de impacto más alto en ciencias biomédicas, ha brindado la oportunidad a los científicos españoles de explicar las principales estrategias llevadas a cabo por la Confederación de Sociedades Científicas de España (COSCE) para fomentar la investigación, la cultura y la educación científica entre el público general y los representantes políticos. La COSCE es una plataforma única creada en 2005, que asocia a más de 30.000 científicos, agrupados en 60 sociedades científicas.

La revista incluye en el número 5 del volumen 137 del 29 de mayo de 2009, el artículo de comentario titulado "*Mind the Gap: Bringing Scientists and Society Together*" (Cuidado con la brecha: acercando a científicos y sociedad). El artículo aparece en la sección *Leading Edge* cuyo objetivo es acentuar los aspectos sociales, económicos y éticos de la investigación biomédica alrededor del mundo. Sin duda, la inquietud de los científicos españoles por fortalecer la ciencia como factor cultural y motor económico del país se ha internacionalizado gracias al impacto de *Cell*. A lo largo del artículo, se ponen de relieve las deficiencias organizativas y estructurales que padece la ciencia española y las mejoras a las que se podría llegar, recalcando que la transformación social a través

de la investigación, el desarrollo y la innovación depende de la suma de esfuerzos de sus científicos con todos los sectores de la sociedad hasta alcanzar la meta de una economía basada en el conocimiento.

Algunos de los motivos que han llevado a *Cell* a difundir las propuestas de los científicos españoles son las acciones que, en materia de política científica, este colectivo impulsa en España. En el primer apartado del artículo dedicado a "*Science at the forefront of Spanish Elections*" (La ciencia al frente de las elecciones españolas), se refleja cómo a partir de los comicios de 2004, los problemas de la ciencia han entrado en las agendas de los partidos políticos. Se detallan acciones como la propuesta de un "Pacto de Estado por la Ciencia", lanzada por la revista SEBBM (Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular) y que la COSCE presiona desde entonces para que se implemente. La propuesta de "Pacto de Estado por la Ciencia" fue el resultado de un intenso debate en el que se analizaron en clave de futuro las necesidades del sistema de ciencia y tecnología español. Su objetivo es lograr el consenso entre todos los partidos políticos del Parlamento en materia de inversiones para la ciencia y asegurar su compromiso para avanzar en investigación y

educación científica en España. En este sentido, se recuerda en el artículo que la ministra de Ciencia e Innovación, Cristina Garmendia, en su primera aparición pública en el Parlamento tras las elecciones de 2008, anunció su intención de promover el Pacto Nacional para la Ciencia en España, aunque parece que ha caído de nuevo en el olvido.

En el artículo, también se menciona la organización de debates públicos durante la campaña electoral de 2008, durante los cuales representantes de los cinco principales partidos políticos del país fueron invitados a presentar las medidas contenidas en sus programas electorales para mejorar la I+D. Esta acción permitió que partidos que representan todo el espectro político expresaran su compromiso frente a la I+D y mostraran su convencimiento de que el futuro de España pasa por convertirse en una sociedad basada en el conocimiento.



Ponentes y audiencia del debate organizado por COSCE el 7 de febrero de 2008.

Las acciones de la COSCE como vigía de la política científica también quedan expuestas en el texto. En febrero de este año, la ministra Garmendia presentó el borrador de la Ley de la Ciencia y la COSCE presentó un detallado estudio con propuestas de modificaciones al texto legal que obtuvo una amplia cobertura en los medios españoles. Los científicos reclamaron a través de la organización, un compromiso firme para que la Ley impulse la sociedad del conocimiento y la investigación española al máximo nivel mundial. Otras acciones relevantes son los informes periódicos sobre los análisis de los recursos destinados a la I+D+i en los Presupuestos Generales del Estado.

El artículo avanza con "*Uniting with a common goal*" (Unidos por un objetivo común). En este apartado se describe

extensamente la acción *CRECE* realizada en 2005 por la COSCE, la primera acción de envergadura y el primer gran éxito de la organización. La elaboración de dicho informe contó con la implicación de científicos, entidades filantrópicas, empresarios y periodistas, organizados para ofrecer soluciones prácticas al problema de la modernización de nuestro sistema de ciencia y tecnología. Tal empresa culminó con la publicación del *Informe CRECE*, que engloba los análisis de los cinco aspectos clave de la ciencia en España. Una delegación de científicos y participantes presentaron el informe a la vicepresidenta del gobierno, María Teresa Fernández de la Vega, y la propuesta de los científicos tuvo un gran impacto mediático nacional. Es oportuno mencionar que la propuesta de la nueva Ley de la Ciencia se ha servido de muchas de las recomendaciones aportadas por dicho informe.

Las acciones de la organización de los científicos españoles no sólo se circunscriben al ámbito de la política científica sino que la voluntad de acción implica a los ciudadanos en su conjunto. En el texto se explican otros programas diseñados para promover el diálogo y el conocimiento mutuo entre los distintos actores sociales. En primer lugar, el programa "*Enciende*" cuyo objetivo es promover el interés por la ciencia entre estudiantes de todas las etapas de la enseñanza, muy especialmente, la infantil. Y otro de los programas es "*Conoceros*", cuya misión es favorecer encuentros entre los científicos y los miembros del Parlamento español.

En el apartado final del artículo titulado "*Looking long-term*" (Mirando a largo plazo), se alerta del gran error que se podría cometer si en un escenario de crisis mundial, el gobierno recortara los presupuestos y las inversiones realizadas en ciencia. Por contra se señala la necesidad de presionar desde COSCE y otras instituciones para que la inversión sea sostenida y crezca en el tiempo. Como medida más allá de las fronteras españolas, se propone la creación, a semejanza de COSCE, de una gran confederación de científicos a nivel europeo, una plataforma desde donde continuar con el impulso que llevó a la creación del *European Research Council*, un gran hito para la investigación europea.

