

Desde el Comité Editorial de Anales queremos felicitar a los socios que han sido galardonados con diversos premios y distinciones en reconocimiento a su trabajo y a sus grupos de investigación respectivos.

Concesión de tres ERC *Advanced Grants* a tres investigadores españoles

El Consejo Europeo de Investigación (*European Research Council*, ERC) ha concedido tres *Advanced Grants* a nuestros compañeros:

- Antonio M. Echavarren, con el proyecto “Advancing Gold Catalysis”;
- Nazario Martín con el proyecto “Chiral Allotropes of Carbon”;
- Romà Tauler con el proyecto “Chemometric and High-throughput Omics Analytical Methods for Assessment of Global Change Effects on Biological and Environmental Systems”.

“Las becas ERC *Advanced Grant* están dirigidas a investigadores que se han establecido como líderes excepcionales en sus respectivos campos de investigación”—tal como dice la página web de las becas ERC *Advanced Grants*.

Estas becas millonarias concedidas por el único criterio de excelencia científica permiten a los directores de investigación, **reconocidos como excepcionales**, realizar proyectos pioneros de alto riesgo que abran nuevos caminos en sus respectivos campos de investigación o en otros dominios. El ERC promueve una investigación de la máxima calidad en Europa mediante la financiación competitiva y respaldar las investigaciones de vanguardia iniciadas por los propios investigadores en todos los campos de investigación, con arreglo al criterio de la excelencia científica.



Profesor Antonio M. Echavarren

El **Profesor Antonio M. Echavarren**, es *Group Leader* y Subdirector de asuntos académicos del Instituto Catalán de Investigaciones Químicas (ICIQ). “La concesión de esta beca supone una de las mayores satisfacciones en mi carrera

científica”, dice Antonio Echavarren. “Es un reconocimiento al esfuerzo personal tanto como al de un grupo formado por colaboradores jóvenes que, aunque ha ido cambiando mucho con el tiempo, siempre se ha destacado por su talento y entusiasmo”.

Antonio M. Echavarren se ha establecido como un investigador de referencia en la investigación sobre catálisis del oro. Su equipo se ha convertido en uno de los grupos de investigación pioneros en este campo. Echavarren ha jugado un notable papel en el desarrollo de la catálisis homogénea del oro y así lo reconoce la concesión de esta beca europea.

“La beca ERC *Advanced Grant* nos va a permitir explorar nuevas áreas de la química del oro, desarrollando nuevos tipos de catalizadores que permitan acceder a objetivos sintéticos más ambiciosos, tanto en lo que se refiere a nuevos métodos de construcción de moléculas complejas como en aplicaciones en química de materiales”.

El ICIQ es uno de los centros de investigación españoles más exitosos y que cuenta con un mayor porcentaje de ERC por grupo de investigación, con dos *Advanced Grants* y cinco *Starting Grants*, un total de 7 ERC entre los 18 grupos de investigación con los que cuenta el centro.



Profesor Nazario Martín

El **Profesor Nazario Martín** es Catedrático de la Universidad Complutense de Madrid y Director Adjunto del Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA). El proyecto presentado está dirigido a responder a la pregunta fundamental de cómo introducir quiralidad en una variedad de nanoestructuras de carbono y como ésta puede modificar las propiedades de las nuevas nanoformas de carbono en la búsqueda de nuevas aplicaciones en ciencia de materiales y nanotecnología. El proyecto describe por tanto un programa de investigación fundamental y tecnológico diseñado para una mejor comprensión del desarrollo de

nanoestructuras de carbono quirales mediante el uso de la química covalente y supramolecular y su posterior modificación química, que permita acceder a nuevas y sofisticadas nanoarquitecturas supramoleculares en 3D.

Este importante reto científico no ha sido abordado hasta ahora en Europa debido, en parte, a las dificultades inherentes de trabajar con estos materiales de carbono y, particularmente, debido a la falta de un protocolo químico eficaz para preparar nanoformas de carbono quirales. En este sentido la publicación pionera en este campo viene del grupo de Materiales Moleculares Orgánicos de la UCM dirigido por Nazario Martín que fue publicada en la prestigiosa revista *Nature Chemistry* en 2009 en la que se utiliza, por primera vez, la catálisis asimétrica en una síntesis de fullerenos. Este trabajo considerado como una “prueba de concepto” se ha visto potenciado con el uso de organocatálisis en la preparación de fullerenos quirales publicada por el mismo grupo en *Angewandte Chemie International Edition* en este año 2013.

El **Profesor Romà Tauler** es Profesor de Investigación del Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua del CISC y Presidente de la Sociedad Catalana de Química desde el año 2008. Su actividad investigadora está centrada en el campo de la quimiometría, siendo un especialista de ámbito internacional. De especial mención son sus aportaciones en el desarrollo de métodos de resolución multivariante y sus aplicaciones en el campo de la química analítica, química bioanalítica y química ambiental.

El proyecto integra el desarrollo de metodologías quimiométricas, analíticas y toxicológicas para la investigación de los efectos de los contaminantes ambientales y del cambio global en general sobre los genes y metabolismo de un grupo de organismos biológicos representativos. Se pretende por un lado desarrollar nuevas metodologías analíticas, especialmente LC-MS, GC-MS o NMR para metabolómica ambien-



Profesor Romà Tauler

tal (entendida como la identificación y descripción de los cambios ocurridos en los perfiles metabólicos de organismos representativos a causa de los cambios ambientales, de los contaminantes y del cambio global en general) o mediante micromatrices de DNA (DNA u-arrays) para genómica ambiental (lo mismo para perfiles y respuestas génicas de organismos representativos). Aunque este tipo de investigación está ya siendo utilizada en los campos de la salud y la alimentación fundamentalmente, la originalidad de la propuesta se centra en la evaluación de los efectos de la contaminación ambiental y del cambio global (cambio climático, limitación de recursos, cambios ambientales...).

Premio de investigación “Alexander von Humboldt” al Nazario Martín

El Profesor Nazario Martín, Catedrático de la Universidad Complutense de Madrid y Director Adjunto del Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA), ha recibido el premio de investigación “Alexander von Humboldt” concedido por la Alexander von Humboldt Foundation, dedicada a la promoción de la cooperación académica entre científicos de excelencia y estudiantes de dentro y fuera de Alemania.

El Prof. Martín es un experto internacional en la construcción covalente y supramolecular de materiales ricos en carbón. Su investigación es conocida tanto por los logros desde el punto de vista sintético como por sus descubrimientos de nuevos materiales orgánicos con aplicaciones en ciencia fotovoltaica y nanociencia. En particular, el Prof. Martín ha realizado contribuciones seminales al estudio de nanoestructuras de carbón (concretamente fullerenos y nanotubos), sistemas π -conjugados empleados como alambres moleculares y moléculas electroactivas, tales como los tetratrafalvalenos en el contexto de procesos de transferencia de electrones fotoinducida. Durante su estancia en Alemania,



participará en un curso en “Nanocarbon Chemistry” dirigido a doctorandos. Además, reforzará los proyectos de investigación ya existentes en colaboración con grupos alemanes e iniciará nuevas colaboraciones.

Alexandr Shafir seleccionado como conferenciante español en el Young Investigator Workshop 2013

Alexandr Shafir ha sido seleccionado como conferenciante español en el Young Investigator Workshop 2013, que se celebrará en Marsella del 4-6 de Julio de 2013, bajos los auspicios de la División de Química Orgánica de EuCheMs. Con esta distinción se pretende promover y reconocer la excelencia académica en Química Orgánica dentro y fuera de Europa, para lo cual se organiza un seminario anual para jóvenes investigadores (Young Investigators Workshop, YIW) en Química Orgánica. Este evento se asocia al European Chemical Congress (EuCheMs) o bien al European Symposium on Organic Chemistry (ESOC). El próximo YIW tendrá lugar en Marsella a continuación del congreso ESOC 2013 (<http://esoc2013.eu>).

Alexandr Shafir nació en Ucrania y realizó sus estudios de Química en Estados Unidos, en el Hunter College de la City University de Nueva York. Realizó su doctorado en UC Berkeley, donde trabajó bajo la dirección del Prof. J. Arnold en la síntesis de complejos metálicos soportados en ligandos basados en ferroceno. Su interés por la catálisis le llevó a realizar una estancia postdoctoral con el Prof. S. L. Buchwald (Massachusetts Institute of Technology) desarrollando ligandos para reacciones de formación de enlaces C-N y C-O catalizadas por Cu. En 2007 consiguió un contrato Ramón y Cajal para trabajar en la Universidad Autónoma de Barcelona (UAB), y desde enero de 2013 es Group Leader en el Instituto de Cataluña de Investigación Química (ICIQ) dentro del programa Starting Career. Sus intereses científicos actuales



Alexandr Shafir

consisten en estudiar la habilidad de algunos catalizadores de Cr y Ti para catalizar desde la polimerización clásica de olefinas hasta la oligomerización selectiva. Ha sido concesionario de un proyecto EXPLORA (MICINN) y de un proyecto para jóvenes investigadores APOSTA (UAB).

