



#### **INVESTIGACIÓN**

Jorge Otero, Juan R. Granja Aprendiendo de la naturaleza: reacciones en cascada en síntesis **DIVULGACIÓN DE LA QUÍMICA** Marchal **RECORDANDO EL AIQ** QUÍMICA Y SOCIEDAD Valcárcel y Lucena **GESTIÓN DE LA CIENCIA** Cossío LA QUÍMICA EN LA WEB **CARTAS AL EDITOR** 



#### Entidades colaboradoras









#### Socios Corporativos

- · Aldrich Química
- Bruker
- Cepsa
- Feigue
- Janssen Cilag
- Lilly España
- Sugelabor

#### Real Sociedad Española de Química • Junta de Gobierno

#### Presidente

Jesús Jiménez Barbero

#### Vicepresidentes

Pilar Goya Laza Agustí Lledós Falcó

#### Secretario General

Pedro J. Pérez Romero

#### Tesorera

Paloma Yáñez-Sedeño Orive

#### Editor General

Bernardo Herradón García

#### Vocales

Valentín García Baonza Pilar Gómez Sal Miguel Ángel Miranda Alonso Emilia Iglesias Martínez Sonsoles Martín Santamaría Mariona Sodupe i Roure

#### **Ex-Presidente**

Nazario Martín León

#### Presidentes de Secciones Territoriales

#### Alicante

Miguel Yus Astiz

**Aragón** Concepción Gimeno Floría

Asturias Marta Elena Díaz García

Cataluña

#### Juan Bertrán Rusca Castilla-La Mancha

Julián Rodríguez López

#### Extremadura

Vacante

#### Galicia

Carlos Saa Rodríguez

#### Granada

Juan Manuel Salas Peregrín

#### Islas Baleares Vacante

Islas Canarias

#### Fernando García Tellado

La Rioja

## Pedro J. Campos García

Madrid Juan José Vaquero López

#### Málaga

Juan Teodomiro López Navarrete

#### Murcia

Alberto Requena Rodríguez

### Navarra

País Vasco

#### Pascual Román Polo

Salamanca Miguel Ángel Bañares Muñoz

## Sevilla

Manuel Gómez Guillén

#### Valencia

Gregorio Asensio Aguilar

#### Valladolid

Juan A. Casares González

#### Presidentes de Grupos Especializados

Adsorción Julián José Garrido Segovia

Calorimetría y Análisis Térmico Francisco Fraga López

Coloides e Interfases Luis M. Liz Marzán

Cristalografía y Crecimiento Cristalino Fernando J. Lahoz

Didáctica e Historia Manuela Martín Sánchez

Electroquímica Manuel Blázquez Ruiz

Física Atómica y Molecular Luis Bañares Morcillo

Física del Estado Sólido Luis Viña Liste

Fotoquímica José Ma Álvarez Pez

Hidratos de Carbono Francisco Santoyo González

Historia de la Ciencia Pascual Román Polo

Jóvenes Investigadores Químicos Begoña Milián Medina

Nanociencia y Materiales Moleculares Fernando Langa de la Puente

Polímeros Julio San Román Del Barrio

Química Agrícola Mª Luisa González San José

Química Biológica José Luis Mascareñas Cid

Química del Estado Sólido Regino Sáez Puche

Química Inorgánica Jaime Casabó Gisbert

Química Orgánica Joan Bosch Cartes

Química Organometálica Pedro J. Pérez Romero

Química Productos Naturales Isidro González Collado

Reología Antonio Santa María Ibarburu

Resonancia Magnética Nuclear Marta Bruix Bayés

Termodinámica Jaime Amorós Arnau

#### Representantes

ANQUE Carlos Negro Álvarez RSEF Bianchi Méndez Martín

## Revistas patrocinadas por la Real Sociedad Española de Química























La química relaciona causas y efectos sustentándose en la reversibilidad microscópica. Esta frase resume las grandes aportaciones que la química hace en áreas tan dispares como la biomedicina y las ciencias atmosféricas. El artículo de J. Delgado describe resultados recientes sobre el papel del agua en procesos biológicos y medioambientales.

#### ANALES de la Real Sociedad Española de Química

**Editor General** 

Bernardo Herradón Instituto de Química Orgánica General

Editora Adjunta

Sonsoles Martín-Santamaría Universidad CEU San Pablo

Editora Asociada

Yolanda Pérez-Cortés Universidad Rey Juan Carlos

#### Comité Editorial

Manuel Blázquez Universidad de Córdoba Pedro Campos Universidad de La Rioja Juan A. Casares Universidad de Valladolid Miquel Durán Universidad de Girona Valentín García-Baonza Universidad Complutense de Madrid

Javier García-Martínez Universidad de Alicante Juan José Iruín

Universidad del Pais Vasco (San Sebastián)

Pedro J. Pérez Universidad de Huelva Gabriel Pinto
Universidad Politécnica de Madrid

Mario Redondo Inspector de Educación zona Sur Madrid Pascual Román

Universidad del País Vasco (Bilbao) Ma del Carmen de la Torre Instituto de Química Orgánica General-

Paloma Yáñez-Sedeño Universidad Complutense de Madrid

Secretaria Administrativa Patricia Yáñez-Sedeño Real Sociedad Española de Química

#### Facultad de Ciencias Químicas **Universidad Complutense**

Ciudad Universitaria 28040 Madrid Tel (+34) 913 944 356 Fax (+34) 915 433 879

Diseño, Realización y Publicidad



http://www.auladoc.com

Depósito Legal: M-232-1958 ISSN: 1575-3417

### Anales de la Real Sociedad de Química

Volumen 108 • Número 2 • Segunda época Abril-Junio 2012

#### Sumario

Editorial
Cartas al Editor
Investigación Química Interruptores moleculares biomiméticos
Las moléculas de agua, la química y la vida
Aprendiendo de la naturaleza: reacciones en cascada en síntesis
Historia de la Química Histoquímica
Enseñanza de la Química La corona de Gerión y el Eureka de Arquímedes
Recordando el AIQ  El Año Internacional de la Química. Una celebración útil para la docencia de la Química en la educación secundaria
El experimento global del año internacional de la química. Agua: Una solución química 135 Javier García-Martínez
Un año con química en la Universidad de Jaén
Valencia en el Año Internacional de la Química
Alrededor de la Química
Divulgación de la Química: ¡Estáis hechos unos Elementos! Algo más que una historia teatralizada de la tabla periódica para la Noche de los Investigadores
La Química en la WEB
Química y Sociedad         La responsabilidad social de la ciencia y tecnología       156         Miguel Valcárcel, Rafael Lucena
Gestión de la Ciencia  La atracción de talento como eje de la gestión de la <i>I</i> + <i>D</i> : El caso de la Fundación Ikerbasque
Noticias de la RSEQ
Noticias Científicas Relevantes

## **Editorial**

Con esta edición de *Anales de Química* comienza una nueva etapa de la revista. Esta es una época de inquietudes y de esperanza. La situación económica y la falta de apuesta decidida por la ciencia y la educación por parte de los poderes políticos hacen que la química española se sienta amenazada, tanto en la facetas investigadora como educativa. De esta amenaza y potencial debilidad, debemos salir reforzados y encontrar oportunidades para próximos desarrollos.

Para este futuro, contamos con las consecuencias del Año Internacional de la Química (AIQ). Todas las valoraciones que podemos hacer de los resultados del AIQ son positivas; destacando especialmente el reconocimiento de que la química es una ciencia fundamental en nuestro bienestar. A los químicos nos gusta decir que Todo (lo cotidiano) es química. Esta idea queda plasmada en el logo mostrado en la portada de la revista. La imagen ha sido diseñada por el Dr. Carlos Miranda y representa el papel ubicuo de la química en nuestras vidas: desde las sustancias naturales a la alimentación, pasando por la energía o nuestra salud, entre otras áreas cotidianas.

En la sociedad actual, el papel de los medios de comunicación, incluyendo las redes sociales, es fundamental para conseguir impacto y valoración social. No podemos dejar pasar la oportunidad que el AIQ nos ha brindado para seguir incidiendo en las relaciones entre química y sociedad. Para lograr estos objetivos, la RSEQ se ha involucrado en las redes sociales a través de cuentas en Facebook, Twitter y Linkedin. Animamos a todas las personas interesadas en química a participar activamente en esta iniciativa que estamos usando como vía de comunicación inmediata con todos nuestros seguidores, enlaces y amigos.

En este número de Anales de Química empezamos varias secciones nuevas (aunque no estarán presentes en todas las ediciones futuras de Anales de Química). En primer lugar, Cartas al editor; en la que queremos recoger las inquietudes de la comunidades químicas española e hispanoparlante sobre temas relacionados con nuestra ciencia, estudios y profesión. En esta época de incierta política científica, éste será un buen foro para debatir ideas y propuestas. Para hacer más ágil el debate, las Cartas al editor también se publicarán en la nueva web de la RSEQ, actualmente en preparación. Esta sección también servirá para recordar brevemente a figuras importantes de la ciencia, como se hace en esta edición. La sección Cartas al editor se abre con una escrita por el profesor Elguero en la que destaca como la química y sus términos son usados frecuentemente en publicidad, medios de comunicación o arte; para resaltar aspectos positivos. Como el profesor Elguero menciona en su carta, os animamos a que enviéis contribuciones a esta sección que denominaremos La imagen positiva de la química. Somos nosotros, los químicos, los primeros interesados en valorizar nuestra ciencia y no debemos dejar de incidir en sus aspectos positivos.

Muy relacionada con el impacto que la química tiene en la sociedad son las múltiples actividades que se organizaron durante el Año Internacional de la Química. Para recordar el trabajo realizado, especialmente el que tiene valor educativo-



divulgativo v que ha generado material útil (va sea virtual a través de la web, demostraciones de laboratorio, o audiovisual, entre otros), se invita a los responsables a describir las actividades a través de artículos en Anales de Química. En esta edición se publican cuatro artículos variados en esta sección. Uno de ellos detalla una iniciativa global de inmenso éxito (Experimento global del agua); otro artículo destaca la contribución que la RSEQ, a través de la Sección Territorial de Valencia, ha realizado en el AIO; un tercer artículo relata las múltiples actividades realizadas en una universidad (la de Jaén) y; finalmente, se describe también las numerosas y variadas iniciativas desarrolladas en un instituto de enseñanza secundaria (el IES Valle del Saja, Cantabria). Todos los artículos están adecuadamente complementados con referencias que pueden usarse para realizar actividades similares en diversos foros. En los próximos números de Anales de Química seguiremos publicando artículos sobre esta temática. Animamos a potenciales autores a escribir artículos describiendo las actividades realizadas en su entorno con motivo del AIO.

Estos artículos sobre el AIQ tienen perfiles divulgativo y educativo. En esta etapa de *Anales de Química*, queremos que el contenido de todos los artículos (de cualquier sección) tengan este carácter y que puedan ser entendibles por todos los lectores de la revista. Otra de las secciones nuevas de la revista es *Divulgación de la química*, que inauguramos con un artículo en el que se describe una interesante obra de teatro, en el que con la excusa del desarrollo de la *Tabla Periódica*, se cuenta una parte importante de la historia y los personajes de la química. También se ha creado una nueva sección, *La química en la web*, en la que se destaca los valiosos sitios disponibles en INTERNET para la difusión de los avances de la química, y sus valores didácticos y educativos.