Las publicaciones y acciones de la COSCE pueden consultarse en el web: <http://www.cosce.org>.

Remitido por:

Joan J. Guinovart

Presidente de la COSCE

Director del Instituto de Investigación Biomédica

(IRB Barcelona)

Catedrático de la Universidad de Barcelona

9th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-9) (Oviedo, 30/6/09–4/7/09)

La 9th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-9) se celebró en el Auditorio Príncipe Felipe de Oviedo, durante los días 30 de junio al 4 de julio de 2009. Ésta ha sido la última, hasta ahora, de una serie de conferencias que se han establecido como foro internacional para la presentación y discusión de resultados de investigación en los diversos campos de la Química de Heteroátomos. A la primera edición, celebrada en Kobe (Japón) en 1987, siguieron otras con periodicidad –generalmente– trienal y con carácter rotatorio en países de Norteamérica, Europa y Asia:

1989 (Albany, Nueva York, EE UU), 1992 (Riccione, Italia), 1995 (Seúl, Corea), 1998 (London, Ontario, Canadá), 2001 (Lodz, Polonia), 2004 (Shanghai, China), 2007 (Riverside, California, EE UU). En ésta, su novena edición, el ICHAC ha retornado a Europa siendo acogido por primera vez en España, y además ha pasado a ser un evento bienal.

Siguiendo la tradición de estas conferencias, el ICHAC-9 ha conseguido convertirse en un evento científico primordial, aunando a químicos orgánicos e inorgánicos de todo el mundo para compartir sus intereses en las diferentes áreas de la qui-

mica de heteroátomos, tales como las aplicaciones en síntesis, catálisis, polímeros y materiales.

La organización de esta edición recayó en el grupo de Química Orgánica y Organometálica de la Universidad de Oviedo, y se llevó a cabo mediante la formación de un comité organizador integrado por nueve personas y dirigido por el profesor José Barluenga, quién actuó como *Chairman* del ICHAC-9. Se contó con el apoyo de patrocinadores públicos: Ministerio de Ciencia e Innovación, Consejería de Educación y Ciencia del Principado de Asturias (a través del Plan de Ciencia Tecnología e Innovación-PCTI Asturias), Ayuntamiento de Oviedo, Universidad de Oviedo, Fundación Universidad de Oviedo; de empresas relacionadas con la química: Lilly, Bruker y Scharlab; y del Grupo Especializado en Química Orgánica de la RSEQ. Desde estas páginas, se reitera nuestro agradecimiento a todos ellos. En la conferencia han participado más de 210 investigadores de más de 30 países de todo el mundo, siendo mayoritaria la presencia de asistentes procedentes de España y Japón.

En el ICHAC-9 se han impartido 9 conferencias plenarias a cargo de los profesores Takeshi Akasaka (Tsukuba Univ., Japón), Guy Bertrand (Univ. of California, Riverside, EE UU), Matthias Beller (Leibniz Inst. for Catalysis, Alemania), Nobuaki Kambe (Osaka Univ., Japón), Jean Marie Lehn (Strasbourg Univ., Francia), Tien-Yau Luh (National Taiwan Univ., Taiwan), Shengming Ma (Shanghai Inst. of Org. Chem., China), Nazario Martín (Univ. Complutense de Madrid, España) y Robert E. Mulvey (Univ. of Strathclyde, Reino Unido).

El profesor Bertrand fue el encargado de abrir el congreso con la conferencia inaugural titulada "*Carbenes and Bent-Allenes in Phosphorus Chemistry*" en tanto que la conferencia de clausura fue presentada por el profesor Lehn y llevó por título: "*Perspectives in Chemistry: From Supramolecular Chemistry towards Adaptive Chemistry*".



El Prof. Jean Marie Lehn (segundo por la derecha) ponente de la conferencia de clausura junto a (de izqda. a dcha.) Enrique Aguilar, Carlos Valdés (miembros del comité organizador del ICHAC-9) y el Prof. José Barluenga (*Chairman* del ICHAC-9) (Foto Miguel A. Maestro).

También se presentaron 21 conferencias invitadas y 48 comunicaciones orales cortas en sesiones paralelas en dos salas del auditorio. Algunas comunicaciones orales cortas fueron impartidas por representantes de grupos de investigación españoles o por españoles que desarrollan su investigación en el extranjero. Además, otras 68 comunicaciones fueron discutidas y debatidas en tres sesiones de presentaciones en póster, todas ellas muy animadas; una de ellas se celebró en horario de 9 a 10:30 de la noche mientras se degustaba cerveza, mientras que las otras dos se llevaron a cabo después de las comidas y se acompañaron de café. Se

otorgó un premio al mejor póster presentado, que consistió en un diploma y una subscripción de un año al *Synfacts*, por cortesía de Georg-ThiemeVerlag KG; a juicio del comité científico del ICHAC-9, se hizo merecedor del premio el póster titulado "*A novel aziridination-aza Diels-Alder cascade process that converts furans into N-substituted 1,2-dihydropyridines*", presentado por Manuel Romero Fructos (Univ. de Huelva).



Animados debates durante las pausas de café y sesiones de posters del ICHAC-9 (Foto Miguel A. Maestro).



Algunos de los estudiantes y post-docs del grupo de Química Orgánica y Organometálica de la Universidad de Oviedo que colaboraron en la organización del ICHAC-9 (Foto C. Valdés).