Firma del Convenio para la Conferencia Lilly 2013

Nuestro Presidente, Jesús Jiménez-Barbero, y nuestro Secretario General, Pedro J. Pérez, han visitado el Centro de Investigación de Lilly en Alcobendas (Madrid) para firmar el convenio por el que se constituye la Conferencia Lilly 2013, que se impartirá en la XXXIV Biental de la RSEQ en Santander (15-18 de Septiembre de 2013) a cargo de un joven investigador menor de 40 años. Se trata ya de una larga tradición por parte de Lilly para reconocer y alentar la investigación por parte de investigadores jóvenes en el ámbito de la química española.



Presidente (centro) y Secretario General (derecha) junto a Javier Mendiola (izquierda), Research Scientist de Lilly.

Anuncio de la XXXIV Reunión Biental de la RSEQ en Santander

B2 Q0 S1 3 Biental Química Santander		XXXIV
	<i>"Química para un futuro común"</i>	REUNIÓN BIENTAL
		Real Sociedad Española de Química
	<small>Playa de Liencres (Cantabria)</small>	Santander 15-18 septiembre 2013

El domingo 15 de septiembre de 2013 comenzará en Santander la 34 Reunión Biental de la Real Sociedad Española de Química en el 30 aniversario de la primera reunión bienal específicamente de Química, puesto que las ediciones anteriores habían agrupado las contribuciones de la Física y de la Química. El Palacio de la Magdalena (UIMP) y la ETSIIyT (UC) serán el lugar de encuentro de la RSEQ en 2013, en una Biental presidida por el Profesor Luis Oro.

En la primera circular de la Biental 2013 (ver <http://rseq2013.unican.es>) se presenta al excelente grupo de conferenciantes plenarios e invitados. Entre los conferenciantes plenarios se puede destacar al Premio Nobel de Química 2005 Robert H. Grubbs, al Presidente de la IUPAC Kazuyuki Tatsumi y al Presidente de la Federación Europea de Ingeniería Química Richard Darton, los cuales, junto a los premiados Alois Fürstner, Nazario Martín y María Vallet-Regí darán una completa visión de los aspectos más actuales de la Química y de la Ingeniería Química.

El grupo de conferenciantes invitados, seleccionados por el Comité Científico, recoge una representación de los científicos españoles más activos en las áreas objeto de los Simposios, que abarcan desde la Adsorción hasta la Divulgación, incluyendo las temáticas más actuales como la Nanociencia, la Energía o las Biociencias en su relación con la Química y la Ingeniería Química.

Además de los aspectos habituales de interés general y los Simposios de interés específico, se han incluido eventos satélite que focalizan la atención en la contribución de los Centros Tecnológicos, Institutos de Investigación, Servicios Científico-Técnicos y Empresas a uno de los objetivos prioritarios de nuestros jóvenes investigadores, que es el empleo y la creación de valor a través de la innovación mediante el conocimiento.

El Comité Organizador Local (rseq2013@unican.es) se encuentra a disposición de todos los miembros de la RSEQ o personas interesadas en el evento para facilitar la participación y recoger todas las iniciativas, comentarios o propuestas relacionadas con el desarrollo de la Reunión como ya se ha hecho con la incorporación del evento satélite Nuevos Retos de la Electroquímica y el apoyo al Grupo de Productos Naturales.

En resumen, a través de los siglos, las puertas de Santander (Portus Victoriae) han estado abiertas a todas las personas interesadas en el avance de la Sociedad a través del Conocimiento por lo que estamos convencidos que la 34 Reunión Biental de la RSEQ en Santander del 15 al 18 de septiembre próximos será una apuesta decidida por el futuro de la Química y de la Ingeniería Química a la que no puedes faltar. Te esperamos.

Firmado: **Angel Irbien**
en nombre del Comité Organizador Local.

18ª Conferencia Félix Serratosa

Los días 21 y 22 de enero del presente año se celebró la 18ª Conferencia Félix Serratosa. Esta Conferencia, de periodicidad anual, viene celebrándose como homenaje al que fue un prestigioso químico, introductor en España de las modernas bases de la Síntesis Orgánica, y una persona entrañable por su cultura, inquietud y trato afable para con colegas y alumnos. La Conferencia se organiza desde sus inicios a partir de la labor de una Comisión de exdoctorandos del Profesor Serratosa y se desarrolla en centros donde él llevó a cabo su labor profesional: el Consejo Superior de Investigaciones Científicas, la Universidad de Barcelona y la Universidad Autónoma de Barcelona. En los últimos años el *Institut Català d'Investigació Química* se ha unido como nueva sede de la Conferencia. Es evidente que la pervivencia de la Conferencia se debe al apoyo que se recibe de aquellas instituciones y, sobretudo, del *Institut d'Estudis Catalans* (a través de su Sección de Ciencia y Tecnología y de la Sociedad Catalana de Química) y de la Real Sociedad Española de Química. Las generosas aportaciones de estas dos instituciones es lo que realmente hace posible la celebración de la Conferencia año tras año.

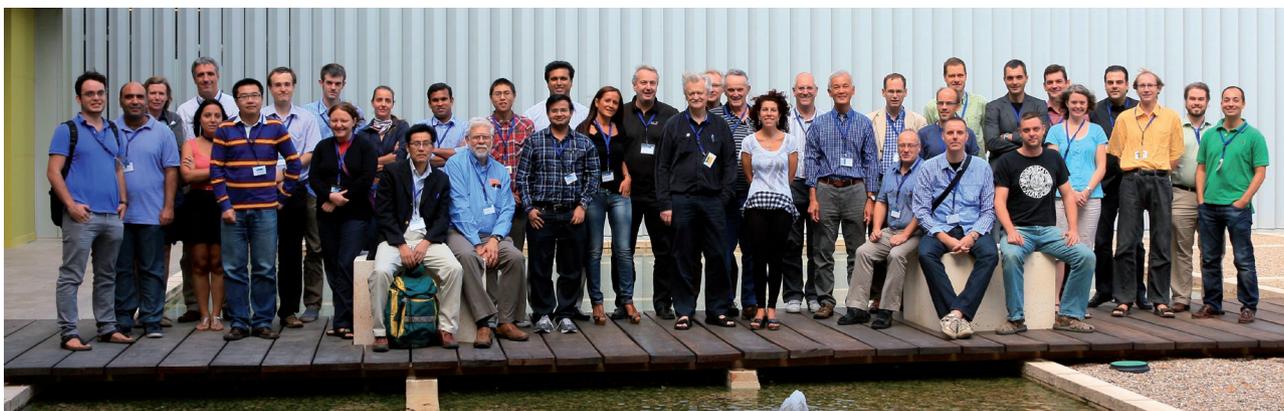
En cuanto a los participantes, cabe destacar que hasta el momento, tres de los que han intervenido en ediciones anteriores han recibido el Premio Nobel de Química. En esta ocasión, se ha contado con la participación de dos prestigiosos científicos: el Profesor Jesús Jiménez Barbero, del



De izquierda a derecha: Manuel Martín-Lomas, Angel Messeguer, Jesús Jiménez-Barbero, Josep Bonjoch, Rosa Ortuño, David R. Spring y Miquel Pericàs.

Centro de Investigaciones Biológicas del CSIC, y el Profesor David R. Spring, del Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Cambridge. Los actos de la Conferencia se llevaron a cabo en el Instituto de Química Avanzada de Cataluña (CSIC) y en el *Institut Català d'Investigació Química* de Tarragona, y ambos pueden calificarse de un éxito por la calidad de las presentaciones y el interés que suscitaron entre la nutrida asistencia a los mismos.

CECAM/ESF Workshop sobre estados de espín en Zaragoza



Participantes del CECAM/ESF workshop en Zaragoza.