En esta época, la química no debe estar alejada de la sociedad y la RSEQ debe tener un papel activo en esta tarea. Desde *Anales de Química* queremos reforzar esta faceta. Por un lado, con el tipo de artículos ya comentados, en los que abordaremos, desde una perspectiva divulgativa-educativa, la influencia que la química tiene en nuestro bienestar social. Por otro lado, publicaremos artículos de opinión en los que trataremos

esta faceta desde distintas perspectivas. En esta edición se publican dos artículos, uno abordando la responsabilidad social de la ciencia y otro sobre la gestión de un organismo de investigación, *Ikerbasque*. No hay que olvidar que la mayor parte de la investigación en España se hace con financiación y en centros públicos; por lo que la gestión de estos recursos es un aspecto que imbrica a la química con la sociedad. En próximas ediciones de *Anales de Química* publicaremos artículos en estas temáticas, así como entrevistas con gestores de la ciencia española. No nos hemos olvidado de la situación de la financiación de la ciencia española, lo que se trata en una de las reseñas de la sección *Noticias de la RSEQ*.

En esta sección se tratan, como es tradicional, las novedades en la RSEQ y sus secciones territoriales; incluyendo diversos premios otorgados en estos últimos meses. Cuando ya estábamos cerrando esta edición, recibimos la agradable noticia de que el profesor Nazario Martín había sido galardonado con el *Premio Jaime I de investigación b*ásica; lo que es brevemente reseñado en *Noticias de la RSEQ* y al que felicitamos cordialmente. La concesión de este premio al anterior presidente de la RSEQ supone un reconocimiento a su excelente labor investigadora; pero, en cierto modo, también a la aportación que la química hace por el progreso científico y el bienestar de la sociedad.

En la sección *Noticias de la RSEQ* se recoge, por primera vez en *Anales de Química*, una reseña de la Olimpiada Nacional de Química celebrada a finales de abril de 2012. Esta reseña sirve como pequeño homenaje a los alumnos participantes y a

sus profesores-preparadores; y quiere dejar constancia de la implicación que la RSEQ tiene en tareas de formación de estudiantes y de apoyo al profesores preuniversitarios.

Aunque hay muchas novedades en esta edición de Anales de Química, seguimos manteniendo las secciones tradicionales: Investigación química, Enseñanza de la química (que toma el testigo de la sección Aula y laboratorio de química, y cuyos contenidos serán ampliados en próximas ediciones), Historia de la química (que se ampliará con biografías cortas de químicos españoles) y Medio ambiente (aunque en esta edición no se publica ningún artículo de esta sección). Los tres artículos de la sección Investigación Química son de áreas variadas (el agua, síntesis orgánica y máquinas moleculares), aunque tienen aspectos comunes: la naturaleza como inspiración en química.

Para llevar a cabo tantos cambios en *Anales de Química* en tan poco tiempo, he contado con un Comité Editorial (sus nombres se indican en la primera página de esta edición) con amplia y variada experiencia (investigación, docencia, divulgación, etc.) y que están convencidos de la necesidad de acercar la química a la sociedad. Mi reconocimiento al trabajo realizado. También quiero agradecer a los autores por la rápida respuesta a las invitaciones de escritura de artículos, especialmente para secciones nuevas en *Anales de Química*.

Queridos colegas, espero que disfrutéis de la lectura de la revista.



## Cartas al Editor

#### Las cartas se pueden remitir por correo electrónico a editor.general@rseq.org o a b.herradon@csic.es

#### Una imagen positiva de la química

"Peace, if it ever exists, will not be based on the fear of war, but on the love of peace. It will not be the abstaining from an act, but the coming of a state of mind. In this sense the most insignificant writer can serve peace, where the most powerful tribunals can do nothing."

Julien Benda, La trahison des clercs, 1927.

Muchas veces hemos oído, y aún seguimos oyendo, compañeros nuestros hablar de la mala imagen que tiene la química en nuestra sociedad. Es un error. El público en vez de recordar que la química no se merece la imagen que tiene, recuerdan que la química es mala. Tenemos que cambiar nuestro discurso y explicar que la química es buena y que la química es querida y reconocida por la sociedad como se merece.

















Propongo a los lectores de *Anales de Química* enviar a la redacción fotos que reflejen esa imagen positiva de nuestra disciplina. Que muestren que la sociedad usa términos y nombres químicos en un sentido atractivo. He aquí algunos ejemplos:

Seguro que hay muchos más, más bonitos y más originales. Ánimo.

José Elguero

Instituto de Química Médica (IQM-CSIC)

#### Francisco Colom Polo (rectificación)

Se deslizó un error en las fechas que aparecen en el encabezamiento del obituario de la página 72 del número de Enero-Marzo de 2012 de la Revista. El encabezamiento correcto es:

Francisco Colom Polo (1927–2011). **Nota de la redacción**: el error fue nuestro y pedimos disculpas.

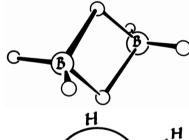
Claudio Gutierrez de la Fe. Instituto de Química Física "Rocasolano" (IQFR-CSIC).

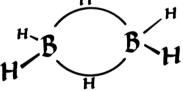
#### William N. Lipscomb, Jrin memoriam

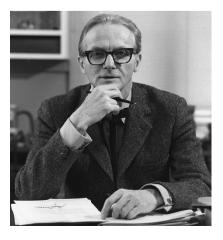
Hace aproximadamente un año, el pasado 14 de Abril de 2011 murió en Cambridge, Massachusetts (EEUU), William N. Lipscomb, uno de los pioneros de la química del boro, quién recibió el premio Nobel de química en el año 1976 por sus estudios sobre los boranos y los problemas de enlace químico derivados de los mismos. Lipscomb continuó el trabajo de Pauling sobre enlace químico en los años 1940s, el cual culminó con un avance en el conocimiento básico de cómo los átomos se unen en las moléculas, sobre todo aplicado a los boranos, compuestos que contienen boro e hidrógeno. En el obituario de Lipscomb, publicado en The New York Times el 15 de Abril del pasado año, se menciona "...como el Dr Lipscomb solía decir...Para mí, en primer lugar, el proceso creativo requiere de unas buenas nueve horas de sueño por la noche. Segundo, no se pueden dar prisas por la necesidad de aplicaciones prácticas...". El trabajo de Lipscomb y su grupo consistió en el desarrollo de técnicas de difracción de rayos X, normalmente

utilizadas en ciencias físicas, las cuales permitieron asignar las conexiones entre átomos en los desconcertantes boranos o hidruros de boro. Uno de los descubrimientos más impactantes fue la necesidad de definir un enlace tricéntrico B-H-B de dos electrones en la estructura del diborano B2H6, tal como muestra la figura; dicha estructura es completamente distinta a la del etano H<sub>2</sub>C-CH<sub>2</sub>. La electronegatividad de los átomos de hidrógeno, boro y carbono está ordenada del siguiente modo:  $\chi(C) > \chi(H) > \chi(B)$ , de modo que las conexiones B-H tienen cargas formales invertidas sobre cada átomo si las comparamos con (la mayoría de) las conexiones C-H de la química orgánica, de ahí el comportamiento totalmente diferente de agregados de tipo borano a la hora de interaccionar, por ejemplo, con biomoléculas.

A nivel internacional se celebra cada tres años una conferencia sobre la química del boro (IMEBORON) la cual, a grandes rasgos incorpora la química de agregados de boro (heteroboranos poliédricos cerrados o abiertos) y moléculas que contienen







Cartas al Editor 91

uno o varios átomos de boro. A nivel europeo también se celebra cada tres años una conferencia sobre la química del boro (EUROBORON). Cabe destacar que también se celebra independientemente cada tres años una conferencia de estado sólido del boro (International Symposium on Boron, Borides and Related Materials-ISBB). Uno de los grandes retos dentro de la química del boro cabe encontrarlo en la conexión entre el mundo bidimensional (2D) y tridimensional (3D) de los patrones moleculares basados en el boro, va que éste puede encontrarse en láminas grafiticas, como en el superconductor MgB<sub>2</sub> y en patrones tridimensionales como los icosaedros B<sub>12</sub> conectados en 3D en el boro puro, u octaedros truncados B<sub>24</sub>, también conectados en 3D, como en el sólido ScB<sub>12</sub>.

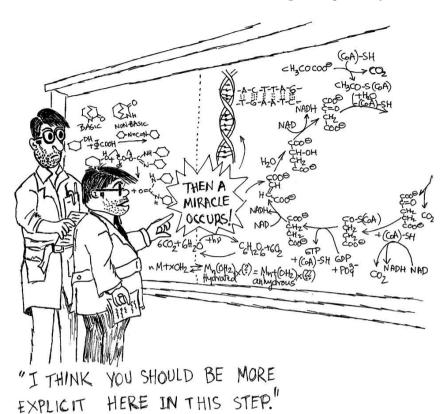
En España contamos con excelentes grupos de investigación en la química inorgánica de agregados de boro; el grupo pionero de Francesc Teixidor y Clara Viñas en Barcelona, así como el grupo de Antonio Laguna y el grupo de Ramón Macías, ambos en Zaragoza.

En la Figura se muestra la geometría (arriba) del diborano B<sub>2</sub>H<sub>6</sub> con el par de enlaces tricéntricos B-H-B de dos electrones (abajo) y una foto de W. N. Lipscomb.

### Josep María Oliva

Instituto de Química Física "Rocasolano" (IQFR-CSIC)

#### Científicos debatiendo sobre las moléculas de agua, la química y la vida



**Delgado-Martín** Instituto de Investigaciones Químicas (IIQ-SCIC)



# Interruptores moleculares biomiméticos\*

Marina Blanco-Lomas, Pedro J. Campos, Laura Rivado-Casas, Matilde de las Rivas, Diego Sampedro

Resumen: Durante las últimas décadas, los científicos han tratado de construir dispositivos moleculares eficientes pero, hasta ahora, todos los intentos de diseñar sistemas artificiales palidecen frente a las máquinas moleculares naturales en funcionamiento. Aprendiendo de la naturaleza podríamos ser capaces de hacer uso de las excelentes propiedades que han sido refinadas por una lenta evolución. A continuación revisaremos brevemente algunas de las máquinas moleculares naturales más conocidas y las tomaremos como fuente de inspiración para el diseño de interruptores artificiales biomiméticos. Tomando el trabajo de la naturaleza como punto de partida, señalaremos algunos de los requisitos para construir máquinas moleculares eficientes.

Palabras clave: Interruptores moleculares, biomimetismo, retinal, fotoquímica, máquinas moleculares.

Abstract: For the last decades, scientists have tried to build efficient molecular devices but, until now, every attempt to design artificial systems pales beside the nature's molecular machines at work. By learning from nature, we could be able to make use of the excellent properties refined by slow evolution. Here we will briefly review some of the better-known natural molecular machines as an inspiration for the design of biomimetic artificial switches. Taking the nature's work as a starting point, we will specify some of the requirements to build efficient molecular machines.

Keywords: Molecular switches, biomimetics, retinal, photochemistry, molecular devices.

#### Introducción

A lo largo de la historia, el progreso de la humanidad siempre ha estado ligado al diseño, construcción y uso de máquinas. El incremento en las capacidades y la complejidad de las aplicaciones de las máquinas diseñadas por el hombre ha sido constante, aunque sólo en las últimas décadas el desarrollo de dispositivos de tamaño cada vez menor ha resultado también importante. El desarrollo de máquinas a nivel molecular ha cosechado grandes éxitos en los últimos años y ha levantado grandes expectativas por sus promesas en campos tan distintos como la ciencia de materiales, la energía y la medicina. Sin embargo, hasta el momento las máquinas diseñadas por el hombre para operar a escalas nanométricas sólo son torpes intentos si se comparan con los equivalentes naturales. Las máquinas moleculares, tanto naturales como artificiales, son sistemas diseñados para llevar a cabo funciones específicas cuya realización se basa en la transformación de energía en trabajo mecánico. La naturaleza está llena de ejemplos de maquinaria molecular perfectamente diseñada y con un funcionamiento extraordinariamente eficiente.