En su conjunto, los temas de las conferencias y comunicaciones dieron una visión de las tendencias actuales de la química de heteroátomos y analizaron este tipo de química desde diversas perspectivas como: ligandos en catálisis, catalizadores orgánicos, componentes de polímeros y materiales, síntesis de compuestos con heteroátomos, enlaces entre heteroátomos, etc. El libro de resúmenes del ICHAC-9 se puede descargar gratuitamente desde: <http://www.uniovi.es/ichac9/>, en formato pdf.

Para el grupo de Química Orgánica y Organometálica de la Universidad de Oviedo, organizador del ICHAC-9, ha sido una satisfacción acoger a los químicos, principalmente orgánicos e inorgánicos, que de todas partes del mundo se desplazaron a nuestra ciudad para participar en la conferencia.

Finalmente, en la sesión del comité científico se acordó que el ICHAC retorne al país de sus orígenes con ocasión de su décima edición. Por tanto, el ICHAC-10 tendrá lugar en Kyoto (Japón) durante el verano de 2011, siendo el profesor Tokitoh el responsable de la organización del mismo.

Remitido por: **Enrique Aguilar**
Secretario del Comité Organizador del ICHAC-9

Theoretical Chemistry: Modeling Reactivity from Gas Phase to Biomolecules and Solids. Un Congreso Internacional en honor de Santiago Olivella (Barcelona, 29/06/09–03/07/09)

Del 29 de junio al 3 de julio de 2009 se ha celebrado en Barcelona un Congreso que bajo el título: *Theoretical Chemistry: Modeling Reactivity from Gas Phase to Biomolecules and Solids* tenía como objetivo conmemorar dos importantes efemérides, el 65 cumpleaños de uno de los investigadores más relevantes de la Química Teórica en España, Santiago Olivella y el 25 aniversario de la creación de la *Xarxa de Química Teórica i Computational de Catalunya*. Ambos hechos, sin duda merecedores de este homenaje internacional, están por otro lado relacionados, ya que la Xarxa fue creada por iniciativa del propio Santiago y de otros dos preeminentes investigadores catalanes, Joan Betrán y Ramón Carbó. De hecho la conferencia inaugural del Congreso corrió precisamente a cargo del Prof. Joan Bertrán. La Xarxa es hoy una red de excelencia de una gran relevancia e impacto tanto a nivel nacional como internacional, que aglutina a más de 200 investigadores, agrupados en un total de 19 grupos de investigación reconocidos, y que ha hecho de Cataluña un polo absolutamente privilegiado en el campo de la Química Teórica y Computacional, cuya influencia beneficiosa ha alcanzado, a través de diversas colaboraciones científicas y de docencia a nivel del post-grado, a las demás regiones españolas.

La talla humana y científica de Santiago se ha visto reflejada en el éxito de participación en este evento, que ha contado entre sus ponentes con figuras de talla mundial. Baste decir que entre los conferenciantes figuraban cuatro científicos, Walter Thiel, Peter Pulay, Sason Shaik y Gernot Frenking, galardonados con la *Schrödinger Medal*, que es la máxima distinción que otorga anualmente la *World Association of Theoretical and Computational Chemists* (WATOC), el

Presidente de la *American Chemical Society*, Joe S. Francisco, el Editor de *Theoretical Chemistry Accounts*, Chris Cramer, y otro amplio elenco de relevantes investigadores de España y de otros diez países más. Santiago fue, junto con Joan Bertran, uno de los pioneros de la Química Cuántica en nuestro país y son muchos los que estamos en deuda con ambos por todo lo que han aportado a este campo, por su trabajo serio y concienzudo, pero sobre todo por su gran generosidad. Este homenaje a Santiago se suma a la edición de un número especial de la revista *Theoretical Chemistry Accounts* en su honor.

El Congreso fue un ejemplo de perfecta organización, con muy animadas discusiones y sesiones de gran nivel científico, en un marco amigable propiciado por la hospitalidad de la Universidad de Barcelona, de la *Societat Catalana de Química*, y por el buen hacer de todos los miembros del Comité Organizador, encabezado por Josep María Anglada. Particularmente brillante y emotiva fue la conferencia final impartida por la Profesora Rosa Caballol, en la que nos deleitó con una glosa de las "andanzas" de Santiago entremezcladas con el propio devenir de la Xarxa desde su creación hasta hoy, a lo largo de sus 25 años de existencia.

Esta obligatoria reseña, dada la relevancia científica del evento, sirva también para ser un homenaje adicional a la figura de Santiago Olivella y a la *Xarxa de Química Teórica i Computational de Catalunya*.

Remitido por:

Manuel Yáñez
Departamento de Química
Universidad Autónoma de Madrid



Foto oficial del congreso en honor de Santiago Olivella.

59th Meeting of Nobel Laureates (Lindau, 28/06/09–03/07/09)

En 1951 dos médicos de Lindau (Bavaria, Alemania), Gustav Parade y Franz Karl Hein, con el apoyo y mecenazgo del Conde Lennart Bernadotte af Wisborg, decidieron que una forma de ayudar a la reconstrucción de la Alemania de posguerra sería poner en contacto a científicos ganadores del premio Nobel con los jóvenes alemanes. Así nacieron los *Lindau Meetings of Nobel Laureates* (www.lindau-nobel.de), con la intención de que esta reunión sirviera de inspiración a los jóvenes a través reuniones y discusiones en un ambiente informal y de cercanía entre todos los participantes.

Desde entonces, todos los años a las orillas del lago Constanza, se organiza este congreso que se ha internacionalizado y a través de los años se ha convertido en una de las reuniones científicas de mayor prestigio. Cada congreso se dedica de forma rotativa a las especialidades de Medicina o Fisiología, Física, Química y Economía. Este año, del 28 de junio al 3 de julio, ha tenido lugar el mitin dedicado a la Química, que se ha organizado en torno a la temática del cambio climático y el desarrollo fuentes renovables de energía.