En Septiembre 2012 tuvo lugar en el centro Z-Cam en Zaragoza un workshop (<http://www.cecarn.org/workshop-671.html>) financiado por CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire) y ESF (European Science Foundation). El objetivo principal del workshop era la evaluación del papel de los estados de espín en sistemas bioquímicos e inorgánicos, donde las moléculas con distinto número de electrones desapareados (los diferentes estados de espín) tienen distintas estructuras, propiedades y reactividad. Uno de los objetivos era analizar el estado actual de las metodologías teóricas utilizadas para predecir los estados de spin de estos sistemas y compararlos con los estudios experimentales, por ejemplo por la reactividad de estos sistemas. Los principales

expertos en el campo, tanto experimental (p.e. Larry Que, Miquel Costas, Bob Scheidt, Kara Bren, Kallol Ray, Eckard Münck) como teórico (p.e. Jeremy Harvey, Per Siegbahn, Martin Kaupp, Ulf Ryde, Markus Reiher, Sam de Visser), fueron invitados y participaron en el workshop. Además de los expertos bien conocidos, asistieron al workshop muchos jóvenes investigadores en las primeras etapas de su carrera. La mezcla de investigadores con diferentes niveles de experiencia en el tema contribuyó a animar y dinamizar las discusiones durante el taller. En total hubo 36 presentaciones repartidas en seis sesiones. Recientemente, se ha publicado en la revista *Nature Chemistry* un artículo sobre este workshop (*Nature Chemistry* **2013**, 5,7–9).

La investigación: una prioridad a prueba

El Círculo Cívico de Opinión organizó el debate sobre “La investigación: una prioridad a prueba” el pasado 6 de febrero en el Círculo de Bellas Artes de Madrid. En la mesa redonda participaron Carlos Andradas (Presidente de la COSCE), Fernando P. Cossío (Catedrático de la UPV/EHU, Ikerbaske, Fundación Vasca para la Ciencia), Javier López-Facal (Profesor de Investigación del CSIC) y Luis Oro (Catedrático de la UNIZAR), junto a Margarita Salas (Profesora ad honorem del CSIC) como moderadora.

Se muestra a continuación la nota publicada por los Profesores Cossío y Oro.

Una característica de los países más desarrollados es la realización de un notable esfuerzo en investigación científica y desarrollo tecnológico (I+D). En el caso de España, los datos de 2010 indican una inversión en I+D como porcentaje del PIB de un 1,39%, frente al 2,0% de la UE-27 y el 2,4% de la OCDE. Por tanto, a pesar de las importantes mejoras que se han producido en las últimas décadas, dicho esfuerzo se encuentra todavía demasiado alejado del de los países más desarrollados, que tienen una inversión en I+D superior al 2,8%, cifra que sobrepasan notoriamente Japón, Finlandia, Suecia, EE UU y Alemania.

Conviene recordar que el esfuerzo inversor en I+D, en definitiva, inversión en conocimiento, ha sido el gran protagonista del crecimiento del PIB y de la productividad en la práctica totalidad de las economías desarrolladas a lo largo de las últimas décadas, y que el PIB basado en el conocimiento resiste mejor los periodos de crisis. Los últimos datos del Instituto Nacional de Estadística disponibles son los correspondientes a 2011, y nos avisan de que nuestra inversión en I+D está en recesión, habiendo experimentado un descenso del 2,8% respecto a 2010, pasando del 1,39% al 1,33% del PIB.

Posiblemente, el referido descenso se acentuará en 2012 y en 2013, años en los que el Gobierno ha reducido sustancialmente las subvenciones de I+D.

En este restrictivo marco, el pasado 1 de febrero, el Gobierno ha aprobado la Estrategia Española de Ciencia y Tecnología y de Innovación 2013-2020, así como el Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2013-2016. Este plan estatal estima que el gasto en I+D en relación al PIB evolucionará desde un hipotético 1,33% en 2013 al 1,48% en 2016. Las previsiones se han calculado partiendo de las premisas establecidas en el Plan de Estabilidad de la economía española, lo que conlleva una congelación del gasto total de I+D en las Administraciones públicas, que se mantendrá en el 0,61% del PIB. Por ello, para alcanzar el objetivo mencionado del 1,48% del PIB, el gasto total de I+D del sector privado debería pasar del 0,62% en 2013 al 0,73% en 2016, una hipótesis demasiado optimista ya que la contribución del sector privado al gasto total en I+D está descendiendo en los últimos años.

Resulta evidente que, en España, la crisis está provocando una reducción del esfuerzo total en investigación, desarrollo e innovación que puede afectar, de modo difícilmente reversible, al deseable cambio hacia un modelo productivo basado en el conocimiento. La I+D en nuestro país es, actualmente, una prioridad a prueba. En cualquier caso, debiéramos de ser capaces de adaptarnos al escenario actual, y realizar cambios que permitan una mayor eficacia. La mencionada Estrategia Española de Ciencia y Tecnología y de Innovación presenta propuestas positivas, pero se consideran convenientes otras acciones comple-



Fernando P. Cossío

Luis Oro

mentarias, tales como una revisión de la estructura y gobernanza institucional, tanto en las universidades como en los organismos públicos de investigación (OPI), que haga posible una mejora de su eficiencia, así como una optimización de los recursos humanos dedicados a estas actividades, que no debiera seguir, únicamente, un esquema funcional.

La investigación científica española ocupa un lugar razonable en el concierto internacional, lo que constituye una fortaleza si somos capaces de conectarla con el sector productivo. Existen experiencias tales como las llevadas a cabo en el País Vasco (Ikerbasque, centros tecnológicos y de investigación cooperativa, BERCS...) que muestran que un esfuerzo exigente y diversificado entre los diversos agentes científico-tecnológicos permite retornos tanto en los ámbitos tecnológicos como en la investigación básica, en este último caso a través de la atracción de fondos europeos competitivos. Es importante señalar que estos retornos pueden producirse en plazos relativamente cortos.

En general, la actividad de I+D+i vinculada al ámbito industrial y empresarial está por debajo de lo que corresponde a un país de nuestro desarrollo económico. Por ello sería deseable fomentar políticas que puedan conducir al aumento de tamaño de las empresas y a la cooperación de las empresas entre sí; mejorar la financiación de las empresas mediante instrumentos de préstamo, capital semilla y capital riesgo; incentivar la participación de las empresas españolas en programas nacionales e internacionales de I+D fomentando la colaboración con las universidades y OPI; incentivar la contratación de jóvenes investigadores por parte de las empresas, favoreciendo la movilidad entre la industria y la investigación académica; fomentar el mecenazgo y la financiación privada de la I+D mediante una política adecuada de incentivos fiscales, y muy especialmente fomentar la transferencia de resultados de investigación del sector público al sector productivo.

En definitiva, ante la coyuntura económica actual no podemos permitirnos el lujo de la pasividad ni del desánimo. El trabajo hecho a lo largo de estos años no puede desaprovecharse. Por el contrario, debemos hacer un esfuerzo en I+D anticíclico y, al mismo tiempo, flexibilizar y actualizar nuestros modelos de gestión de la I+D pública y privada. Solo así podremos afrontar los retos que se avecinan, como el Círculo Cívico de Opinión ha subrayado con fuerza.

Firmado: **Fernando Cossío y Luis Oro**
<http://www.circulocivicodeopinion.es/>

Carta al Presidente del Gobierno de los Presidentes de Sociedades Científicas Españolas



Los Presidentes de Sociedades Científicas Españolas agrupadas en la Confederación de Sociedades Científicas de España (COSCE), se han dirigido al Excmo. Presidente del

Gobierno Señor Don Mariano Rajoy Brey, como representantes de los más de treinta mil científicos afiliados a las mismas, para manifestarle la honda preocupación por el deterioro de la I+D+i en nuestro país y la ausencia de una política científica coherente que confiera la estabilidad y serenidad que la investigación científica necesita.

La carta completa puede obtenerse en la página web de la RSEQ: www.rseq.org

Carlos Negro, reelegido Presidente del Foro Química y Sociedad

En su reunión ejecutiva del pasado 19 de febrero, el Consejo Director del Foro Química y Sociedad reeligió por unanimidad a Carlos Negro Álvarez como presidente de la entidad por un nuevo período de tres años. Carlos Negro agradeció la confianza en él depositada y manifestó su renovada ilusión por presidir una entidad como el Foro, dedicada a impulsar la divulgación de la química y su contribución al bienestar de la sociedad y promover la investigación, el desarrollo científico y la innovación tecnológica en el área de la química, y donde están presentes todos los estamentos del sector químico.

Carlos Negro Álvarez es Catedrático del Departamento de Ingeniería Química de la Universidad Complutense de Madrid (UCM). Ha sido Presidente de la Asociación Nacional de Químicos de España (ANQUE) en el período 2009-2012.