Si somos capaces de aprender de la naturaleza y sus diseños, tal vez podamos utilizar las excelentes propiedades que estos compuestos han adquirido tras un lento proceso de evolución.





M. Blanco-Lomas L. Rivado-Casas

M de las Rivas







P. J. Campos

D. Sampedro

Departamento de Química, Universidad de La Rioja, Grupo de Síntesis Química de La Rioja, Unidad Asociada al C.S.I.C. Madre de Dios, 51, E-26006, Logroño. C-e: diego.sampedro@unirioja.es

Recibido: 3/10/2011. Aceptado: 21/12/2011.

#### ¿Qué podemos aprender de la naturaleza?

La ciencia nos ha permitido diseñar, construir y manipular todo tipo de sistemas de creciente complejidad. La humanidad ha desarrollado nuevos materiales con propiedades mejoradas y ha construido máquinas capaces de resolver funciones complejas. Sin embargo, no debemos olvidar que la naturaleza había resuelto hace ya tiempo la mayoría de estos problemas usando para ello soluciones que en su mayoría son más complejas, sutiles, elegantes y eficientes que las nuestras.<sup>1</sup>

La mente humana, en general, ha sabido aprovecharse de los materiales directamente diseñados por la naturaleza, tratando siempre de desarrollar sistemas similares o, incluso, mejorados. Por ejemplo la seda es una de las fibras naturales más resistentes, constituida por series de aminoácidos de tipo glicina-serina-glicina-alanina que forman en su estructura secundaria láminas beta unidas por puentes de hidrógeno intramoleculares. La elevada proporción de aminoácidos de glicina, los más pequeños de toda la serie aminoacídica, es la que otorga a la seda sus excepcionales propiedades de compactación, dureza y resistencia. Hace miles de años, el pueblo chino reconoció por primera vez las propiedades de la seda, e intentó emularla generando algún tipo de seda artificial.<sup>2</sup> No obstante, la primera seda manufacturada no se obtuvo hasta 1890, cuando se produjo viscosa a partir de celulosa.

Ya en el siglo XX, con el emerger de las tecnologías biónicas, la búsqueda de sistemas basados o generados a partir de organismos naturales ha generado un interés creciente que busca comprender y aprender cómo los seres vivos logran alcanzar niveles tan complejos de organización, para a partir de ahí poder sintetizar y desarrollar nuevos materiales cuyas propiedades les permitan interaccionar con el medio.

Los científicos han seguido esta inspiración basada en los mecanismos biológicos y en la naturaleza, por caminos principales. Por un lado, han abordado el hecho de que un sistema biológico pueda ser usado en un sistema sintético como tal, por sí mismo. Según esto, la funcionalidad del sistema natural podría ser transferida a una construcción de carácter artificial, lo que permitiría usar sus propiedades originales de una manera nueva e incluso totalmente diferente a la inicial.<sup>3</sup> Así por ejemplo, el ADN ha sido empleado recientemente para cuestiones de carácter mucho más exótico de lo habitual y que difieren en gran medida de su papel biológico ordinario, como es el usar enlaces selectivamente escogidos entre secuencias de ADN complementarias para unir partículas a superficies. Por otro lado, el trabajo de la naturaleza puede ser emulado no sólo mediante el uso o el mero entendimiento del funcionamiento de los sistemas biológicos, sino también como una pieza clave en sistemas desarrollados artificialmente, que alcanzarían gracias a ellos propiedades extraordinariamente mejoradas.<sup>4,5</sup> De esta forma, los científicos pueden tratar de encontrar los factores determinantes en el funcionamiento de diferentes estructuras biológicas, intentando construir a partir de los mismos sistemas artificiales con propiedades mejoradas o más controlables.

De igual modo, la biología ha generado también grandes ejemplos de biomaquinaria; a lo largo de millones de años de evolución y refinamiento de las especies, los organismos vivos muestran hoy por hoy una serie de estructuras biomecánicas en su interior mucho más eficientes y capaces que nuestros prototipos manufacturados. Así, estas máquinas y motores moleculares, responsables de innumerables procesos de carácter biológicos, no son sino versiones nanométricas de las máquinas que hoy en día usamos nosotros mismos a nivel macroscópico. A partir de ellas, buscamos el aprender a desarrollar nuestras propias versiones de sistemas moleculares eficaces, ya sea por directa mimetización de los sistemas naturales o por la creación de sistemas basados en los anteriores que puedan llegar a presentar mejoras o que, al menos, estén más directamente enfocados a la resolución de nuestras necesidades específicas.

En la siguiente sección trataremos, así, de presentar de forma escueta a alguna de estas máquinas moleculares naturales: entendiendo su funcionamiento y sabiendo aprovechar el resultado del lento trabajo evolutivo que la naturaleza nos ofrece, podremos llegar a ser capaces de diseñar y construir máquinas biomiméticas de modo artificial.

#### Máquinas moleculares naturales

Las células albergan cientos de máquinas moleculares diferentes que están especializadas para realizar una función determinada. Estos dispositivos, compuestos por proteínas, ácidos nucleicos u otras moléculas orgánicas, requieren energía para llevar a cabo sus funciones al igual que sus análogas macroscópicas. Por lo tanto, convierten energía química almacenada en las células en energía mecánica. En los siguientes

epígrafes podrá verse como estas máquinas moleculares están presentes en una multitud de procesos biológicos esenciales, entre los que se incluyen el transporte de cationes, la síntesis de ATP, la contracción muscular y la visión.

# Canales de iones metálicos actuando como válvulas moleculares naturales

Las células requieren el transporte de cationes, como son Na<sup>+</sup>, Ca<sup>2+</sup> y K<sup>+</sup>, a través de sus membranas para poder ser distribuidos a sus componentes celulares. Sin embargo, este proceso se ve dificultado ya que dichas membranas celulares son generalmente impermeables a los iones y nutrientes que se necesitan para vivir, protegiendo así al contenido celular. Por lo tanto, se necesitan diferentes mecanismos de transporte para que los cationes necesarios lleguen al interior de la célula. Por un lado, se encuentran los transportadores, moléculas huésped embebidas en la membrana que ayudan a los cationes a atravesarla mediante la formación de un complejo. Sin embargo, este tipo de transporte tiene la desventaja de que es bastante lento porque está limitado por la difusión. Por otro lado, están los canales iónicos, proteínas de membrana que forman caminos desde el centro de la proteína con el fin de expandir la membrana celular y permitir el paso de iones. Este último mecanismo de transporte es más rápido que el de un transportador. Como ejemplo de un canal de iones natural se presenta a continuación el mecanismo de la bacteriorodopsina, una proteína pequeña y robusta que se encuentra en la membrana celular de un microorganismo halofilico llamado Halobacterium salinarum y que funciona como una bomba de protones activada por la luz<sup>6</sup> (ver Figura 1).

La bacteriorodopsina está formada por 7 hélices (de A a G en la Figura 1) que atraviesan la membrana celular y se unen a ella a través de unos pequeños bucles. Además, está constituida por un pigmento lineal denominado retinal, el cual está unido al átomo de nitrógeno de un residuo de lisina de la hélice G a través de una base de Schiff protonada. El cromóforo del retinal de la bacteriorodopsina sufre una isomerización al ser irradiado con luz visible pasando de tener todos sus dobles enlaces en *trans* a tener el 13-cis, a través de una serie de intermedios K, L, M, N y O, de los cuales el L, M y N se encuentran represen-

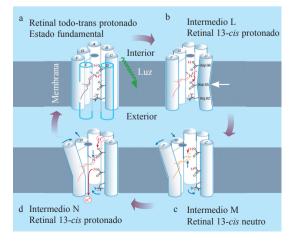


Figura 1. Una máquina molecular natural: la bacteriorodopsina actuando como bomba de protones.

94 Diego Sampedro et al.

tados en la Figura 1. Este cambio conformacional es utilizado por la base de Schiff para empujar a un protón a través del conjunto de las 7 hélices, desde el interior de la célula hasta el medio extracelular, siendo más tarde reprotonado por el citoplasma. Por lo tanto, en este caso particular, el cromóforo del retinal actúa como una válvula molecular dentro de la membrana celular de este organismo.

#### La ATP sintasa, un motor rotatorio natural

Tal y como se ha dicho anteriormente, es necesario disponer de energía para que las máquinas moleculares funcionen. En el caso de la síntesis de ATP (adenosina trifosfato), llevada a cabo por la enzima ATP sintasa, <sup>7</sup> los dos tipos de reservorios de energía celulares más comunes son utilizados: la energía almacenada en los enlaces fosfato de los nucleótidos, generalmente ATP y en los gradientes electroquímicos transmembrana. La proteína ATP sintasa es un motor rotatorio natural constituido por dos unidades,  $F_0$  y  $F_1$ , unidas por un eje común (ver Figura 2).  $F_0$  es un canal de protones hidrófobo embebido en la membrana mitrocondrial, y  $F_1$  es una unidad catalítica hidrófila que sobresale hacia la mitocondria. Por lo tanto, el resultado de este complejo proteico es el de dos unidades de motor rotatorio que se encuentran acopladas. El motor  $F_1$ utiliza la energía liberada durante la síntesis de ATP para girar en una dirección, mientras que el motor  ${\cal F}_0$  utiliza la energía almacenada en los gradientes electroquímicos transmembrana para girar en la dirección opuesta. Yasuda et. al.<sup>8</sup> concluyeron a través de una serie de experimentos que la  $F_1$ -ATP sintasa podía utilizar casi el 100% de la energía derivada del ATP y convertirla en trabajo mecánico, con lo que se consideró un motor rotatorio muy eficiente.

# Motores moleculares que realizan un movimiento lineal en la naturaleza

Dentro de los distintos tipos de motores biomoleculares, adquieren gran relevancia aquellos que realizan un movimiento lineal siguiendo un camino prefijado, ya que están involucrados en procesos cruciales como son el tráfico intracelular, la división celular o la contracción muscular.

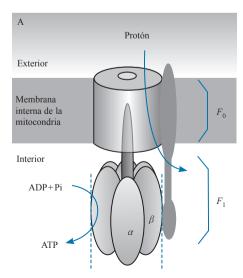


Figura 2. Un motor rotatorio natural: ATP sintasa.

En las células eucariotas se necesitan sistemas eficientes que se encarguen del transporte intracelular con el fin de abastecer a los diferentes orgánulos, entre los que se encuentran los motores proteicos microtubulares, como es la kinesina (ver Figura 3).<sup>10</sup>

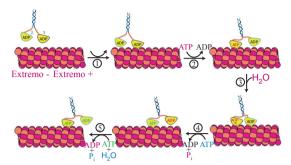


Figura 3. Un motor lineal natural: kinesina.

La kinesina convencional es un heterotetrámero, que consiste en 2 cadenas más pesadas, las cuales están involucradas en la unión y movilidad de los microtúbulos, hidrólisis del ATP necesaria para realizar el movimiento y la dimerización de proteínas, y dos cadenas más ligeras, que regulan la actividad de las cadenas pesadas y la unión a diferentes cargas. En totalidad, la kinesina presenta unos 80 nm de elongación. Los microtúbulos que son recorridos por la kinesina durante su movimiento lineal y con los que se encuentra en contacto en todo momento, están formados por un conjunto de proteínas tubulares que se agrupan formando una especie de cilindro. Por cada molécula de ATP hidrolizada durante el movimiento, la kinesina realiza un paso de 8 nm sobre la superficie del microtúbulo. Además, la kinesina se mueve con una velocidad de aproximadamente 1,8 µm/s y puede aguantar cargas de 6 pN.