El mitin fue inaugurado por la Condesa Bettina Bernadotte y el presidente de la Comisión Europea, Manuel Durão Barroso. La reunión contó con la participación de 580 estudiantes jóvenes investigadores de 67 países y de 23 premios Nobel, entre los que estaban los tres ganadores del premio Nobel de Química en 2008, por el descubrimiento y utilización de la proteína verde fluorescente (GFP) como marcador molecular: O. Shimomura, M. Chalfie y R. Y. Tsien. Dada la temática central del mitin, participaron de manera especialmente activa los tres ganadores del premio Nobel de 1995 por el descubrimiento de la relación entre los clorofluorocarbonos (CFCs) y el agujero de la capa de ozono: M. Molina, P. J. Crutzen y F. S. Rowland. Fue especialmente destacable la participación del mejicano Mario Molina, quien ofreció una visión optimista del problema del cambio climático, e hizo hincapié en la capacidad humana para resolver los problemas con los que se encuentra, una vez conocido su origen, y puso como ejemplo la reducción del agujero en la capa de ozono como consecuencia de la aprobación del protocolo

de Montreal en 1987. Otras charlas que atrajeron una gran atención fueron las de Richard Ernst (RMN de alta definición) y Sir Harold Kroto (descubrimiento de los fullerenos). También participó en los foros de discusión R. K. Pachauri, presidente del *Intergovernmental Panel on Climate Change* (IPCC), institución que compartió el premio Nobel de la paz con Al Gore en 2007. Todas las conferencias se pueden ver de forma gratuita en www.lindau-nobel.de siguiendo el enlace "livestream".

Por lo que respecta a la participación española, a falta de un premio Nobel propio, asistimos en representación de la COSCE, Ana Carmen Albéniz (Universidad de Valladolid), Eugenio Vázquez y Diego Peña (Universidad de Santiago), Cristina Nevado (ETH, Zürich), Laia Pedro (Universidad de Alicante), Beatriz Herguedas (Universidad de Zaragoza), Asier González (Universidad Autónoma de Barcelona), Elena Herrero (ICIQ, Tarragona), Nuria Rodríguez (Universidad de Kaiserslautern), José Manuel García (CSIC, Sevilla) y Emilio Pérez (IMDEA nanociencia, Madrid). Para todos nosotros este congreso ha representado una ocasión única de conocer a los premios Nobel de manera muy cercana, gracias al formato de charlas por la mañana y coloquios por la tarde y a la buena disposición de alguno de algunos de los premiados, que sufrieron pacientemente la persecución de los jóvenes a la caza del autógrafa o la fotografía correspondiente, quién sabe si con aquello de "todo se pega menos la hermosura" en mente.

En 2010 se celebrará la sexagésima edición del *Lindau Meeting of Nobel Laureates*, dedicado en esa ocasión especial de forma conjunta a Física, Medicina o Fisiología y Química, sin duda una oportunidad que los más jóvenes no deberían dejar pasar.

Remitido por:

Emilio M. Pérez

IMDEA Nanociencia

Universidad Complutense de Madrid

Eugenio Vázquez

Departamento de Química Orgánica

Universidad de Santiago de Compostela



Izquierda. Algunos de los participantes españoles con la Condesa Bettina Bernadotte. Derecha. Empezando por arriba y de izquierda a derecha: Erwin Neher, Peter Agre, Martin Chalfie, Aaron Ciechanover, Hartmut Michel, Mario Molina. Abajo, también de izquierda a derecha: Walter Kohn, Rudolf Marcus, Werner Arber, Robert Grubbs, Ryoji Noyori, F. Sherwood Rowland, la Condesa Bettina Bernadotte, Gerhard Ertl, Robert Huber y Richard Ernst.

Noticias científicas relevantes

Papiroflexia con ADN

Además de codificar la información genética, la molécula de ADN posee propiedades de auto-ensamblaje únicas que la convierten en el *ladrillo* perfecto para la construcción de nanoestructuras de formas específicas.

Hasta el momento, el plegado controlado de cadenas simples o dobles hélices de ADN, método también conocido con el nombre de *origami* de ADN, había permitido el diseño de estructuras de ADN bidimensionales triangulares, cuadradas o con forma de estrella de cinco puntas (*Nature* **2006**, *440*, 297–302).

Recientemente, un grupo de científicos estadounidenses (*Nature* **2009**, *459*, 414–418) y daneses (*Nature* **2009**, *459*, 73–76) han extendido este método hasta la tercera dimensión consiguiendo la síntesis de poliedros tridimensionales con formas diversas como por ejemplo cruces, icosaedros o cubos (Figura 1).

El procedimiento para la fabricación de estas nanoestructuras se basa en el diseño por ordenador de modelos atómicos para los distintos componentes del poliedro, permitiendo organizar las cadenas de ADN en torno a la estructura poliédrica deseada y determinando así el número y tipo de oligonucleótidos necesarios.

El transporte de materiales figura entre las aplicaciones directas de estos cuerpos geométricos de ADN, al tener estos nanocubos cavidades de tamaño suficiente como para poder albergar ribosomas o polivirus y al haber sido posible equiparlos con mecanismos de control de apertura de una de sus caras.

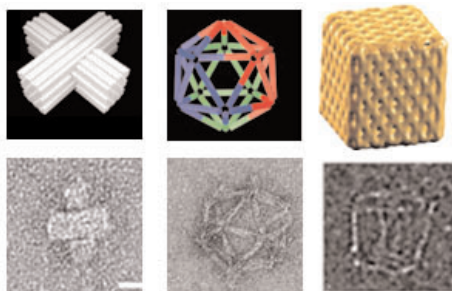


Figura 1. Modelos moleculares tridimensionales de nanoestructuras de ADN sintetizadas recientemente.