El Foro está integrado por las nueve principales organizaciones representantes de colectivos relacionados directamente con la química, siendo todos ellos miembros constituyentes:

- Asociación Nacional de Químicos de España (ANQUE).
- Conferencia Española de Decanos de Química.
- Consejo General de Colegios de Químicos de España.
- Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC).
- Federación Empresarial de la Industria Química Española (FEIQUE).
- Federación Estatal de Industrias Afines de UGT (FITAG-UGT).



Carlos Negro Álvarez

- Federación Textil-Piel, Químicas y Afines de CCOO (FITEQA-CCOO).
- Real Sociedad Española de Química (RSEQ).
- Salón Internacional de la Química – Expoquimia, de Fira de Barcelona.

El Consejo Director es el órgano decisorio único del Foro Química y Sociedad, y adopta de forma colegiada sus decisiones. Forman parte del Consejo nueve Consejeros designados por cada una de las entidades adheridas y otros nueve Consejeros asesores designados de igual modo, que asisten y asesoran al Consejo.

Actividades de las Secciones Territoriales

III Curso de divulgación “Los avances de la química y su impacto en la sociedad”

Entre el 10 de enero y el 21 de marzo de 2013 se ha celebrado la III edición del curso de divulgación “Los avances de la química y su impacto en la sociedad”. El curso ha consistido en 11 conferencias y 2 mesas redondas, contando con la participación de destacados investigadores y docentes. Las mesas redondas abordaron dos temas de interés para las comunidades científica, educativa y divulgativa. La primera trató sobre las relaciones entre la ciencia y los medios de comunicación, con la presencia de un periodista (Seara-Valero), un catedrático de periodismo (Eliás) y un profesor universitario (López-Guerrero), todos ellos con formación científica. La segunda mesa redonda fue sobre el tema de la enseñanza y divulgación de las ciencias, contando con profesores de diversos niveles educativos (Pinto, Palacios y Moreno-Martínez) y una persona responsable de divulgación científica en el CSIC (Ferrando).

Las 11 conferencias trataron de investigaciones reciente en química y áreas relacionadas y sus implicaciones sobre nuestras vidas. Las conferencias han girado, principalmente, alrededor de dos áreas amplias: ciencia de los materiales (Morán y Martín, que impartió la conferencia de clausura) y biomedicina (Vaquero y Mann), con una conferencia interdisciplinaria sobre biomateriales (Vallet-Regí, que abrió el curso, ver imagen). También se trataron aspectos como los alimentos (Pérez-Cortés), análisis sensorial (Mijares) e historia de la química (Herradón). Otros temas abordados en el curso han sido la propiedad industrial (Cueto), así como reflexiones sobre las dos caras de la química (Herradón) y el futuro de la química (Herradón).



El alumnado del curso ha sido numeroso y variado, con una asistencia media de 80 personas. Entre los alumnos ha habido desde estudiantes de ESO hasta investigadores y profesores universitarios, incluyendo personas sin relación con la ciencia (economistas, publicistas, periodistas). Hay que destacar la presencia de numerosos estudiantes de institutos de educación secundaria, especialmente del Parque Aluche.

El curso ha contado con la colaboración de la RSEQ-ST de Madrid y el CSIC. Toda la información del curso, incluyendo las copias de las conferencias y resúmenes de todas las sesiones, se pueden descargar en <http://bit.ly/RcmZEI>.

Remitido por: **Bernardo Herradón**,
Director del curso.

Centenario de la creación de los Estudios de Química en la Universidad de Granada



El pasado domingo 13 de Enero de 2013 se cumplieron cien años de la creación de los estudios de Química en la Universidad de Granada. En estos cien años varios miles de alumnos se han formado en las aulas y laboratorios de química de la Facultad de Ciencias de Granada; asimismo, las enseñanzas han ido evolucionando a lo largo del siglo al compás del espectacular desarrollo que ha tenido lugar en la Química, así como de las necesidades sociales. Muchas generaciones de hombres y mujeres formados como químicos en la universidad granadina han trabajado y trabajan en la enseñanza, en la investigación, en la industria química o agroalimentaria, o en cualquier otra labor, a veces muy alejada de la química –se habla de la versatilidad del químico–.

En este contexto hemos querido detenernos un momento aprovechando el número mágico de los 100 años para recordar a quienes lo hicieron y lo siguen haciendo posible, a los estudiantes que somos o fuimos, a los que vinieron a Granada y a los que se fueron de ella. Para conmemorar esta efeméride se van a llevar a cabo una serie de actividades a lo largo de

este año 2013 y en las que la Sección Territorial de la RSEQ en Granada pretende colaborar en lo que le sea posible.

Estas actividades cuentan con un ciclo de conferencias mensuales, inaugurado el pasado 14 de Enero por el Prof. Federico Mayor Zaragoza, en las que intervendrán científicos de prestigio especialistas en diferentes áreas. También se contará con una exposición en el Hospital Real, sede del Rectorado, que mostrará el ayer y el hoy de la química en Granada y se editará un libro conmemorativo que revele aspectos históricos de estos estudios, tales como las causas de su implantación, la sociedad granadina del momento, las primeras mujeres químicas, las consecuencias de la guerra civil, etc. Por último, hay que citar la “Ventana de la Ciencia” organizada en el Parque de las Ciencias junto con la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía y la Universidad de Granada. Esta actividad que pretende mostrar qué son los estudios de química hoy en Granada y en la cual, bajo el nombre de “Más Química para un Mayor Bienestar”, grupos de investigación en química de nuestra Universidad mostrarán sus principales líneas de trabajo y resultados obtenidos.

Más información en:

Blog: <http://q100ugr.blogspot.com.es/>; Facebook (la línea de tiempo en Facebook llega hasta 1913 y a ella se van incorporando periódicamente fotografías y documentos de diverso tipo): <http://www.facebook.com/q100ugr>; Twitter: @q100ugr.

Premio de la RSEQ, ST de Salamanca, al mejor expediente académico de Licenciatura en Química de la Universidad de Salamanca

La entrega de los premios correspondientes al curso Académico 2011-2012 ha tenido lugar durante los actos conmemorativos de la festividad de S. Alberto Magno, patrón de la Facultad de Ciencias Químicas, el lunes 19 de noviembre en el Salón de Actos de la Facultad. Se ha concedido el Primer Premio al mejor expediente de la Licenciatura en Química de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad de Salamanca, consistente en un Diploma y una dotación económica de 600 euros, así como una inscripción como Socio Joven de la RSEQ y suscripción a la Revista *Anales de Química* por un año. El primer premio ha sido concedido a Leire de Juan Fernández. El accésit para el segundo mejor expediente académico ha sido concedido a Alfredo Hernández Cabanillas, asimismo, con Diploma y una dotación económica de 300 euros junto con una inscripción como Socio Joven de la RSEQ y suscripción a la Revista *Anales de Química*, también por un año.



En la fotografía aparecen los premiados junto con la Sra Decana de la Facultad de Ciencias Químicas, y el presidente y el secretario de la Sección Territorial de Salamanca.

El profesor Julio Casado investido Doctor *Honoris Causa* por la Universidad de Vigo

El pasado día 28 de enero, Julio Casado, catedrático emérito de la Universidad de Salamanca, ha sido investido Doctor *Honoris Causa* por la Universidad de Vigo. La propuesta fue presentada por el Departamento de Química Física y los departamentos de ciencias de la institución gallega.

Julio Casado se doctoró en la Universidad de Valladolid con la dirección del profesor Salvador Senent con quien también inició su carrera postdoctoral como becario de la Fundación Juan March para estudios postdoctorales, investigando la cinética de reacciones en disolución en España. Posteriormente, con una *Postdoctoral Research Grant* de la Fundación Juan March, realizó una estancia postdoctoral en Dinamarca, investigando en espectroscopia molecular en el grupo del profesor Bak. A su regreso, creó en la Universidad de Valladolid el primer laboratorio de espectroscopia de microondas en España. Catedrático de la Universidad de Santiago de Compostela desde 1972, dirigió el Departamento de Química Física y el Instituto Interdepartamental de Investigaciones Químicas (CSIC) y fue vicerrector. Desde 1983 es catedrático de la Universidad de Salamanca cuyo departamento de Química Física ha dirigido y donde actualmente lidera un grupo de investigación sobre reactividad de moléculas bioactivas. El Dr. Casado es autor de más de 150 publicaciones sobre la fisicoquímica de los nitrosocompuestos y sobre mecanismos de alquilación. Ha sido investigador principal de numerosos proyectos de investigación de ámbito europeo, nacional y autonómico, habiendo dirigido 33 tesis doctorales. En 1991 recibió la Medalla de Investigación de la RSEQ y el Premio Aldrich de Investigación Química. En 2008 recibió el Premio María de Maeztu a la Excelencia Científica.