En los procesos de división celular nos encontramos con otros motores moleculares que realizan un movimiento lineal, como son la ARN polimerasa, que se encarga de la síntesis de nuevo ARN a partir de una plantilla de ADN, <sup>11</sup> y la ADN helicasa. <sup>12</sup>

# El cromóforo del retinal y su importancia como motor molecular

Uno de los ejemplos más importantes en la naturaleza de un motor molecular es el cromóforo del retinal en la proteína rodopsina, que sufre un proceso de isomerización *cis-trans* durante el proceso de la visión.<sup>13</sup> En los vertebrados, el proceso de la visión se inicia en los fotorreceptores de bastones y conos del ojo. Las entidades fotosensibles en estas células son pigmentos visuales que consisten en la apoproteína apropiada, la opsina, y un cromóforo, el 11-*cis*-retinal, que se encuentra embebido dentro de la opsina (Figura 4).<sup>14</sup>

La rodopsina (opsina) forma parte de una familia de proteínas conocida por ser receptores acoplados a proteínas G y está compuesta por 7 hélices que atraviesan la membrana de las células de los bastones del ojo. 15 El 11-cis-retinal se encuentra unido a un residuo de lisina de la séptima hélice (Lys296 en el caso de la rodopsina bovina) formando una unión a través de una base de Schiff (PSB11), la cual está protonada y estabilizada por un carboxilato de la proteína cargado negativamente.

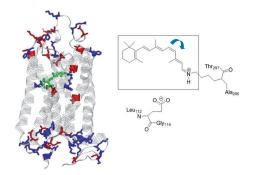


Figura 4. Rodopsina y su cromóforo.

Además, el anillo de  $\beta$ -ionona se encuentra acoplado a la región hidrófoba de la opsina a través de interacciones hidrófobas. Por lo tanto, el cromóforo del retinal está unido mediante tres tipos de enlaces químicos diferentes a la rodopsina.

La función de la rodopsina en la cascada de señales de transducción del proceso de la visión es la de activar a la transducina, una proteína G heterotrimérica, mediante la absorción de luz.<sup>17</sup> En ausencia de luz visible, el retinal presenta una conformación *cis* entre sus carbonos 11 y 12. Al absorber luz visible (longitud de onda entre 400 y 600 nm) se produce la fotoisomerización de este doble enlace para dar una conformación *trans* (Figura 5). Esto produce una serie de cambios conformacionales en la rodopsina que conllevan la activación de la proteína G transducina y el inicio del proceso de la visión.<sup>18</sup>

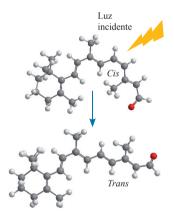


Figura 5. Reacción de isomerización del retinal, inducida por vía exclusivamente fotoquímica.

El proceso de isomerización cis-trans del retinal en la rodopsina es muy eficiente, presentando un rendimiento cuántico de isomerización ( $\Phi_{\rm isom}$ ) in vivo de 0,67. <sup>19</sup> Asimismo, los bastones de las células del ojo en humanos son capaces de responder a la absorción de un único fotón. Esta isomerización tan eficiente se ve favorecida por el entorno proteico en el que se encuentra la rodopsina, ya que el cromóforo de la rodopsina en disolución no se comporta de igual forma. Debido a la elevada eficiencia del proceso de isomerización del retinal  $in\ vivo$ , éste ha sido ampliamente estudiado y utilizado como modelo para el diseño de muchos interruptores moleculares activados por la luz. Ya que se ha establecido que la elevada

eficiencia en la isomerización del PSB11 es debida en parte al complejo proteico que lo rodea, una modificación en estos compuestos será diseñar compuesto no natural capaz de reproducir en disolución las propiedades del cromóforo alojado en la proteína. Así, las PSBs de polienoles constituyen una clase de interruptores que sirven como un modelo útil en el desarrollo de motores o interruptores moleculares activados por la luz.

#### Máquinas moleculares artificiales

Tal y como ya hemos explicado con anterioridad, pueden considerarse dos formas diferentes a la hora de abordar el diseño de máquinas moleculares artificiales. La primera aproximación sería aquélla en la que se introducen directamente en sistemas artificiales máquinas moleculares naturales como las vistas en la sección anterior. De esta manera, en este tipo de maquinaria híbrida se estarían combinando la eficiencia de las máquinas naturales con las nuevas aplicaciones y los nuevos usos de los sistemas manufacturados. Han sido ya desarrollados, de hecho, numerosos ejemplos de este tipo de acercamiento a la maquinaria molecular biomimética. <sup>20-22</sup>

La otra posibilidad sería la de usar los sistemas naturales a modo de inspiración y punto de partida para la posterior generación de diseños en los que se hubiese intentado ajustar sus propiedades en función de las necesidades específicas e incluso mejorar las mismas dentro de lo posible. Con vistas a este objetivo, es preciso considerar algunos factores claves como son el tamaño de las moléculas, los medios de los que se dispone para llevar a cabo las operaciones, el tipo de movimiento o la escala de tiempo en la que se produce. En este apartado intentaremos referirnos resumidamente a algunos de estos factores.

#### Conceptos básicos

Como va se ha comentado, las máquinas moleculares, son sistemas diseñados para transformar la energía en trabajo mecánico. Los sistemas moleculares funcionan a través de movimientos electrónicos o nucleares controlados por movimientos de tipo Browniano<sup>23</sup> (movimiento aleatorio que se observa en algunas partículas microscópicas que se hallan en un medio fluido). Tal y como hemos explicado en apartados anteriores, los componentes de las máquinas moleculares pueden realizar diversos tipos de movimientos (oscilatorio, linear, rotatorio...). Esto hace que las máquinas moleculares hayan de ser cuidadosamente diseñadas de tal forma que se maximicen los movimientos deseados y se minimicen aquellos en los que no estamos interesados y que conllevarían una disminución en la eficiencia global de nuestra máquina. Así, por ejemplo, sería idóneo conseguir un movimiento de tipo rotatorio gracias únicamente a la rotación alrededor de enlaces químicos de tipo covalente. Además, si somos capaces de anclar la máquina a un soporte sólido, se podría conseguir un movimiento concertado y dirigido difícil de conseguir en sistemas en disolución.<sup>24</sup>

Sin embargo, no sólo es importante el hecho de controlar el movimiento de los diferentes componentes de una máquina molecular, sino que también es fundamental el poder monitorizar dicho movimiento. Para poder lograr esto, sería necesario que los reordenamientos electrónicos o nucleares ocasionen una modificación mensurable en las propiedades físicas o 96 Diego Sampedro et al.

químicas del sistema. En particular, veremos más tarde cómo el uso de la luz es especialmente adecuado, dado que puede emplearse tanto para lograr que la máquina funcione como para monitorizar el estado del propio sistema.<sup>25a</sup>

Si vamos ahora un poco más allá, podemos pensar en cómo una máquina capaz de llevar a cabo procesos de tipo cíclico sería mucho más fácil de controlar y de manejar. En el caso de sistemas incapaces de repetir por sí solos la operación, sería preciso emplear un estímulo externo, diferente de la energía suministrada, que reiniciase el sistema. Esto, claramente, contribuiría a una ralentización en la operatividad de la máquina, así como a un incremento de su complejidad intrínseca.

Por otro lado, una máquina que pudiese operar de forma cíclica podría llegar a considerarse autónoma, lo que implicaría que podría seguir funcionando en un medio constante siempre y cuando la fuente primaria de energía no se extinguiese. De hecho, la mayoría de las máquinas moleculares naturales son autónomas, mientras que las artificiales necesitan impulsos externos que las reinicien una vez que llevan a cabo su trabajo. Esta es una de las principales ventajas biológicas que se pretende emular en los análogos miméticos artificiales.

Por último, la escala de tiempo en la que tiene lugar el proceso también ha de ser tenida en consideración. El tiempo que emplea una máquina molecular depende directamente del tipo de reorganización que esté llevando a cabo, de los componentes implicados y del medio que rodee a la propia máquina, pudiendo variar desde los picosegundos hasta los segundos. Es preciso, por tanto, que otras propiedades como el tipo de movimiento realizado y la monitorización del mismo transcurran en la misma escala de tiempo.

#### Suministro energético

El suministro energético o la fuente de energía empleada es uno de los factores claves a la hora de hablar de maguinaria molecular. Como ya se ha mencionado, las máquinas moleculares actúan a través de una serie de reorganizaciones que, a su vez, tienen lugar gracias al empleo de los estímulos adecuados, que convierten de forma puntual la energía en trabajo mecánico. La naturaleza de estos estímulos determina no sólo la naturaleza química de la máquina en sí, sino también el tipo de movimiento y el control del mismo.<sup>25</sup> La mayoría de las máquinas moleculares naturales se activan gracias a estímulos de carácter químico: la concentración de protones, los gradientes de carga iónica o la interacción entre moléculas puede afectar a la operación puntual realizada por nuestra máquina. Sin embargo, en una máquina activada por energía química también es necesario considerar la necesidad de eliminar o reutilizar los diferentes productos de desecho que se puedan generar durante el funcionamiento de la máquina. Este hecho implica, a nivel práctico, serias limitaciones en la función y el diseño de máquinas moleculares artificiales basadas en este tipo de estímulo.<sup>26</sup>

La temperatura es, tal vez, el estímulo más simple mediante el cual una máquina puede ser activada. Así por ejemplo, la actividad de una enzima se ve seriamente afectada cuando la temperatura asciende, dado que esto causa en la misma cambios conformacionales.<sup>27</sup> Por contra, el uso del calor como fuente de energía acarrea otra serie de problemas como son la dificultad para controlarlo, tanto en términos

de tiempo como de localización, y el hecho de que se disipa muy rápidamente.

En lo relativo a fuerzas mecánicas, y aunque es dificil emplearlas a modo de estímulos adecuados en sistemas artificiales, sí que es posible observarlas en medios naturales como es por ejemplo el caso de la sensibilidad auditiva y del sentido del tacto, cuyas bases biológicas de funcionamiento residen en fuerzas de este tipo.

Por otro lado, la habilidad que presentan los impulsos electroquímicos para producir reacciones endergónicas y reversibles se ha empleado en numerosas ocasiones para producir dispositivos activados mediante impulsos de este tipo. 28 Esto conlleva que transferencias heterogéneas de electrones puedan emplearse para activar el funcionamiento de las máquinas moleculares presentando, además, una serie de ventajas importantes, como serían por ejemplo la ausencia de productos de desecho que hubiese que eliminar a posteriori y la capacidad de los electrodos para actuar a modo de interconexión entre el nivel molecular de los dispositivos y el mundo macroscópico.

Ya por último, la luz es probablemente el estímulo más ventajoso que podemos encontrar, dado que evita prácticamente todas las desventajas mencionadas en el caso de los otros tipos posibles de fuentes energéticas. No se generan residuos, puede controlarse fácilmente gracias al uso de la instrumentación óptica actual, presenta una elevada resolución temporal y espacial, y una selección precisa de la longitud de onda empleada permite la realización de operaciones selectivas en el dispositivo, independientemente de la complejidad de su entorno. Los impulsos iniciales de carácter fotoquímico pueden usarse simultáneamente tanto para generar el funcionamiento de la máquina como para controlar el movimiento de la misma, lo que facilita tanto el diseño como la función en sí del dispositivo.

#### Diseño de interruptores moleculares biomiméticos

Como ya hemos comentado, el diseño de nuevas máquinas moleculares artificiales puede tomar como punto de partida e inspiración algunas de los variados ejemplos de maquinaria molecular que la naturaleza nos ofrece. En este apartado vamos a revisar parte del trabajo desarrollado a partir del cromóforo de las opsinas, uno de los mejores ejemplos presentes en la naturaleza de maquinaria molecular eficiente.