El nitruro de boro entre los más finos

Científicos alemanes de la Universidad de Ulm han conseguido preparar por primera vez membranas estables de espesor monoatómico de nitruro de boro hexagonal (Figura 2), incluso una vez separadas del sustrato utilizado para su crecimiento (*Nano Lett.* **2009**, *9*, 2683–2689).

Al igual que el carbono, el nitruro de boro se presenta en distintas formas alotrópicas, siendo el nitruro de boro cúbico, análogo al diamante, y el nitruro de boro hexagonal, análogo al grafito, las estructuras moleculares más comunes, aunque también es posible encontrar este compuesto en forma de nanotubos y fullerenos. El procedimiento seguido para la preparación de las monocapas de nitruro de boro consiste en el rebajado, mediante haces electrónicos de alta energía, de escamas de menos de diez capas atómicas preparadas mediante escisión metálica.

Según el equipo alemán, son muchas las aplicaciones pre-

vistas para este tipo de membranas. El nitruro de boro hexagonal es un material de banda ancha con excelentes propiedades mecánicas y ópticas en un amplio rango de temperaturas. Además, al tener un parámetro de red prácticamente idéntico al del grafito, una interesante aplicación potencial sería su utilización en la fabricación de dispositivos mixtos o como plantilla para aumentar el ancho de banda en el grafito.



Figura 2. Imagen de transmisión electrónica de alta resolución (HRTEM) de monocapas de nitruro de boro (señaladas en rojo).

Sulfonio boranos como excelentes detectores de cianuro en agua

El anión cianuro es uno de los aniones inorgánicos más tóxicos y letales que existen para el ser humano. Su gran afinidad por el Fe^{3+} explica la rápida formación de un complejo estable entre el anión y el hierro trivalente del enzima citocromo oxidasa, lo que inhibe la utilización del O_2 por parte de la célula, paralizando la cadena respiratoria celular.

Debido a la gran toxicidad de esta sustancia, la agencia de protección medioambiental de Estados Unidos (EPA) estableció en 0,2 ppm la concentración máxima permitida de cianuro en aguas potables, (50 ppb en la Unión Europea).

Un equipo de la Universidad de Tejas en Austin (EE UU) ha sintetizado recientemente un sulfonio borano catiónico (Figura 3), compuesto por fragmentos mesitil-borilo y sulfonio conectados a través de un *o*-fenileno, capaz de detectar concentraciones inferiores a 50 ppb de iones cianuro (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 4957–4960).

El mecanismo de detección se basa en la desactivación de la fluorescencia del complejo catiónico, que alcanza hasta el 33% después de una hora, tras añadir 50 ppb de CN^- a la muestra, debido a la formación de un enlace entre el anión CN^- y el átomo de boro. En el enlace de este catión con el grupo CN^- también participa el sulfonio. El análisis NBO (Natural Bonding Orbital) de la estructura formada revela la presencia de una interacción dador-aceptor $\pi(\text{C}\equiv\text{N}) \rightarrow \sigma^*(\text{S}-\text{C})$ además de una retrodonación $\text{lp}(\text{S}) \rightarrow \pi^*(\text{C}\equiv\text{N})$.

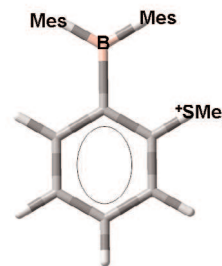


Figura 3. Estructura del sulfonio borano catiónico capaz de detectar concentraciones de CN^- inferiores a 50 ppb.

Interacciones *octapi* en la síntesis de [2]catenanos

Un grupo de investigadores australianos ha presentado recientemente el primer complejo supramolecular *octapi* (Figura 4). Se trata de un [2]catenano formado por la interconexión de dos macrociclos de Pd que adicionalmente dan lugar a 8 interacciones de tipo π (*octapi*) entre anillos aromáticos, obteniéndose una estructura muy estabilizada que alcanza una longitud de 2,5 nm (*J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 10372–10373).

Tradicionalmente, la síntesis de catenanos se ha llevado a cabo a través del uso de precursores *plantilla* pre-ensamblados, como complejos de metales de transición, complejos aromáticos dador-aceptor o sistemas que contienen enlaces de hidrógeno, que generan la especie deseada tras sufrir reacciones de ciclación. En el presente estudio, sin embargo, los autores aprovechan el efecto cooperativo derivado del apilamiento de varias interacciones de tipo π entre anillos aromáticos como fuerza motriz para la preparación de esta máquina a escala nanométrica.

Para la síntesis de este [2]catenano los autores utilizaron iones de Pd coordinados a fosfinas fenil-sustituídas y ligandos piridina-pirazol sustituidos.

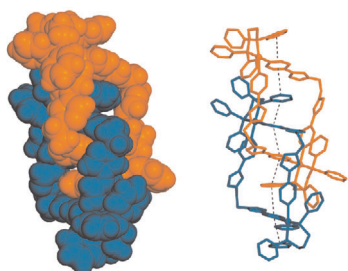


Figura 4. El empleo de interacciones *octapi*, 8 interacciones de tipo π entre anillos aromáticos, junto con la coordinación de átomos de fósforo y nitrógenos piridínicos a centros metálicos de Pd han permitido la síntesis de un nuevo [2]catenano.