Junto a su labor investigadora el Dr. Casado ha desarrollado una intensa actividad sobre la docencia de la química;



Profesor Julio Casado

dirigiendo el Instituto de Ciencias de la Educación, publicando numerosos artículos en revistas especializadas y dictando conferencias en diversos países. Ha sido representante de España en la *Division of Chemical Education* de la Federación Europea de Sociedades Químicas y Presidente del Grupo de Didáctica e Historia de la Física y la Química de las Reales Sociedades de Física y de Química del que actualmente es Presidente Honorífico.

Remitido por: **Manuel Martín Sánchez**,
Universidad de Salamanca
GE de Didáctica e Historia de la Física y la Química

Actividades de Institutos de Enseñanza Secundaria

V Encuentro de Ciencias Bezmiliana

Vemos necesario que la Ciencia tenga un papel más atractivo, más práctico y con ello, más motivador para nuestros alumnos en su proceso de aprendizaje. Los alumnos se ilusionan y trabajan cuando se les plantea una curiosidad científica que conlleva un estudio, una experimentación y la transmisión de unos resultados. El número de alumnos que forman parte del Club Científico y que participan en Encuentros, Congresos y Ferias de Ciencias realizando presentaciones, ha aumentado en cada curso. La organización de un Encuentro de Ciencias es uno de los retos de este Club Científico Bezmiliana.

No es frecuente encontrar un grupo de profesores dispuestos a trabajar de manera voluntaria para la organización de un Encuentro de Ciencias. Sin embargo en nuestro instituto, IES Bezmiliana, del Rincón del Victoria, Málaga, contamos con un grupo de 10 profesores dispuestos a ello. Aprovechando nuestra ilusión para dar a las Ciencias una visión más atractiva, más experimental y por ello, más motivadora para los alumnos y también para los profesores. Este año organizamos ya el *V Encuentro de Ciencias Bezmiliana*, que se celebrará los días 25 y 26 de abril del 2013 en nuestro centro.

En este V Encuentro está prevista la participación de 20 centros de enseñanza, donde los alumnos, supervisados por sus profesores, explicarán a todo el que se acerque, la investigación que han desarrollado, la reproducirán y explicarán su fundamento científico. Durante estos días, los alumnos se transforman en los monitores encargados de difundir sus experiencias y disfrutar contando lo que han trabajado. Además, de forma paralela se realizarán talleres de: paleoantropología (impartido por Cecilio Barroso Ruíz, prehistoriador y antiguo profesor del IES Bezmiliana), experimentos de biología (impartido por la Unidad de Cultura Científica de la Estación Experimental del Zaidín-CSIC, Granada), estación meteorológica (con el apoyo de la Agencia Estatal de Meteorología de Málaga), plantas modificadas genéticamente (impartido por el IHSM La Mayora CSIC-UMA, Algarrobo-Costa, Málaga), mariposas (impartido por el Mariposario de Benalmádena), ecología (impartido por el Departamento de Ecología de la UMA) y botánica (impartido por el Jardín Botánico-Histórico La Concepción, Málaga). También habrá exposiciones sobre los inventos de



Leonardo da Vinci y sobre trabajos realizados por el Club Científico Bezmiliana. Y están previstas las siguientes conferencias: “*Ciencia global*” (impartida por Sebastián Cardenete García, director del Centro Principia), “*La Química de la alimentación y la bebida*” (impartida por Bernardo Herradón García, investigador del CSIC), “*¿De dónde vienen las olas?*” (impartida por Juan José Alonso Pereda, profesor de la UMA) y “*La evolución del universo*” (impartida por Carlos Criado Cambón, profesor de la UMA).

Remitido por: **Profesores del Club Científico Bezmiliana** del IES Bezmiliana del Rincón de la Victoria, Málaga.

In Memoriam



Evaristo Riande García

El pasado 15 de noviembre de 2012 falleció en México **Evaristo Riande García**, profesor de investigación del CSIC *ad honorem*, tras sufrir un ictus que le mantuvo en coma durante 40 días. Se encontraba en la Universidad Nacional Autónoma de México D.F. como Profesor Invitado.

El Profesor Riande inició su carrera científica en el Departamento de Plásticos del Patronato Juan de la Cierva (hoy ICTP-CSIC) en 1963, realizando investigaciones en su Tesis Doctoral sobre nuevos polielectrolitos iónicos basados en alil-celulosa. Investigador Científico del CSIC. Durante dos años fue *Visiting Fellow* en el Mellon Institute, en Pittsburg (EE.UU), donde estudió el comportamiento viscoelástico de macromoléculas en disolución y, a su vuelta a España, inició estudios teóricos y experimentales sobre la influencia de los disolventes y de la temperatura en la cinética de cristalización de poliolefinas, continuando con el análisis conformacional de macromoléculas. En el año 1984, ya como Profesor de Investigación del CSIC, sus investigaciones se extendieron al estudio de la dinámica de líquidos asociada con el desarrollo de la transición vítrea. A mediados de los noventa, el Prof. Riande inició estudios teóricos y experimen-

tales relacionados con el transporte de gases en membranas poliméricas. Recientemente había iniciado una nueva línea de investigación encaminada al desarrollo y estudio electroquímico de membranas de cambio iónico con uso potencial en baterías y pilas de combustible. Según él mismo comentaba, “con esta línea de investigación volvía a sus orígenes, el estudio del transporte en membranas de cambio iónico”, en lo que parecía ser el cierre del círculo de su labor investigadora.

Al Prof. Riande siempre le movió la búsqueda del máximo nivel científico en todas las líneas de investigación que abordó, como queda reflejado en los más de 350 artículos publicados en las revistas del más alto impacto, varios libros, numerosos trabajos de divulgación, y organización de diversos congresos, tanto nacionales como internacionales.

El conjunto de la carrera investigadora de Evaristo Riande pone de manifiesto algunas características fundamentales de un investigador que consideramos modelo: amor por el trabajo, desarrollo de líneas de investigación acordes con los medios existentes, cambio de proyecto cuando se presentan dificultades insalvables, derivación hacia nuevas investigaciones de gran relevancia científica y de interés práctico en diferentes aplicaciones, colaboración con grupos muy diversos de su mismo Instituto y de muchas Universidades españolas y extranjeras.

Los muchos doctorandos, discípulos, coautores de libros y de trabajos, todos amigos suyos, hemos aprendido mucho con el estudio de los trabajos de investigación y con las enseñanzas, consejos y ejemplo de Evaristo Riande. Deja un hondo recuerdo en todos nosotros por su bonhomía, su carácter afable y su encantadora forma de ser, poco común en un hombre tan inteligente y capaz. Nunca podremos olvidarlo y nos unimos al dolor de su viuda Pilar y de sus hijos Luis y Jorge.

Remitido por: **Antonio Bello, Julio Guzmán, M^a Mar López y José M. Pereña**

Sesión en memoria de Evaristo Riande

El pasado día 11 de Marzo se desarrolló una entrañable y cariñosa sesión en memoria del Prof. Evaristo Riande con motivo de su fallecimiento el día 15 de Noviembre de 2012. El Grupo de Polímeros de la Real Sociedad Española de Química y Real Sociedad Española de Física ha apoyado la organización de ese merecido acto, que consistió en unas breves pero acertadas exposiciones por parte de sus más allegados colaboradores de los últimos años desde su compañero de carrera en Santiago, Antonio Bello hasta su más reciente colaboradora María del Mar López, sus primeros becarios José Manuel Pereña y Miguel Domínguez Reboiras, y sus colaboradores habituales Julio Guzmán, Vicente Compañ, Pilar Tiemblo, Leoncio Garrido y Cati Salom como representante de las tres “chicas de Aeronáuticos”. Antxon Santamaría como presidente del Grupo de Reología y uno de los promotores del acto, intervino de forma destacada resaltando la figura de Evaristo como una de las referencias más sobresalientes en el mundo de la Reología, y su gran influencia en varias generaciones de excelentes investigadores que se han forjado en los últimos decenios en España, con reconocida proyección internacional.