#### Características principales y diseño

El diseño y la preparación de interruptores moleculares (por ejemplo, moléculas que puedan "interconvertirse" entre dos o más estados) basados en isomerizaciones fotoquímicas E/Z constituyen un atractivo objetivo para conseguir buenos materiales para la nanotecnología (Figura 6).<sup>25</sup>

Interruptores basados en la fotoisomerización de distintos cromóforos ya han sido usados para controlar el acomplejamiento entre iones, <sup>29</sup> propiedades electrónicas, <sup>30</sup> y catálisis, <sup>31</sup> o para activar el plegamiento o la apertura de cadenas de oligopéptidos. <sup>32</sup> Aunque los resultados obtenidos hasta el momento son prometedores, todavía están lejos de las propiedades que presentan análogos naturales como la isomerización *E/Z* del cromóforo presente en la proteína rodopsina (Rh) en el proceso de la visión. <sup>33</sup>

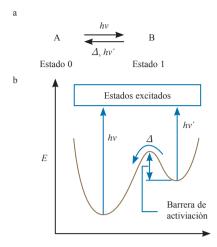


Figura 6. Esquema general de un interruptor molecular fotoquímico.

Como ya hemos comentado, la alta eficiencia del PSB11 supone que estos compuestos sean modelos ideales para el desarrollo de interruptores moleculares. Con esta idea en mente, en 2004 fue diseñada y sintetizada una nueva familia de interruptores moleculares basados en el retinal.<sup>34</sup> Estos sistemas incluyen en su estructura una pirrolina *N*-alquilada (NAP) (Figura 7).

Los NAPs y otros derivados análogos pueden actuar como interruptores moleculares que incorporan dentro del esqueleto de alquenos sustituidos una base de Schiff protonada (o alquilada), la cual puede reproducir las dinámicas de isomerización del PSB11 en la rodopsina. Una de las características principales de estos compuestos es la cuaternización del átomo de nitrógeno, buscando así una similitud al cromóforo del retinal *in vivo*. Sin embargo, uno de los grandes problemas de estos interruptores es su bajo rendimiento cuántico (6 x 10<sup>-3</sup>), ya que gran parte de la energía suministrada no es usada en el proceso de fotoisomerización del doble enlace central, sino en otros enlaces diferentes. Por regla general, un interruptor debe optimizar sus características para utilizar toda la luz suministrada en el movimiento mecánico deseado.

Figura 7. Interruptores moleculares tipo NAP.

#### Diseños mejorados

Para tratar de mejorar las propiedades de la primera generación de interruptores basados en el PSB11, se sintetizó una nueva familia de compuestos con la subestructura de fluorenpirrolina N-alquilada (NAFP). Ahora la isomerización únicamente sucede en el doble enlace central, y además el sistema  $\pi$  conjugado permite la absorción en el visible (Figura 8). 35

Figura 8. Interruptores moleculares tipo NAFP.

Figura 9. Interruptores moleculares tipo NAIP.

Una de las ventajas del uso de NAFPs, es que se logra un desplazamiento en el máximo de absorción hacia el rojo de más de 50 nm con respecto al de los NAPs. Esto implica que en este caso la isomerización se consigue fácilmente con el uso de luz visible.

Un grupo diferente de interruptores con un sistema de indaniliden-pirrolina *N*-alquilada (NAIP), también ha sido sintetizado.<sup>36</sup> Estos compuestos presentan en disolución propiedades semejantes al PSB11 dentro de la rodopsina (Figura 9).

Todos estos compuestos (NAPs, NAFPs y NAIPs) muestran características que los hacen competitivos con los populares azobencenos. Por ejemplo, la activación puede ser producida usando luz visible (NAFPs), la longitud del sistema indano-pirrolina es menor, lo que los hace fácilmente integrables en un sistema biológico (por ejemplo en una cadena peptídica), y todos ellos presentan buenas propiedades fotoquímicas y mecánicas que los hacen buenos candidatos para actuar como interruptores moleculares fotoactivados.

#### **Propiedades**

Como se ha visto, los interruptores basados en el retinal pueden replicar la dinámica de isomerización del PSB11 en la rodopsina. Esta proteína muestra un tiempo de vida medio del estado excitado  $S_1$  de 150 fs y un único fotoproducto primario.<sup>37</sup> Esta escala de tiempos ultrarrápida sugiere que la isomerización ocurre sin intermedios a lo largo del camino de reacción. En un interruptor eficiente, el camino de reacción desde el estado excitado sucede sin nin-

98 Diego Sampedro *et al.* 

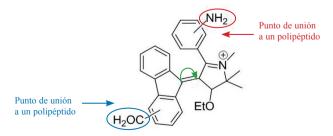
gún intermedio, y desde el estado excitado, rápidamente se relaja hacia el fotoproducto (Figura 6). De la misma manera los derivados NAIPs han mostrado<sup>38</sup> ser compuestos fotocrómicos que completan su ciclo Z/E en picosegundos, unos órdenes de magnitud más veloces que los más rápidos biarilidenos ( $\approx$ 6 milisegundos para medio ciclo).<sup>39</sup> Esto está de acuerdo con un camino de reacción sin intermedios, tal y como sucede en el retinal *in vivo*. Además estos compuestos muestran elevadas barreras térmicas de interconversión (>40 kcal/mol) que impiden que el cambio de las formas Z/E suceda a temperatura ambiente.

Una clara mejora de este tipo de compuestos frente a aquellos basados en el azobenceno, es la elevada eficiencia en la fotorreacción. Como ya se comentado, la fotoisomerización del cromóforo 11-*cis*-retinal *in vivo* se da con un 0,67 de rendimiento cuántico. <sup>19</sup> Este valor es claramente superior al de 0,25 medido para el mismo cromóforo en disolución de etanol, <sup>40</sup> y también superior al de 0,39 medido para la fotoisomerización del azobenceno. <sup>41</sup> De hecho, los valores de rendimiento cuántico medidos para los interruptores tipo NAFP (≈0,5), <sup>35</sup> son mucho más cercanos al del retinal *in vivo*, lo que está en concordancia con un camino de reacción sin intermedios.

Uno de las principales características de los NAFPs es que presentan el máximo de absorción en la región del visible. Más específicamente, muestran el máximo a 400 nm (desplazado hacia el rojo con respecto a sus homólogos NAPs). Esta propiedad es debida al hecho de sustituir la unidad de pirrolina en los NAPs, por estructuras con un sistema  $\pi$  extendido. Esto constituye una clara mejora sobre resultados previos y convierte a los interruptores tipo NAFP basados en el retinal en candidatos interesantes para aplicaciones tecnológicas. Además, estos compuestos muestran una elevada estabilidad tanto térmica como fotoquímica, lo que permite su empleo en un número elevado de ciclos.

#### **Aplicaciones**

Interruptores moleculares basados en la isomerización fotoquímica E/Z ya han sido empleados en distintos contextos para convertir la energía luminosa en movimiento mecánico a nivel molecular. En prácticamente todas las aplicaciones, el movimiento inducido resulta en un cambio conformacional permanente o transitorio de una parte de la molécula. En principio, cualquier propiedad relacionada con la estructura de los compuestos puede ser controlada o modificada mediante el uso de interruptores moleculares a través de su unión a estructuras más complejas. Por ejemplo, se ha



**Figura 10.** Uso de interruptores tipo NAFP para la fotomodulación de proteínas.

estudiado recientemente la modulación de la conformación y función de biomoléculas,<sup>43</sup> el plegamiento de proteínas,<sup>44</sup> marcaje de células,<sup>45</sup> y adhesión celular<sup>46</sup> con interruptores fotocrómicos.<sup>47</sup> La incorporación de estos interruptores en sistemas más complejos se debe realizar a través de uniones químicas (Figura 10).

De esta manera, los interruptores fotoquímicos basados en estos sistemas pueden ser utilizados para activar y desactivar un compuesto biológico, incluso pueden ser válidos como instrumento de diagnóstico para estudiar sistemas complejos vivos usando la luz. De hecho, existe una multitud de biomoléculas que pueden ser modificadas en cierta forma gracias a la luz, lo cual abre fascinantes nuevas aplicaciones en la biología y la medicina. El uso potencial de esta estrategia ya ha sido demostrado y se ha usado para controlar procesos fisiológicos en organismos vivos<sup>48</sup> para activar o modificar expresiones de enzimas o para regular su actividad biológica. Los cambios estructurales rápidos pueden incluso ser inducidos en pequeñas biomoléculas lo que permite estudios directos experimentales sobre los procesos iniciales en el plegamiento de proteínas.<sup>49</sup>

#### **Conclusiones**

En este artículo hemos revisado algunas máquinas moleculares naturales en las cuáles nos podemos inspirar para diseñar nuestros propios modelos artificiales. Mejorar el trabajo de la naturaleza es una ardua tarea y queda mucho camino por delante. Una cuidadosa exploración de la maquinaria molecular natural nos permitirá no sólo obtener información de cómo diseñar dispositivos moleculares eficientes, sino que también nos ayudará a entender como estos sistemas trabajan, sus puntos fuertes y sus puntos débiles. En la naturaleza, la apariencia o estructura de cualquier maquina molecular está leios de ser importante. Cualquier cambio estructural responde a la necesidad de un organismo. La "bioinspiración" nos ayudará a mejorar rápidamente nuestra nanomaquinaría, el diseño y la construcción de nuevos sistemas y máquinas moleculares, pero también a entender el funcionamiento de fascinantes ejemplos de ingeniería naturales. Aunque las aplicaciones de sistemas basados en el retinal y otros derivados requieren aún mucho esfuerzo, los resultados obtenidos hasta ahora permiten ser optimistas. El movimiento controlado de forma unidireccional a lo largo de una trayectoria, el uso de motores moleculares como transportadores de moléculas, o la construcción de máquinas y dispositivos que puedan actuar de forma simultánea desarrollando varias funciones, son sólo unas pocas de las tareas que pueden preverse en un futuro para este tipo de sistemas en un futuro más o menos cercano. Es evidente que este campo está aún en su infancia y que ofrece, por tanto, multitud de oportunidades para el descubrimiento.

#### **Agradecimientos**

Los autores agradecen al MICINN, la Comunidad Autónoma de La Rioja y la Universidad de La Rioja su apoyo. M. B. L. y L. R. C. agradecen al MEC y a la CAR por sus becas.