Una jaula de hierro para el fósforo blanco

La naturaleza pirofórica del P_4 tetraédrico o fósforo blanco, consecuencia de la baja energía de sus enlaces P-P (200 kJ/mol) y de la pequeña barrera asociada a la oxidación de los mismos (de tan sólo 330 kJ/mol), es, y ha sido explotada con fines militares, siendo este alótropo de fósforo un violento agente incendiario.

Un equipo internacional de investigadores del Reino Unido y Finlandia ha ideado una original manera de controlar la estabilidad de las moléculas de P_4 , en presencia de oxígeno y moléculas de agua, a través de su encapsulación (Figura 5) en el interior de una *jaula* a base de iones Fe^{2+} (*Science* **2009**, *324*, 1697–1699).

Al parecer, no es el tamaño del poro del tetraedro, de radio 1 Å, el responsable de evitar el contacto del P_4 con las moléculas de O_2 , ya que pequeñas deformaciones del poro inducidas por fluctuaciones térmicas permitirían el paso del oxidante al interior. Más bien, se trata del tamaño del producto de combustión resultante, demasiado voluminoso en comparación con la cavidad del tetraedro.

La síntesis de esta *jaula* supone un importante avance para la seguridad en el manipulado, transporte y limpieza de derrames de P_4 . Actualmente, el esfuerzo de estos investigadores se centra en el diseño de *jaulas* análogas, de mayor tamaño que la preparada, para encapsular moléculas de P_4 , que permitirían el aislamiento y la estabilización de moléculas huésped más complejas.

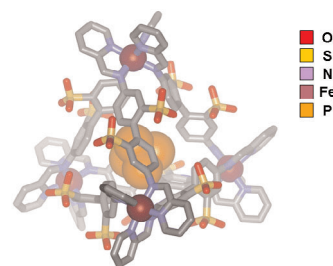


Figura 5. La encapsulación de moléculas de P_4 en el interior de un compuesto *jaula* formado por iones Fe^{2+} permite controlar su estabilidad en presencia de O_2 y H_2O .

Disulfonimidias quirales: catalizadores asimétricos muy prometedores

Un grupo de científicos del Instituto Max-Planck para la investigación del carbón de Müllheim (Alemania), entre los que destacan las españolas Pilar García-García y Patricia García-García, han sintetizado un nuevo catalizador asimétrico altamente eficiente en la adición nucleófila de silil-enol éteres a un aldehído, conocida como reacción aldólica de Mukaiyama (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 4363–4366).

Este nuevo tipo de catalizadores, basados en derivados binaftílicos de disulfonimidias quirales, pueden ser empleados hasta en 8800 ciclos catalíticos, valor inusual en organocatálisis y sin precedentes en reacciones de Mukaiyama enantioselectivas. Estos organocatalizadores, además, suponen una excelente alternativa frente a catalizadores como la triflimida o el ácido trifílico, para llevar a cabo reacciones aldólicas en su versión asimétrica. Por otro lado, la base correspondiente, la disulfonimida aniónica, podría utilizarse, junto a cationes de metales de transición u otros cationes orgánicos, en procesos de catálisis asimétrica dirigida por contraiones (ACDC).

El mecanismo propuesto por los autores para explicar la reactividad de estos catalizadores se basa en la sililación inicial del catalizador (Figura 6), que conduce a la formación de una *N*-silil disulfonimida quiral, que activaría el aldehído a través de una *O*-sililación.

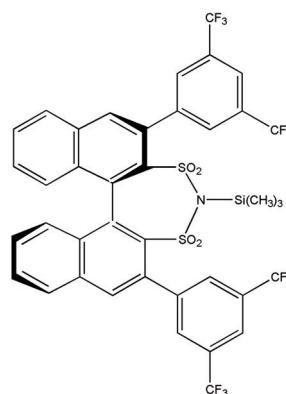


Figura 6. Científicos del instituto Max-Planck para la investigación del carbón han descrito un nuevo catalizador asimétrico basado en una disulfonimida quiral para la reacción aldólica de Mukaiyama.

Seda de araña más resistente

Propiedades mecánicas como la dureza y la rigidez de biomateriales presentes por ejemplo en la cutícula de insectos, agujones o garras parecen estar correlacionadas con la presencia de impurezas metálicas de cinc, magnesio, calcio y/o cobre en su composición. Inspirados en este fenómeno natural, un

grupo de científicos alemanes ha conseguido incorporar pequeñas cantidades de cinc, titanio, aluminio y agua en la estructura proteica de la seda de araña a través de infiltraciones de fase vapor de múltiples pulsos (MPI) utilizando un equipo convencional de deposición de capa atómica (ALD) (*Science* **2009**, 324, 488–492). Estas infiltraciones metálicas tienen como consecuencia el incremento de la resistencia mecánica de las fibras. El agente desencadenante del proceso de endurecimiento de las fibras son las moléculas de agua con las que, junto a los metales, se bombardea la seda de araña. Éstas atacarían los enlaces de hidrógeno que interconectan las proteínas entre sí debilitándolos. La reactividad de estos enlaces junto a la capacidad de penetración de los metales en la fibra, que se alcanza mediante la técnica MPI, favorecerían la formación de los complejos metal-proteína (Figura 7).

Las conclusiones de estos resultados, junto a la versatilidad del MPI, hacen pensar en el uso potencial de esta técnica para el incremento de la dureza y la resistencia de otros biomateriales.

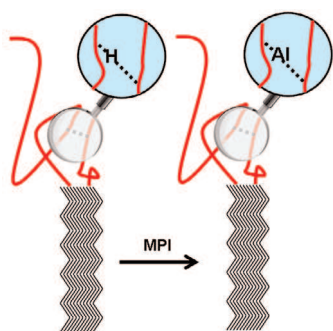


Figura 7. La incorporación de pequeñas cantidades de Zn, Ti, Al y agua favorece la formación de complejos metal proteína que endurecen la seda de araña.