Al acto acudieron más de un centenar de amigos y colaboradores así como su familia, poniéndose de manifiesto la profunda huella y proyección que su actividad, su personalidad y sus excelentes cualidades humanas ha dejado en toda la familia dedicada al estudio y desarrollo de polímeros no solo en España sino en todo el mundo académico internacional. El acto estuvo también respaldado por la dirección del Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros y por la propia Presidencia del CSIC, así como por ilustres investigadores de ámbito internacional como Roberto Williams, Enrique Valles, y otros muchos que por brevedad no mencionamos. Sin duda la figura de Evaristo Riande permanecerá muy viva en la memoria de todos los que hemos compartido con él tiempo dedicado al desarrollo de Ciencia y conocimientos en el campo de Polímeros, así como vivencias de un enorme y significado contenido humano. Gracias Evaristo porque has supuesto un ejemplo de esfuerzo, trabajo, dedicación y honestidad que trataremos de reflejar en nuestras actividades y relaciones.

Remitido por: **Julio San Román, ICTP-CSIC.**

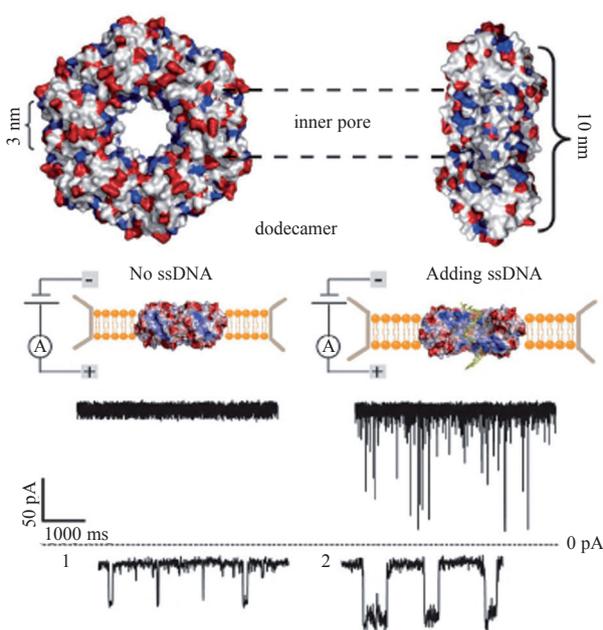
Avanzando en la secuenciación rápida de la molécula de la vida

Una o varias moléculas de ácido desoxirribonucleico (ADN) constituyen el genoma de casi todos los organismos; el cual contiene la información necesaria para la reproducción, desarrollo y funcionamiento de dicho organismo. Como es bien sabido, el ADN es una estructura macromolecular constituida por unidades de nucleótidos unidos a través de enlaces fosfodiéster. Un nucleótido consta de tres fragmentos diferenciados: un carbohidrato, un resto fosfatado y una base nitrogenada (derivada de purina o de pirimidina). La información contenida en el ADN está codificada en la secuencia de bases nitrogenadas que forman la hebra de ADN. La secuenciación del ADN consiste en un conjunto de métodos y técnicas que nos permiten determinar el orden exacto de los nucleótidos (adenina, A; citosina, C; guanina, G; y timina, T) presentes en una hebra de ADN. Conocer la información contenida en la molécula de ADN tiene implicaciones en áreas tan diversas como las ciencias forenses, la antropología y, especialmente, en medicina. En los últimos años se han desarrollado métodos para secuenciar ADN que, tras la correspondiente automatización, han permitido la secuenciación del genoma de diversos organismos, incluyendo el ser humano (*Nature* **2001**, 409, 860–921; *Science* **2001**, 291, 1304–1351). La mayoría de las técnicas de secuenciación de ADN disponibles en la actualidad requieren la amplificación y modificación química de la hebra de ADN a secuenciar para poder llevar a cabo una lectura de las bases de las que está compuesta.

La secuenciación basada en el empleo de nanoporos es una alternativa muy prometedora que, en principio, permite abordar el análisis de una única molécula de ADN (de hebra sencilla) sin realizar ninguna modificación previa. Esto debe permitir acortar los tiempos de secuenciación, así como abaratar los precios del proceso. El principio en el que se basa esta técnica es el siguiente: una molécula cargada (como por ejemplo una cadena de ADN) se coloca en una celda conteniendo un electrolito y dividida por una membrana con una apertura de tamaño nanométrico (el nanoporo). Al aplicar un potencial eléctrico, la molécula de ADN comienza a atravesar el poro por electroforesis, observándose una variación de la intensidad de la corriente eléctrica. Cada vez que una base de la hebra entra en el nanoporo, bloquea parcialmente el flujo de iones a través del poro, lo que produce una variación medible de la corriente. Además, esta variación es diferente para cada una de las cuatro bases.

Investigadores de las universidades de Shanghai y Jerusalén, han descrito recientemente (*Chem. Commun.* **2013**, 49, 1741–1743) el empleo de la proteína SP1 como un nuevo miembro del limitado grupo de nanoporos biológicos que se emplean en la actualidad. Hasta el momento se habían descrito únicamente dos proteínas, la α -HL y la MspA, capaces de formar nanoporos en una membrana con el tamaño adecuado para permitir el paso de ADN por su interior. La proteína SP1 es capaz de autoasociarse, dando lugar a un dodecamero con estructura de nanoporo. Una de las características más significativas de esta proteína es que el poro que contiene en su interior es, a diferencia que en α -HL y la MspA, totalmente simétrico.

Los investigadores emplean cadenas de polinucleótidos de diferentes longitudes, observándose en todos los casos una



variación en la corriente eléctrica en el nanoporo cuando estas cadenas son añadidas al electrolito. Aunque las aplicaciones de esta proteína en el campo de la secuenciación de ADN mediante nanoporos son prometedoras, aún quedan importantes problemas que solventar, como por ejemplo la alta velocidad de traslocación de la hebra de ADN a través del poro así como la baja calidad de la señal obtenida.

Canales de potasio por manipulación lumínica y térmica de estructuras supramoleculares

El autoensamblaje controlado mediante estímulos de estructuras supramoleculares organizadas es un área de investigación con potenciales aplicaciones en la preparación de nuevos dispositivos y materiales “inteligentes”. En un artículo reciente del grupo del profesor Lehn de la Universidad de Estrasburgo (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, 52, 3940–3943), se describe la preparación de estructuras supramoleculares generadas a partir de moléculas formadas mediante enlaces covalentes reversibles. Además, se observa que las estructuras obtenidas son sensibles a estímulos como luz o calor, lo que añade un carácter dinámico a los materiales preparados. Los autores se basan en resultados previos de su grupo que indican que una familia de compuestos, como las acil hidrazonas, son capaces de complejar diferentes cationes. Además, este tipo de moléculas presentan un par de características muy interesantes. Por un lado, son capaces de sufrir una fotoisomerización interna cuando son irradiadas con una luz adecuada. Por otro lado, la naturaleza reversible del enlace imínico presente en su estructura hace que estos compuestos sean constitucionalmente dinámicos, permitiendo la incorporación o intercambio de los fragmentos que las forman.

Cuando a una disolución de esta acil hidrazona en acetonitrilo se le añade tiocianato potásico, se observa la formación de estructuras supramoleculares con forma de fibras. Mediante estudios por difracción de rayos X, los autores observan que la



estructura de estos agregados se debe al apilamiento de complejos de las acil hidrazonas con el catión potasio. De esta manera, las supraestructuras resultantes forman largos canales de iones potasio. Por otro lado, cuando estas estructuras se irradian con luz ultravioleta, se observa la desaparición de los agregados acompañada de la liberación de cationes potasio. También se observa un comportamiento similar cuando estos agregados se calientan, lo que lleva a su completa desaparición. Sin embargo, el proceso es reversible, ya que simplemente enfriando la disolución se consigue de nuevo la formación de las nanofibras.

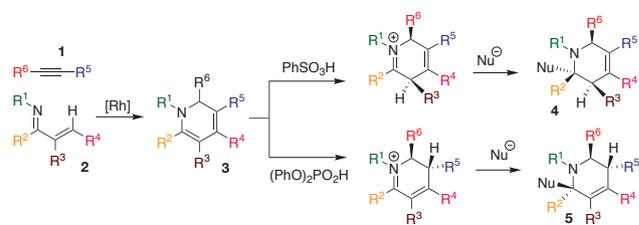
Síntesis eficaces de heterociclos nitrogenados

La selectividad (químico-, regio-, estereo-) en reacciones en cascada es uno de los principales objetivos en metodología sintética; cuya consecución está relacionada con la eficiencia sintética. Los procesos divergentes en los que se obtienen diferentes productos a partir de un mismo sustrato, usando diferentes condiciones de reacción, es una ventaja adicional. En un artículo reciente (*Science*, **2013**, 339, 678–682), investigadores de las universidades de Yale y Berkeley han descrito una metodología que permite la preparación de una amplia variedad de derivados de piperidina altamente sustituidos a partir de un mismo material de partida. Además, el proceso transcurre con regioselectividad y estereoselectividad totales.