#### Bibliografía

- \* Este artículo es una adaptación de un capítulo escrito por los autores para la obra Advances in Biomimetics (A. George, Ed., InTech, abril 2011).
- 1. P. Ball, Nature 2001, 409, 413-416.
- D. Kaplan, W. W. Adams, Silk Polym., ACS Symp. Ser. 1994, 544, 2–16.
- 3. I. Willner, Science 2002, 298, 2407-2408.
- 4. M. Sarikaya, I. A. Aksay, *Biomimetics: Design and Processing of Materials*, American Institute of Physics, College Park, **1993**.
- 5. S. Mann, Biomimetic Materials Chemistry, VCH, New York, 1996.
- (a) S. Subramanian, R. Henderson, *Nature* 2000, 406, 653–657.
   (b) W. Kühlbrandt *Nature* 2000, 406, 569–570.
- A. D. Metha, M. Rief, J. A. Spudich, D. A. Smith, R. M. Simmons, Science 1999, 283, 1689–1695.
- (a) H. Noji, R. Yasuda, M. Yoshida, K. Kinoshita Jr., *Nature* 1997, 386, 299–302.
   (b) R. Yasuda, H. Noji, K. Kinoshita Jr., M. Yoshida, *Cell* 1998, 93, 1117–1124.
- (a) G. A. Ozin, A. C. Arsenault, Nanochemistry. A Chemical Approach to Nanomaterials, RCS publishing, Cambridge, UK, 2005.
   (b) D. S. Goodsell, Our Molecular Nature: The Body's Motors, Machines, and Messages, Copernicus, New York, 1996.
   (c) R. D. Vale, R. A. Milligan, Science 2000, 288, 88–95.
   (d) J. Howard, Mechanics of Motor Proteins and Cytoskeleton, Sindauer Associates, Sunderland, 2001.
   (e) E. Frey Chem. Phys. Chem. 2002, 3, 270–275.
- (a) S. M. Block, Cell 1998, 93, 5–8. (b) L. Limberis, R. J. Stewart, Nanotechnology 2000, 11, 47–51. (c) N. Hirokawa, Science 1998, 279, 519–526. (d) L. S. B. Goldstein, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2001, 98, 6999–7003. (e) M. Schliwa, G. Woehlke, Nature 2001, 411, 424–425. (f) K. Svoboda, C. F. Schmidt, B. J. Schnapp, S. M. Block, Nature 1993, 365, 721–727. (g) D. L. Coy, M. Wagenbach, J. Howard, J. Biol. Chem. 1999, 274, 3667–3671.
- 11. J. Gelles, R. Landick, Cell 1998, 93, 13-16.
- 12. T. M. Lohman, K. Thorn, R. D. Vale, Cell 1998, 93, 9-12.
- H. Kandori, Y. Shichida, T. Yoshizawa, *Biochem. (Moscow)* 2001, 66, 1197–1209.
- 14. D. Baylor, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 1996, 93, 560-565.
- 15. D. C. Teller, T. Okada, C. A. Behnke, K. Palczewski, R. E. Stenkamp, *Biochemistry* **2001**, *40*, 7761–7772.
- 16. H. Matsumoto, T. Yoshizawa, Nature 1975, 258, 523-526.
- (a) H. G. Khorana, J. Biol. Chem. 1992, 267, 1–4. (b) K. P. Hofmann, E. J. M. Helmreich, Biochim. Biophys. Acta 1996, 1286, 285–322. (c) T. P. Sakmar, Prog. Nucleic Acid Res. Mol. Biol. 1998, 59, 1–34. (d) Y. Shichida, H. Imai, Cell. Mol. Life Sci. 1998, 54, 1299–1315.
- J. K. McBee, K. Palczewski, W. Baehr, D. R. Pepperberg, *Prog. Retin. Eye Res.* 2001, 20, 469–529.
- 19. H. J. Dartnall, Vision Res. 1967, 8, 339-358.
- G. Steinberg, J. L. Rigaud, E. N. Durantini, A. L. Moore, D. Gust, T. A. Moore, *Nature* **1998**, *392*, 479–482.
- R. K. Soong, G. D. Bachand, H. P. Neves, A. G. Olkhovets, H. G. Craighead, C. D. Montemagno, *Science* 2000, 290, 1555–1558.
- H. Hess, G. D. Bachand, V. Vogel, Chem. Eur. J. 2004, 10, 2110–2116.
- 23. R. D. Astumian, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2005, 102, 1843–1847.
- S. Chia, J. Cao, J. F. Stoddart, J. I. Zink, Angew. Chem. Int. Ed. 2001, 40, 2447–2451.
- (a) V. Balzani, M. Venturi, A. Credi, Molecular Devices and Machines. Concepts and Perspectives for the Nanoworld, Wiley– VCH, Weinheim, 2008. (b) V. Balzani, A. Credi, F. M. Raymo, J. F. Stoddart, Angew. Chem. Int. Ed. 2000, 39, 3348–3391. (c) E. R. Kay, D. A. Leigh, F. Zerbetto, Angew. Chem. Int. Ed. 2007, 46, 72–191.

- D. M. Khramov, E. L. Rosen, V. M. Lynch, C. W. Bielawsky, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2008, 47, 2267–2270.
- W. Min, B. P. English, G. Luo, B. J. Cherayil, C. Kou, X. S. Xie, Acc. Chem Res. 2005, 38, 923–931.
- A. E. Kaifer, M. Gómez-Kaifer, Supramolecular Electrochemistry, Wiley-VCH, Weiheim, 1999.
- S. Shinkai, T. Minami, Y. Kusano, O. Manabe, J. Am. Chem. Soc. 1983, 105, 1851–1856.
- B. Jousselme, P. Blanchard, N. Gallego-Planas, J. Delaunay, M. Allain, P. Richomme, E. Levillain, J. Roncali, J. Am. Chem. Soc. 2003, 125, 2888–2889.
- R. Cacciapaglia, S. D. Stefano, L. Mandolini, J. Am. Chem. Soc. 2003, 125, 2224–2227.
- (a) J. Bredenbeck, J. Helbing, A. Sieg, T. Schrader, W. Zinth, C. Renner, R. Behrendt, L. Moroder, J. Wachtveilt, P. Hamm, P. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2003, 100, 6452–6457.(b)
   M. Blanco-Lomas, S. Samanta, P. J. Campos, G. A. Woolley, D. Sampedro J. Am. Chem. Soc. 2012, 134, 6960.
- G. Moiseyev, Y. Chen, Y. Takahashi, B. X. Wu, J. X. Ma, *Proc. Natl. Acad. Sci.* USA 2005, 102, 12413–12418.
- D. Sampedro, A. Migani, A. Pepi, E. Busi, R. Basosi, L. Latterini, F. Elisei, S. Fusi, F. Ponticelli, V. Zanirato, M. Olivucci, *J. Am. Chem. Soc.* 2004, 126, 9349–9359.
- (a) L. Rivado-Casas, D. Sampedro, P. J. Campos, S. Fusi, V. Zanirato, M. Olivucci, J. Org. Chem. 2009, 74, 4666– 4674. (b) L. Rivado-Casas, P. J. Campos, D. Sampedro, Organometallics 2010, 29, 3117–3124. (c) L. Rivado-Casas, M. Blanco-Lomas, P. J. Campos, D. Sampedro, Tetrahedron 2011, 67, 7570–7574.
- F. Lumento, V. Zanirato, S. Fusi, E. Busi, L. Latterini, F. Elisei,
   A. Sinicropi, T. Andruniów, N. Ferré, R. Basosi, M. Olivucci,
   Angew. Chem. Int. Ed. 2007, 47, 414–420.
- Q. Wang, R. W. Schoenlein, L. A. Petenau, R. A. Mathies, C. V. Shnak *Science* 1994, 266, 422–424.
- A. Sinicropi, E. Martin, M. Ryasantsev, J. Helbing, J. Briand,
   D. Sharma, J. Léonard, S. Haacke, A. Canizzo, M. Chergui,
   V. Zanirato, S. Fusi, F. Santoro, R. Basosi, N. Ferré,
   M. Olivucci, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2008, 105, 17642–17647.
- J. Vicario, M. Walko, A. Meetsma, B. L. Feringa, B. L., J. Am. Chem. Soc. 2006, 128, 5127–5135.
- 40. R. S. Becker, Photochem. Photobiol. 1988, 48, 369-399.
- 41. P. Bortolus, S. Monti, J. Phys. Chem. 1979, 83, 648-652.
- J. P. Sauvage, Molecular Machines and Motors, Springer-Verlag, Berlín, London, 2001.
- T. Lougheed, V. Borisenko, T. Henning, K. Rück-Braun, G. A. Wooley, Org. Biomol. Chem. 2004, 2, 2798–2801.
- B. Fierz, H. Satzger, C. Root, P. Gilch, W. Zinth, T. Kiefhaber, T. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2007, 104, 2163–2168.
- T. Cordes, D. Weinrich, S. Kempa, K. Riesselmann, S. Herre, C. Hoppmann, K. Rück-Braun, W. Zinth, *Chem. Phys. Lett.*, 2006, 428, 167–175.
- M. Schütt, S. S. Krupka, G. Alexander, D. Milbradt, S. Deindl, E. K. Sinner, D. Oesterhelt, C. Renner, L. Moroder, L. Chem. Biol. 2003, 10, 487–490.
- 47. C. Duvage, L. Demange, Chem. Rev. 2003, 103, 2475-2532.
- S. Szobata, P. Gorosita, F. Del Bene, C. Wyart, D. L. Fortin, K. D. Kolstad, O. Tulythan, M. Volgraf, R. Numano, H. L. Aaron, E. K. Scoot, R. H. Kramer, J. Flannery, H. Baier, D. Trauner, E. Isacoff, *Neuron* 2007, *54*, 535–545.
- T. E. Schrader, W. J. Schreier, T. Cordes, F. O. Koller, G. Babitzi, R. Denschlag, C. Renner, S. L. Dong, M. Löweneck, L. Moroder, P. Tavan, W. Zinth, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2007, 104, 15729–15734.

# Las moléculas de agua, la química y la vida

#### Julio Delgado-Martín

Resumen: El contacto de las moléculas de agua con superficies no-polares es común en sistemas biológicos y afecta a la evolución de procesos tales como el plegamiento de proteínas o la difusión en poros naturales. La presencia de moléculas de agua de forma permanente en poros nonaturales bajo las condiciones que se expresan en este artículo sugiere un mecanismo de conducción de las moléculas de agua en estructuras compactas de polímeros orgánicos.

Palabras clave: Química, agua, difusión, sistemas vivos, síntesis.

Abstract: The presence of water whether in contact or nearby to non-polar surfaces is a common issue in biological systems and it plays a crucial role in various important phenomena, including the functional dynamics and thermodynamics of natural pores and the folding and function of proteins. The permanent presence of water molecules in pores under the conditions reported in this article suggests a mechanism for water conduction in structures formed by organic polymers.

Keywords: Chemistry, water, diffusion, living systems, synthesis.

#### Introducción

¡El agua es vida! Esta es una afirmación comúnmente aceptada, aunque la relación causa/efecto que vincula la molécula de agua a la vida siga siendo un objetivo de investigación pendiente de resolver.<sup>1,2</sup>

Conocer el comportamiento estructura/dinámica del agua a nivel molecular es esencial para profundizar en los entresijos de la biología y de las ciencias atmosféricas; sin embargo, la estructura del agua racionalizada por interpretación de datos, tanto teóricos como experimentales, que aportan físicos, químicos y biólogos, es un tema en constante revisión.<sup>2</sup>

A pesar de la simplicidad de la molécula, el agua forma líquidos, estructuras amorfas y sólidos muy complejos y hace que cualquier estructura constituida por agua pura, con independencia del número de moléculas que formen el agrupamiento, sea objeto de continua investigación.<sup>3</sup> La razón de ello es que las moléculas de agua se agrupan en estructuras que se desvían, según las circunstancias, del modelo único universal de simetría tetraédrica.<sup>4</sup> Este modelo es el que fija las estructuras polimorfas del estado sólido,



J. Delgado Martín

Instituto de Investigaciones Químicas US-CSIC. Av. Américo Vespucio, 49, 41092 Sevilla. C-e: jdmartin@iiq.csic.es

Recibido: 02/03/2012. Aceptado: 27/03/2012.



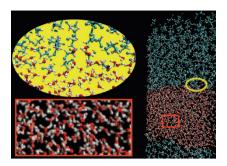




**Figura 1.** (Centro) geometría tetraédrica que estructura el agua. (Derecha) representación del agua en estado sólido. (Izquierda) simulación del agua en estado líquido.

donde cada molécula de agua se coordina a través de cuatro enlaces de hidrógeno con otras cuatro que se localizan en los vértices de un tetraedro, actuando el átomo de oxígeno de la molécula como doble aceptor de enlaces de hidrógeno y cada uno de los dos hidrógenos como dador de enlaces de hidrógeno (Figura 1).