Iones alcalinos que se decantan por entornos aromáticos. Compuestos *bivalvos* de Rb(I) y Cs(I)

Investigadores de la Universidad de Melbourne (Australia) han sintetizado por primera vez en medio acuoso clatratos de Rb(I) y Cs(I) en los que el catión metálico se encuentra exclusivamente rodeado de anillos aromáticos (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, 48, 3129–3132).

Se trata de los aniones $[\text{Rb}(\text{ctc.H}_5)(\text{ctc.H}_4)]^{2-}$ y $[\text{Cs}(\text{ctc.H}_5)(\text{ctc.H}_4)]^{2-}$, donde *ctc.* simboliza la molécula de ciclotriscatequileno, sintetizados a partir de la reacción del compuesto hexafenólico ciclotriscatequileno con cloruros de rubidio, cesio, y guanidinio en presencia de un exceso de amoníaco.

Ambos complejos aniónicos presentan estructura *bivalvo* cerrada (Figura 8) debido a los enlaces de hidrógeno que se establecen entre los aniones *ctc.*, que harían las veces de concha. El catión alcalino ocupa el centro de la estructura en contacto con los seis anillos aromáticos.

Hasta el momento, la síntesis de complejos de cationes K(I) análogos a los anteriores no ha sido posible, probablemente debido a que este catión es demasiado pequeño para interactuar al mismo tiempo con toda la estructura aromática. En su lugar, se forma un complejo de composición $\text{K}(\text{ctc.H}_5)\text{-C}_2\text{H}_5\text{OH}$, donde el catión se sitúa en el centro de la semiesfera creada por un anión ctc.H_5^- y al mismo tiempo está enlazado a otras dos unidades de ctc.H_5^- . En el caso de cationes de mayor tamaño, como el NH_4^+ , las dos *valvas* ya no se encuentran cerradas sino parcialmente abiertas para acomodarlo.

Estudios de espectrometría de masas revelan que estos clatratos no sólo persisten en disolución sino que también presentan tendencia a autoensamblarse.

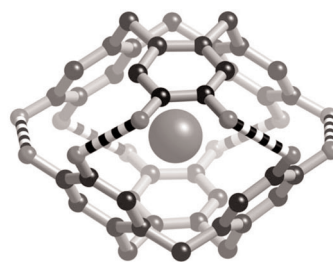


Figura 8. Estructura del complejo *bivalvo* $[\text{Rb}(\text{ctc.H}_5)(\text{ctc.H}_4)]^{2-}$.

Un enlace excepcionalmente corto

Por primera vez, científicos alemanes y estadounidenses presentan en un estudio conjunto teórico-experimental datos geométricos fiables de la estructura sólida para el clorotrinotrometano (*Nat. Chem.* **2009**, 1, 229–235).

Este α -halógeno derivado del trinitrotrometano, que a su vez se comporta como un pseudohalógeno, presenta múltiples características estructurales interesantes fruto de interacciones intra- e intermoleculares, además de la distancia C-Cl más corta (1.694 Å) encontrada hasta el momento para carbonos tetraédricos.

Efectos intermoleculares como la formación de *enlaces de halógeno*, resultado de la localización de regiones electrodeficientes (huecos σ positivos) sobre los átomos de cloro, fueron barajados inicialmente como posibles causas del inusual acortamiento de la distancia C-Cl.

Sin embargo, cálculos estructurales basados en la teoría del funcional de la densidad revelan la atracción electrostática entre los átomos de oxígeno de los grupos nitro y la carga positiva soportada por los átomos de cloro (Figura 9) como la responsable del refuerzo de la distancia de enlace C-Cl. Prueba de ello es que esta distancia disminuye 0,013 Å cuando se fuerza a 3 de los 6 oxígenos de la molécula a ser coplanares con el enlace C-Cl.

De acuerdo con los autores, el estudio de compuestos como el cloronitrometano cuyas geometrías se desvían de los rangos normales permite evaluar la validez de los modelos de enlace químico manejados por la comunidad científica.

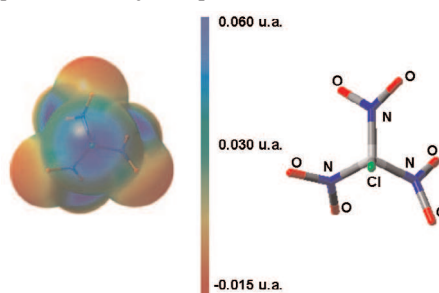


Figura 9. El mapa de potencial electrostático de la molécula de cloronitrometano permite entender el inusual acortamiento de la distancia C-Cl.

Poliuretanos que se reparan solos

Investigadores de la Universidad Southern Mississippi han desarrollado fibras de poliuretano heterogéneas capaces de auto-repararse al ser expuestas a luz ultravioleta (*Science* **2009**, 323, 1458–1460).

Estas redes de poliuretano se obtienen de la reacción del quitosán oxetano con diisocianato de hexametileno y poli-etilenglicol. Cada uno de estos reactivos cumple una función específica dentro del material polimérico. Por ejemplo, el

quitosán (Figura 10, azul), procedente de la deacetilación de la quitina y elemento estructural del exoesqueleto de los crustáceos, proporciona sensibilidad UV a las fibras, y el anillo tensionado de oxetano (Figura 10, rojo) genera fácilmente biradicales, tras sufrir el material daño mecánico.

El mecanismo de reparación de las fibras se basa en la reacción radicalaria iniciada por luz UV que provocaría la pérdida de urea (Figura 10, verde) y la rotura de enlaces tipo éter de la red polimérica. La posterior reacción de los fragmentos de la cadena de quitosán con los radicales procedentes de la fragmentación del anillo de oxetano daría lugar a la formación de enlaces cruzados entre las cadenas del polímero, reparándolo.