Las piperidinas son heterociclos de seis miembros, total o parcialmente saturados, con un átomo de nitrógeno en su estructura. Estos anillos se encuentran presentes en numerosos productos naturales y fármacos con interesantes aplicaciones terapéuticas. Compuestos como la quinina, la morfina o el tadalafil (Cialis®), son ejemplos de moléculas con actividad biológica y que presentan un anillo de piperidina en su estructura. El desarrollo de metodologías que permiten la preparación eficiente de derivados de piperidina es un área de intensa actividad dentro de la síntesis orgánica.

Para conseguir los objetivos, los autores, en primer lugar, emplean una reacción en cascada catalizada por complejos de rodio que permite obtener 1,2-dihidropiridinas (**3**) a partir de un alquino (**1**) y una imina α,β -insaturada (**2**). Estos intermedios (**3**) son relativamente inestables, pero se pueden transformar en productos más elaborados simplemente mediante tratamiento con un ácido y posterior reacción con un nucleófilo. Las tetrahidropiridinas altamente funcionalizadas obtenidas mediante este método, son intermedios muy valiosos para la preparación de moléculas con potenciales aplicaciones terapéuticas.

La principal aportación de esta nueva metodología, consiste en que los autores son capaces de controlar la regio y estereoselectividad de la reacción, simplemente modulando la naturaleza del ácido empleado. Así, cuando se emplean ácidos fuertes del

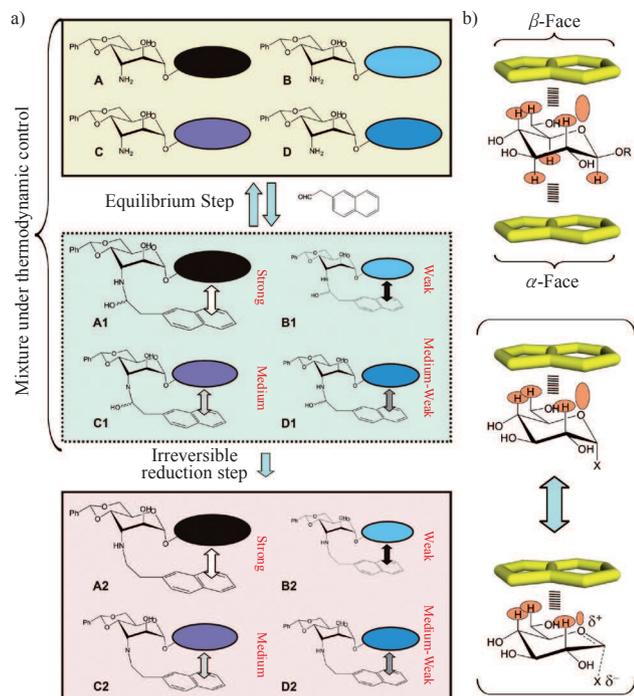


tipo arilsulfónico, la reacción transcurre bajo control cinético, dando lugar a tetrahidropiperidinas del tipo **4** (ver Figura). Por otro lado, cuando los autores emplean un ácido más débil, como el ácido difenilfosfórico, y tiempos de reacción más largos, se observa que el proceso transcurre con control termodinámico, permitiendo la obtención (después del ataque del correspondiente nucleófilo) de tetrahidropiperidinas del tipo **5**. Las reacciones transcurren con elevados rendimientos y selectividades. Además, en la mayoría de los casos la transformación se puede llevar a cabo en una única etapa (*one pot*), lo que facilita enormemente las tareas de purificación y aislamiento de los productos deseados. Finalmente, los autores demuestran que se pueden emplear como nucleófilos una gran variedad de reactivos organometálicos de distinta naturaleza, lo que permite acceder a una elevada diversidad molecular de una manera directa y sencilla.

Analizando las interacciones areno-carbohidrato

La interacción de carbohidratos con biomacromoléculas (proteínas y ácidos nucleicos) juega un papel fundamental en numerosos procesos biológicos tales como la adhesión celular, la infección o la respuesta inmune, y se encuentran en el origen de la actividad de diversos antibióticos. El estudio de estos fenómenos es un área de creciente interés en química biológica y biomedicina; cuyo progreso permitirá avances considerables en la comprensión de procesos biológicos y en el diseño de fármacos eficaces para una variedad de enfermedades.

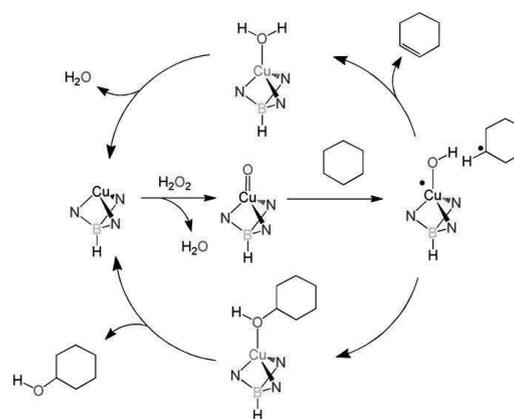
Es, por lo tanto, comprensible el tremendo interés que el estudio de las fuerzas que estabilizan los complejos carbohidrato/receptor ha suscitado entre los químicos orgánicos durante los últimos 20 años. La actividad investigadora en este campo ha subrayado el papel determinante que, a menudo, desempeñan las interacciones de apilamiento carbohidrato/aromático. Desafortunadamente, y a pesar los esfuerzos destinados a tal efecto, todavía no se comprenden en detalle las sutiles relaciones estructura/estabilidad que rigen la formación de dichos complejos. Con objeto de profundizar en el estudio de los mismos, investigadores del CSIC (IQOG, IQFR y CIB), de la Universidad de La Rioja y de la Universidad de California, liderados por Juan Luis Asensio, han desarrollado una estrategia general inspirada en conceptos de química combinatoria dinámica (*J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 3347–3350). Esta aproximación (representada esquemáticamente en la Figura) se basa en el diseño y síntesis de una librería de disacáridos, cuyo rasgo común es la presencia, en posición no reductora, de una unidad de altrosamina conformacionalmente restringida. El tratamiento de la librería con aldehídos aromáticos lleva a una mezcla de iminas/hemiaminales estabilizadas por apilamiento del anillo aromático con la unidad de piranosa situada en la posición reductora (representada por una elipse coloreada en la Figura). Dado que dichas especies se encuentran en equilibrio termodinámico, sus poblaciones relativas dependen exclusivamente de la mag-



nitudo de dicha interacción. En estas condiciones, la congelación del equilibrio por reducción con hidruro lleva a una mezcla estable de aminas secundarias, cuyas proporciones (fácilmente cuantificables mediante RMN u otros métodos) proporcionan una medida directa de las estabilidades relativas de los diferentes complejos. Como prueba de principio, esta estrategia ha sido empleada para analizar los diferentes factores que condicionan la preferencia de un anillo de naftilo por la cara α o β de diversas unidades de piranosa (*selectividad facial*). De acuerdo con los resultados obtenidos, la aproximación combinatoria desarrollada destaca por su versatilidad y tremenda sensibilidad, revelando diferencias de estabilidad entre complejos difícilmente detectables por otros medios (0,1 kcal/mol).

Diseño de catalizadores para la oxidación de alcanos

Una de las reacciones más perseguidas y difíciles de alcanzar en química es la oxidación controlada de alcanos. En hidrocarburos saturados, la sustitución de un enlace C—H por un enlace C—O es una reacción de funcionalización directa que convierte a una molécula inerte en otra reactiva, y permite comenzar una secuencia sintética a conveniencia. Por simplicidad y economía, es deseable que los oxidantes sean moléculas sencillas, como oxígeno o peróxido de hidrógeno, oxidantes baratos y que no dejan residuos indeseables. La inercia cinética del oxígeno para actuar como oxidante es de sobra conocida, así como lo incontrolable de las reacciones de oxidación cuando la activación se produce por vía térmica. Con el peróxido de hidrógeno la situación no es muy diferente; aunque su activación es más fácil, la reacción se inicia a menudo por vías radicalicas, dando lugar a reacciones poco selectivas y en las que es difícil detener la reacción en el producto mono-oxidado. Frente a este desalentador panorama se alza la ubicua utilización del oxígeno como oxidante por los seres vivos, mediante reacciones extremadamente selectivas que transcurren con la formación de superoxo y peroxoderivados en condiciones muy suaves, y que son cataliza-



das por metaloenzimas. La idea, inspirada en la naturaleza, se ha usado en los laboratorios, empleando complejos metálicos como catalizadores en reacciones de oxidación permitiendo avanzar en la comprensión de sistemas biológicos complejos y desarrollar reacciones de enorme importancia sintética e industrial.