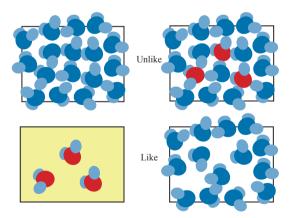
Según este modelo, la mayor densidad del agua en estado líquido supone que coexisten moléculas de agua que interfieren en la esfera de coordinación de otras sin estar conectadas entre ellas por enlaces de hidrógeno. Algunos autores consideran que esta participación es compatible con el modelo tetraédrico si se considera las altas velocidades a las que las moléculas se mueven en el estado líquido con la consiguiente ruptura y formación de nuevos enlaces entre las moléculas.<sup>5-7</sup> Otros interpretan que la coexistencia de dos modelos diferentes<sup>8,9</sup> responde mejor para el estado líquido del agua. A esta segunda opción se llega desde evidencias estructurales<sup>10</sup> y espectroscópicas<sup>11-15</sup> y son las circunstancias externas (concentración, temperatura, presión etc.) las responsables del intercambio entre los dos modelos. Uno de los modelos pone de manifiesto los fuertes enlaces de hidrógeno que cohesionan el ordenamiento tetraédrico. En el segundo modelo, los enlaces de hidrógeno no existen o son débiles y no asociados a un ordenamiento molecular determinado. Si analizamos al detalle molecular la interfase entre el agua líquida y un disolvente no polar, observamos que son las circunstancias las que hacen operativo uno u



**Figura 2.** Instantánea de un estudio de dinámica molecular entre el agua y un disolvente no polar. Se resaltan zonas de la interfase donde se observa en detalle la dispersión de las moléculas de agua entre las moléculas del disolvente y de la fase acuosa donde las moléculas de agua se rodean sólo por otras moléculas de agua.

otro modelo para el agua (Figura 2).16 Así, en el entorno de la interfase, las moléculas de agua se encuentran alejadas entre sí y rodeadas por moléculas del disolvente no-polar que mantienen entre ellas contactos deficientes debido a enlaces de hidrógeno muy débiles. Sin embargo, en la zona donde las moléculas de agua se rodean por otras moléculas de agua, la cohesión entre ellas es muy alta debido a que los contactos de enlaces de hidrógeno son muy fuertes. Lo que distingue a ambas estructuras es que los enlaces de hidrógeno son fuertes entre las moléculas de agua cuando en el modelo coexisten organizaciones supramoleculares diferentes (modelo unlike) y son inexistentes o muy débiles entre moléculas de la misma organización supra-molecular (modelo like) (Figura 3). Como resultado de la intercalación de organizaciones supramoleculares, las moléculas de agua pueden formar parte de la esfera de coordinación de otras sin necesidad de estar entre sí unidas por enlaces de hidrógeno.

En modelos abiertos, la mayor o menor concentración de moléculas de agua en la estructura será el factor que determine la naturaleza *unlike/like* del agua que la constituye. Es por tanto posible atendiendo a este factor definir escenarios donde experimentar sobre cualquiera de los dos modelos de agua. El modelo-*like* es el preferente cuando las



**Figura 3.** Representación esquemática de los modelos *unlike* y *like* de agrupamientos de moléculas de agua. En el modelo *unlike* coexisten organizaciones de simetría tetraédrica (las moléculas en rojo son centros de tetracoordinación) con otras moléculas en aparente desorden. En los modelos *like* los contactos por enlaces de hidrógeno son débiles y no presentan simetría tetraédrica.

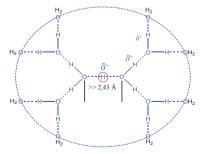
moléculas de agua se encuentran rodeadas por moléculas no polares. El agua en estado de vapor debe responder a las características de este modelo. Es corresponsable de fenómenos tales como el plegamiento de proteínas y el reconocimiento molecular, entre otros; y es causa de efectos definidos como hidrofóbico, de hidratación hidrofóbica, etc. Este tipo de agua se observa a 0,5–2,0 ppm en el espectro de <sup>1</sup>H-RMN cuando gotas de agua líquida se suspenden en un disolvente no-polar. <sup>17</sup> Los enlaces de hidrógeno no existen o son débiles y las moléculas tienen baja movilidad en una geometría que se desvía de la simetría tetraédrica. Los agregados o agrupaciones de moléculas orgánicas que denominamos compactos, resultan permeables al agua de modelo *like* por lo que no es canalizable y difunde en cualquier dirección en entornos no polares sin coste energético.

El modelo unlike se produce cuando las moléculas de agua se rodean por otras moléculas de agua. Se identifica en el espectro de <sup>1</sup>H-RMN por la señal estrecha a ~ 4,8 ppm que se observa cuando se usa D<sub>2</sub>O como disolvente. Los enlaces de hidrógeno son fuertes como consecuencia de la simetría tetraédrica, y se rompen y forman a muy alta velocidad, lo que implica movimientos moleculares muy grandes. Las moléculas de agua en el modelo unlike se conducen en canales o poros a muy altas velocidades y no pueden difundirse, sin coste energético, a través de compactos de moléculas orgánicas. Un enlace de hidrógeno muy fuerte minimiza la energía del "estado de transición" que conduce a la disociación de la molécula del agua. 18 Es el modelo anfótero del agua que desde hace más de un siglo proporciona el marco teórico donde se explica la autoionización en iones hidronio e hidróxido en bajas concentraciones por disociación espontánea del agua (Esquema 1).<sup>19</sup>

$$H_2O + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + OH^-$$

Esquema 1. Disociación espontánea del agua.

La estabilidad de las especies iónicas que por disociación se generan en el modelo *unlike* de agua responde a geometrías que se ordenan mediante enlaces de hidrógeno.<sup>20</sup> A través de cálculos mecanocuánticos se ha establecido que el ión hidronio  $H(H_2O)_n^+$  se estabiliza en agua según la estructura altamente simétrica que se dibuja en la Figura 4, con un ordenamiento centrosimétrico que permite la máxima deslocalización de la carga positiva y solvatación en una segunda esfera de coordinación con ocho moléculas de agua.<sup>21</sup>



**Figura 4.** Estructura calculada como más favorable para el ión hidronio  $H(H_2O)_n^+$  en agua líquida. La deslocalización de la carga global +1 entre todos los átomos de hidrógeno de forma radial se expresa en la figura a través del tamaño del signo  $\Delta^+$ .

Julio Delgado-Martín

#### El agua en las ciencias atmosféricas

La interpenetración de modelos altamente estructurados con organizaciones desordenadas de agua, permite asociar la estabilidad de las especies iónicas que se generan por disociación en estructuras simétricas coordinadas por enlaces de hidrógeno. Se calcula que el equilibrio de la disolución de  ${\rm CO}_2$  en agua se desplaza hacia la formación del anión bicarbonato que se estabiliza por coordinación con cuatro moléculas de agua que ocupan los vértices de un rectángulo que se unen por un enlace de hidrógeno con los oxígenos donde se deslocaliza la carga negativa del anión bicarbonato $^{22}$  (Figura 5).

**Figura 5.** Ecuación química que muestra la disolución del  $\mathrm{CO}_2$  en el agua del mar y la estructura del anión bicarbonato solvatado con cuatro moléculas de agua (en rojo). La carga global -1, distribuida por igual en los dos  $\mathrm{O}$ , se expresa en la figura a través de un signo  $\Delta$  en cada uno de ellos.

De las especies existentes en la atmósfera terrestre, el ión NO<sup>+</sup> resulta ser el catión primario más abundante en las capas altas de la atmósfera. La hidratación de este ión e inserción formal de una molécula de agua para generar la molécula neutra de ácido nitroso ocurre por la disociación espontánea del agua de solvatación y estabilización del ión hidronio resultante<sup>23</sup> (Figura 6).

$$NO^{+}(H_{2}O) + H_{2}O \rightarrow \{NO^{+}(H_{2}O)_{n+1} \rightleftarrows (HONO)H^{+}(H_{2}O)_{n}]\} \rightarrow H^{+}(H_{2}O)_{n} + HNO_{2}$$

**Figura 6.** Disociación e inserción formal del anión hidróxido en la especie iónica NO<sup>+</sup> en la atmósfera. En rojo se dibujan los intermedios que conducen a la formación de la especie neutra HNO<sub>2</sub>.

Estos dos ejemplos de disociación natural del agua ocurren sobre modelos de agua distintos y se han de explicar también de forma diferente. En el primer caso la ionización ocurre por disociación de una especie neutra, en el segundo caso implica transferencia de ionización de una especie iónica.

La solvatación del CO<sub>2</sub> tiene lugar en agua líquida (unlike) donde la disociación del agua es un proceso permitido. La solvatación de la especie iónica NO<sup>+</sup> tiene lugar en agua en estado de vapor (like) y ocurre por exaltación del carácter dipolar de la molécula de agua por esta especie iónica seguido de inserción formal de hidróxido y transferencia de protón al agua de solvatación.

Otro ejemplo natural que demuestra que la estructura del agua en los modelos like se desvía de la estructura tetracoordinada pero mantiene una ordenación estructural que depende de las condiciones ambientales en que se encuentra, es el de la formación y evolución de los copos de nieve.<sup>24</sup> La fase inicial consiste en la cristalización de una pequeña gota de agua y formación de un diminuto cristal hexagonal. El crecimiento ocurre por incorporación de moléculas de agua mediante choques con el cristal. La presión, temperatura y concentración del vapor de agua conforman en cada instante la estructura del agua que rodea el cristal y es lo que permite que el crecimiento transcurra de forma simétrica desde los vértices, donde la probabilidad de choque con las moléculas de agua es mayor. La simetría del minicristal y la uniformidad en la estructura de las moléculas de agua que en cada instante lo rodean, hacen que el crecimiento se produzca como si fuera "simétrico" (Figura 7).





Figura 7. Simetría hexagonal característica de los copos de nieve.

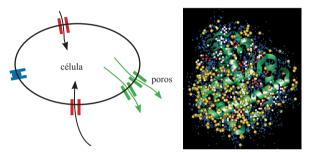
#### El agua entre la biología y la química

La participación del agua en la evolución de los fenómenos biológicos es incuestionable. Sin embargo, asociar el progreso del proceso biológico con cambios estructurales del agua es un problema de enorme complejidad. Así, por ejemplo, es perfectamente conocido que el agua juega un papel muy importante en el ensamblaje de proteínas. En cambio, los efectos que las variables estructurales del agua inducen en la agregación de proteínas son desconocidos. Tan desconocidos como los efectos que los cambios en la estructura del agua que rodea el mini cristal de agua puedan inducir en el crecimiento de un copo de nieve.

A pesar de ser ampliamente reconocida la importancia del agua en el desarrollo de los esquemas biológicos, es muy común que su participación se minimice, incluso cuando la descripción del fenómeno se hace a nivel molecular. La razón bien puede ser que los resultados que la biología determina son sólo los efectos sin atender a las causas que los producen. La química es una ciencia que relaciona causas con efectos y se sustenta en la "reversibilidad microscópica". Desde la química no es concebible describir los efectos sin la intervención de las causas que los originan, de ahí la incoherencia de relatar a nivel molecular el curso de los fenómenos biológicos utilizando el mismo lenguaje con el que la química se expresa.

Por ejemplo, la biología puede observar que en los escenarios donde las proteínas se pliegan o agregan sucede la difusión simultánea de moléculas de agua. Sin embargo, la causa que hace que estos efectos se manifiesten se explican desde conceptos de definición ambigua ("efecto hidrofóbico", "hidratación hidrofóbica", etc.) que no son comprendidos en profundidad. En consecuencia, no es posible conocer a nivel molecular un proceso biológico si no se modela e investiga como un proceso químico y definen los condicionantes cinético/termodinámico que lo delimitan. Sólo así se podrá entender con rigor la razón *causa/efecto* que concurre en el fenómeno que se observa.