Según los autores, la incorporación de estas fibras de poliuretano a la pintura de nuestros coches permitiría la reparación de arañazos en cuestión de horas en un día soleado.

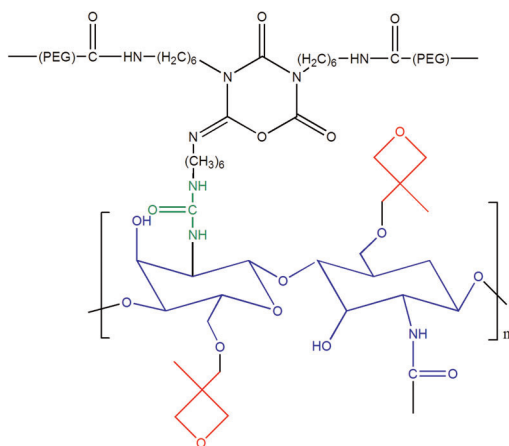


Figura 10. Estas fibras de poliuretano heterogéneas son capaces de auto-repararse tras ser expuestas a la luz solar.

ITQ-37: la primera zeolita quirral de poro extragrande

El control de la forma, el tamaño y la distribución de los poros en la síntesis de tamices moleculares cristalinos ha permitido ampliar el campo de aplicación de estos materiales porosos, tradicionalmente utilizados como catalizadores, intercambiadores de iones y adsorbentes, a disciplinas como la microelectrónica o el diagnóstico médico.

Los poros en este tipo de materiales se clasifican, según su tamaño, en microporos, si el tamaño es igual o inferior a 2 nm, mesoporos, si el diámetro oscila entre 20 y 50 nm y macroporos, si su tamaño es mayor.

Uno de los principales desafíos de la química en este área, constituye la obtención de materiales con poros cada vez mayores, que permitiría su uso como nanoreactores. Un mayor tamaño del poro añade flexibilidad al material, aumentando así la diversidad de reactivos que pueden reaccionar en su interior.

En este sentido, científicos de la Universidad de Estocolmo (Suecia) y del Instituto de Tecnología Química de Valencia, dirigidos por el profesor Avelino Corma, han presentado la primera zeolita mesoporosa de estructura quirral (*Nature* 2009, 458, 1154-1158). Se trata de la zeolita ITQ-37, de fórmula $(C_{22}N_2H_{40})_{10.5}(H_2O)_x [Ge_{80}Si_{112}O_{400}H_{32}F_{20}]$, caracterizada por un tamaño de poro de aproximadamente 20 Å y por una de las densidades (*Framework Density*), 10,3 átomos de Si o Ge por 1 Å³, más bajas registradas para óxidos cristalinos tetracoordinados. Estudios de microscopía electrónica de alta resolución y difracción de rayos X han determinado que la ITQ-37 sigue la estructura de una red de SrSi₂ y posee dos cavidades únicas, cada una de ellas conectadas a otras tres

formando un canal giroidal. Son precisamente estas cavidades las responsables de conferir quiralidad al material.

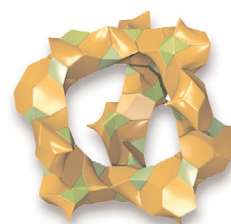


Figura 11. Un equipo de científicos españoles y suecos sintetizan por primera vez una zeolita quirral, con un único canal giroidal, caracterizada por poros de 20 Å de diámetro.

Complejos bimetalicos de Pd(III): intermedios en la formación de enlaces C-heteroátomo

Los estados de oxidación más comunes adoptados por el metal de transición paladio en reacciones de catálisis son 0, +1, +2 ó +4. Debido a la ausencia de referencias en la literatura a reacciones en las que el paladio actúa con estado de oxidación +3, el papel que las especies de Pd(III) pueden jugar en reacciones de catálisis no ha sido hasta el momento investigado. Por primera vez, científicos de la Universidad de Harvard demuestran que determinadas reacciones de formación de enlaces C-Cl, C-Br y C-O transcurren a través de complejos bimetalicos de Pd(III), (*Nat. Chem.* 2009, DOI:10.1038/nchem.246), cuestionando así el mecanismo, hasta la fecha aceptado, que determina que la funcionalización de enlaces C-H catalizada por Pd tiene lugar a través de ciclos redox que involucran Pd(II)-Pd(IV).

El ciclo catalítico propuesto para la formación de la 10-X-benzo[h]quinolina (X=bromo, cloro) comienza con la reacción del complejo cíclico de Paladio (II) **1** (Figura 12) con un oxidante como el PhCl₂ o la N-clorosuccinimida (NCS) dando lugar al complejo bimetalico de Pd (III) **2**. La posterior eliminación reductora del complejo **2** seguida de una ciclometalación genera el compuesto orgánico deseado **3**, así como la recuperación del catalizador **1**.

Según los autores, los dos átomos de Pd del complejo bimetalico participarían sinérgicamente en las reacciones de oxidación y eliminación reductiva, utilizando cada núcleo metálico un electrón.

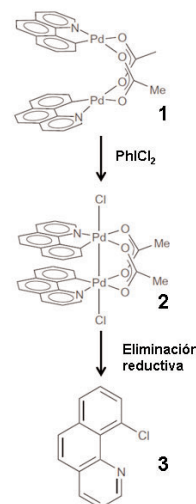


Figura 12. Científicos de la Universidad de Harvard aíslan un complejo bimetalico de Pd(III), **2**, como intermedio en la reacción de formación de enlaces C-heteroátomo.