El uso de metales para catalizar reacciones de oxidación de compuestos funcionalizados tiene ya una larga historia (la epoxidación de Sharpless o la reacción de Wacker son ejemplos clásicos) pero la oxidación de hidrocarburos no funcionalizados sigue siendo un reto inalcanzado. Una de las dificultades reside en que los propios ligandos con que se forman los complejos metálicos deben ser resistentes a la oxidación, al menos cinéticamente, mientras que el metal debe ser capaz de sufrir reacciones tanto de oxidación como de reducción con facilidad, de tal forma que pueda cerrar un ciclo catalítico. En los últimos años se han descrito distintos sistemas en los que se produce la activación controlada de oxígeno o de peróxido de hidrógeno (*Acc. Chem. Res.* **2012**, *45*, 947–958) y otros que son capaces de producir la activación de enlaces C—H.

En un reciente artículo (*J. Am. Chem. Soc.* en prensa, doi.org/10.1021/ja310866k), una colaboración de las Universidades de Huelva, Autónoma de Barcelona y Oslo, se describe el uso de complejos de cobre con ligandos pirazolilborato como catalizadores de la oxidación de alcanos, cicloalcanos y compuestos aromáticos con H_2O_2 . El sistema produce, además de alcoholes y cetonas, pequeñas cantidades del producto de deshidrogenación de alcanos y cicloalcanos, lo que es inusual en este tipo de reacciones. Los autores han realizado distintos experimentos que permiten obtener algunas evidencias acerca del mecanismo de la reacción. Por una parte, han logrado excluir la participación del mecanismo más común en reacciones de H_2O_2 con metales: su ruptura para dar radicales $HO\cdot$ que actúan como oxidantes (Reacción de Fenton). Por otro lado, han logrado capturar radicales alquilo que se forman durante la reacción. Todas estas evidencias experimentales se han tenido en cuenta para calcular computacionalmente un posible camino de reacción, que se muestra en la Figura; en el que hay que destacar que el cobre cambia entre los estados de oxidación Cu(I) y Cu(III); excluyéndose la participación de otros intermedios de cobre(II), como complejos de tipo superoxo o hidropoxo.

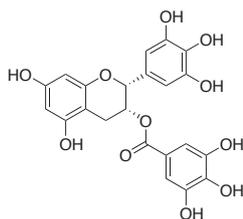
Los resultados permiten comprender las características que han de cumplir los complejos y de ligandos que forman parte de catalizadores para reacciones de oxidación, y proporciona, con fundamento experimental, hipótesis que permiten entender el funcionamiento de metaloenzimas.

Contribuyendo a combatir la enfermedad de Alzheimer

El péptido β -amiloide ($A\beta$) es el principal componente de los agregados proteínicos de las placas seniles observadas en los pacientes con la enfermedad de Alzheimer. Este péptido se produce de forma endógena a partir de la degradación enzimática de la proteína precursora amiloide (APP) y puede oligomerizar (cuando no se encuentra plegado de la forma adecuada), dando lugar a una red irregular de agregados fibrilares denominadas fibras amiloides, con una estructura de lámina β característica. Por otro lado, hay evidencias de que algunos iones de metales de transición como el Cu y el Zn son capaces de interactuar directamente con el péptido $A\beta$, dando lugar a especies asociadas del tipo metal- $A\beta$. Aunque el papel que juegan estas estructuras metal- $A\beta$ en el desarrollo de la enfermedad de Alzheimer no ha sido todavía totalmente dilucidado, se cree que pueden estar implicadas en procesos de agregación y generación de especies oxigenadas reactivas neurotóxicas.

Investigadores de la Universidad de Michigan han descrito recientemente (*PNAS* **2013**, *110*, 3743–3748) que el galato de (-)-epigallocatequina (EGCG) es capaz de prevenir la formación de agregados de fibras amiloides a partir de especies del tipo metal- $A\beta$. El EGCG es un flavonoide natural presente en altas concentraciones en extractos de té verde y que presenta interesantes actividades antioxidantes y antiinflamatorias. Los autores, mediante experimentos de RMN bidimensional, espectrometría de masas y métodos computacionales, son capaces de racionalizar el mecanismo de acción del EGCG a nivel molecular para poder explicar su actividad anti-amiloidogénica. Para ello, proponen la formación de un complejo ternario donde el EGCG es capaz de complejar el ión metálico (Zn^{2+} o Cu^{2+}) presente en el péptido β -amiloide y a la vez influir en la estructura de dicho péptido, dando lugar a conformaciones más compactas que impiden parcialmente el proceso de agregación.

La información obtenida mediante el estudio de este tipo de relaciones estructura-interacción-reactividad, va a ser muy útil, tanto en el diseño racional como en otras estrategias basadas en relaciones estructura-actividad, dirigidas a identificar herramientas químicas que ayuden a elucidar la contribución de los múltiples factores implicados en la patogénesis de la enfermedad de Alzheimer.



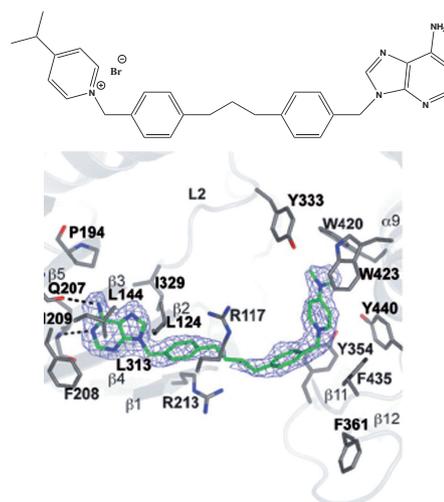
galato de (-)-epigallocatequina (EGCG)

Mecanismo molecular de la cooperatividad alostérica negativa

El alosterismo es un proceso crucial en biología. El primer modelo descrito por Monod, Wyman y Changeux (modelo MWC) explicaba las propiedades cooperativas de enzimas oligoméricas y, aunque es un modelo antiguo, todavía es válido. La conservación de la simetría entre las subunidades

proteicas que forman el oligómero es una de las premisas de este modelo y muchos casos de cooperatividad positiva están de acuerdo con este principio de conservación de la simetría. A diferencia de la cooperatividad positiva, la *cooperatividad negativa* es menos frecuente y en muy pocos casos se ha dado una explicación de este tipo de fenómeno a nivel de cambios estructurales en las proteínas.

En un artículo en prensa en *Angew. Chem. Int. Ed.* (DOI: 10.1002/anie.201209660), investigadores de la Unidad Asociada del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI)-Universidad de Zaragoza-Instituto de Química Física Rocasolano (IQFR-CSIC), la Universidad de Granada, el CNIO y el *University College London*, liderados por Ramón Hurtado-Guerrero, caracterizan experimental y computacionalmente el modo de unión de un compuesto diseñado racionalmente (ver Figura) que se asocia con gran afinidad a la forma dimerica de colina quinasa $\alpha 1$ (CHOK $\alpha 1$). La estructura cristalina de CHOK $\alpha 1$ en complejo con este compuesto revela que la simetría expuesta en el modelo MWC no es respetada (en la Figura se muestra el sitio activo de la enzima complejada con la molécula sintética). Básicamente los dos monómeros asumen conformaciones completamente diferentes, uno abierta y el otro cerrada. Sin embargo, cuando se lleva a cabo simulaciones de dinámica molecular, se observa que, en promedio, la simetría del modelo original MWC se conserva, debido al carácter dinámico de los dos monómeros que alternativamente asumen dos conformaciones diferentes. También mediante otros estudios computacionales, los autores proponen que los monómeros están conectados a través del *network* $\alpha 2\beta 4\beta 5$ - $\alpha 7$ - $\alpha 9$ -L3 presente en cada monómero y que, a su vez, es responsable de la regulación alostérica de CHOK $\alpha 1$. Estos resultados, por lo tanto, explican el mecanismo molecular de la cooperatividad negativa, cómo los monómeros que forman el dímero están conectados y cómo la hipótesis del modelo MWC puede ser válida, incluso cuando esto no es aparente en la estructura cristalográfica estática.



Noticias redactadas por:

Juan A. Casares (Universidad de Valladolid),
 Enrique Mann (IQOG-CSIC),
 Sonsoles Martín-Santamaría (Universidad CEU San Pablo),
 y Bernardo Herradón (IQOG-CSIC).