La agregación de biopolímeros, el plegamiento de proteínas, la formación de bicapas lipídicas, la asociación proteína/ ligando y, en general, los fenómenos de reconocimiento molecular que determina la biología, ocurren a nivel celular y necesitan del medio acuoso (Figura 8). Son fenómenos emergentes causa/efecto que se correlacionan con los cambios en la dinámica de los agregados moleculares del agua en el interior de la célula.



**Figura 8.** (Izda.) Representación esquemática del escenario donde ocurren los procesos biológicos. El agua, especies iónicas y pequeñas moléculas pueden entrar y salir a través de los poros y canales presentes en la membrana celular. (Dcha.) Imagen de un biopolímero inespecífico rodeado por moléculas de agua. Las distintas estructuras de los agrupamientos moleculares de agua se representan por círculos de colores y tamaños diferentes.

En el proceso termodinámico que conduce a la agregación de biopolímeros debe haber correspondencia estructural con el agua que los rodea y si es reversible podrá ser representado por una ecuación que relacione la estructura y estequiometría del proceso.

Se comprueba que los iones y las moléculas de agua se transportan a través de canales y poros naturales a muy alta velocidad. <sup>26</sup> ¿Cómo compatibilizar estas altas dinámicas con las estructuras del agua del interior celular? ¿Serían las moléculas de agua canalizadas si no se movieran a tal alta velocidad?

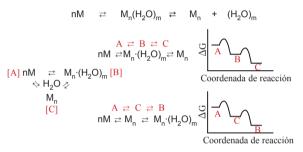
El compromiso  $(H_2O)(U) \rightleftharpoons (H_2O)(L)$ , donde (U) se refiere a *unlike* y (L) a *like*,<sup>27</sup> se establece como un balance energético en el que se compensa la ganancia en entalpía (reforzamiento de los enlaces de hidrógeno entre las moléculas de agua) y la ganancia en entropía (liberación de las moléculas de agua de restricciones configuracionales). Este compromiso es el que activa conceptos como "efecto hidrofóbico" según la consecuencia:  $(H_2O)(L) \rightleftharpoons (H_2O)(U)$  o permite identificar la "hidratación hidrofóbica" como una secuencia estequiométrica que explicita el compromiso entre el agregado molecular  $(M)_n$  y el agua atrapada por la cavidad que se genere,  $M_n(H_2O)_m(L)$ , en el siguiente proceso termodinámico (Esquema 2).

$$nM+x(H_2O)(U) \rightleftharpoons M_n(H_2O)_m(L)+(x-m)(H_2O)(U)$$

**Esquema 2.** Equilibrio termodinámico entre un agregado molecular y el água.

Durante la agregación molecular,  $(H_2O)_m(L)$  representa un número discreto de moléculas que se mantienen confinadas y son parte de la estructura molecular.<sup>28</sup>

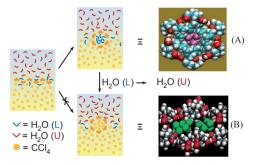
La Figura 9 muestra la reversibilidad de los equilibrios con expresión de la incertidumbre que tal análisis genera. En el proceso de agregación que se muestra en el esquema, las moléculas de agua  $(H_2O)_m$  que rellenan las cavidades pueden jugar papeles diferentes según intervengan en el ensamblaje molecular  $(A \rightleftharpoons B \rightleftharpoons C)$  o simplemente rellenen el hueco resultado de la agregación  $(A \rightleftharpoons C \rightleftharpoons B)$ . El principio de reversibilidad microscópica<sup>29</sup> resuelve esta incertidumbre y permite diseñar modelos moleculares en los que la incorporación del agua y agregación molecular son causa del mismo proceso termodinámico; esto es, priorizar  $A \rightleftharpoons B$  frente a  $A \rightleftharpoons C$ .<sup>30</sup>



**Figura 9.** Expresiones que manifiestan la incertidumbre en los equilibrios que afectan a la ocupación por agua en cavidades.

El plegamiento de moléculas modelo ordenadas en la interfase entre el agua y un disolvente no polar conduce, de acuerdo a lo que expresa el Esquema 2, a la formación de estructuras porosas con participación de las moléculas de agua de la interfase.  $^{30,31}$  Si el diámetro del poro es suficiente para albergar las moléculas del componente no polar ocurre el desplazamiento de las moléculas de agua del interior del poro a la fase acuosa,  $(H_2O)(L) \rightarrow (H_2O)(U)$ , siendo el poro ocupado por las moléculas del disolvente no polar  $^{32}$  (Figura 10).

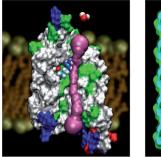
En la Figura 11, el dibujo de la izquierda se corresponde con la estructura determinada por difracción de rayos X de un



**Figura 10.** Desarrollo representativo del proceso del Esquema 2. Estructuras de difracción de rayos X de un modelo sintético de poro relleno de agua (A)<sup>31</sup> y otro relleno de tetracloruro de carbono (B).<sup>32</sup> Las moléculas de agua se dibujan en color magenta (A), las de tetracloruro de carbono en verde (B).

104 Julio Delgado-Martín

poro natural de agua (aquaporina). El dibujo de la derecha es la estructura determinada por difracción de rayos X de un poro de diseño sintetizado según el marco del proceso termodinámico que se refiere en las Figuras 9 y  $10^{.31}$  En ambos tipos de poros el diámetro es variable y de rango similar,  $4 \sim 10 \text{ Å}$ .



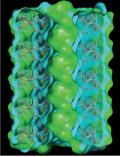


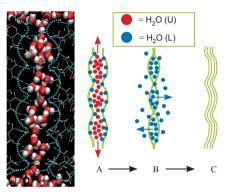
Figura 11. (Izda.) Estructura de un poro natural de agua. La cavidad del poro se dibuja en color magenta. Para su observación se elimina la sección frontal del compacto proteínico que completa el poro. (Dcha.) Estructura de un poro no natural de agua. Para su mejor observación se elimina la sección frontal del agregado molecular que define el poro. En modelo de varillas se muestra en el corte que la estructura del poro resulta de la agregación de monómeros de moléculas pequeñas.

La posibilidad de disponer de agregados de moléculas de agua en cavidades similares a la de los poros naturales permite investigar en los modelos de diseño las particularidades estructurales del agua presente en los sistemas biológicos y confirmar de forma experimental resultados sólo accesibles por cálculos teóricos.<sup>33</sup> Así, en poros de diferente diámetro pero de igual contenido de agua se comprueba que la dinámica del agua aumenta con el diámetro del poro. La razón es que en los poros de mayor diámetro (6.0–10.0 Å) las moléculas de agua sólo contactan con otras moléculas de agua por lo que es del tipo definida como H2O (U) y tienen una dinámica próxima al agua líquida. Cuando el poro es estrecho (4,0-6,5 Å) el contacto con la superficie interna del poro ralentiza la dinámica del agua que se manifiesta como H<sub>2</sub>O (L).<sup>34</sup> En agua confinada se ha determinado que los contactos con las paredes no polares de los poros hace que la dinámica del agua sea diez veces menor que cuando el contacto es exclusivo entre moléculas de agua.<sup>35</sup>

La Figura 12 esquematiza estas dos posibilidades y los dos "tipos" de agua se remarcan en colores diferentes: rojo para  ${\rm H_2O}$  (U) y azul para  ${\rm H_2O}$  (L). Esta observación explica la necesidad de que en ciertas partes de los poros naturales el diámetro sea de 10 Å o más con el fin de albergar moléculas de agua que se muevan a la alta velocidad con que se transportan a través del poro. La eliminación térmica del agua del interior en el poro modelo  $^{36}$  pone de manifiesto los dos tipos de agua y la pérdida, en primer lugar, de las moléculas asociadas a la estructura de mayor dinámica.

En poros de diámetro estrecho, el agua contenida en su interior es del tipo H<sub>2</sub>O (L), por lo que el cauce del agua se interrumpe y las moléculas se pierden lentamente por las paredes de los poros.<sup>37</sup> Este fenómeno se pone de manifiesto cuando se sintetizan poros de diámetro estrecho donde se observa que, a diferencia de los poros de mayor diámetro, el agua se pierde con el tiempo.<sup>38</sup> La Figura 12 esquematiza las propiedades que se observan en poros de síntesis de diferentes diámetros:

la transformación  $A \rightarrow B$ , conversión de  $H_2O$  (U) $\rightarrow H_2O$  (L), tiene lugar aumentado la temperatura con lo que el poro se contrae al perder parte del agua. La estructura B se puede también alcanzar por síntesis de poros de menor diámetro. La conversión térmica de A y/o B a C se manifiesta en el estado sólido como un cambio de fase sólido $\rightarrow$ sólido. Siguiendo un modelo similar se ha investigado recientemente el papel del agua en procesos de agregación de proteínas. Simulaciones de mecánica molecular han permitido establecer que por efecto del agua ocurre el ordenamiento y ensamblaje de los oligómeros y que la consiguiente pérdida del agua es la causa que define la estructura de los empaquetamientos anhidros.



**Figura 12.** La estructura de rayos X de la izquierda se corresponde con el modelo de síntesis de poro de agua cuyas propiedades se esquematizan en la derecha de la figura. El agua que se mueve libremente en el interior del poro se remarca y dibuja en modelo espacial. El monómero orgánico y el agua estructural se dibuja en modelo de varillas. Esquema de la derecha: A, Poro ancho de diámetro (6,0-10,0 Å), el agua sale y entra en la dirección del cauce del poro. B, Poro de diámetro estrecho (4,0-6,5 Å), el agua se pierde muy lentamente y de forma irreversible por las paredes del poro. C, La pérdida total del agua conduce a cadenas anhidras. Conversión térmica  $A \rightarrow B \rightarrow C$ .

#### Conclusiones y perspectivas

Una alta variedad de enfermedades neurodegenerativas se asocian con placas de amiloides que comienzan siendo proteínas solubles y terminan en agregados fibrilares insolubles. Es indudable que para un completo conocimiento de estas enfermedades es necesario descifrar los principios que gobiernan los estados de agregación de las proteínas y su dependencia con las diferentes estructuras del agua que las envuelve.<sup>40</sup> Será necesario comprender y fundamentar el proceso (H<sub>2</sub>O)  $(L) \rightarrow (H_2O)(U)$  que permite que las agregaciones del proceso biológico sigan una secuencia A→B→C similar a la mostrada en la Figura 12 para las moléculas de diseño. En otros ejemplos, son organizaciones asimétricas de moléculas de agua las que actúan transfiriendo quiralidad desde el material orgánico y conducen a la generación de estructura asimétricas de calcita en algunas especies calcáreas del fitoplancton marino. 41 El estado de vida latente de las esporas se conserva por millones de años aún cuando la dinámica del agua contenida en su interior no llega a perderse, lo que exige pensar en restricciones conformacionales sufridos por enzimas relevantes de los procesos metabólicos. 42 Estos son ejemplos que demuestran que no es posible comprender la biología a nivel químicomolecular si se obvia el papel del agua en el escenario donde ocurre el proceso

biológico. Hacer buena en biología la observación del premio Nóbel de Física Prof. Richard Feynman: "What I cannot create, I do not understand," significa que, a pesar de los avances conseguidos, se está lejos aún del conocimiento real de cómo una célula funciona. Estos progresos sólo vienen a demostrar que para hacer "síntesis en biología". An isiquiera eso, para simplemente considerar la biología como un "proceso sintético", es necesario profundizar más en ciencia básica y adquirir un conocimiento más profundo en la "química de la vida".

#### Agradecimientos

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento a los colaboradores e investigadores que se han interesado y hecho posible este trabajo y cuyos nombres aparecen recogidos en las correspondientes referencias de este artículo, así como a la financiación recibida en sucesivos proyectos concedidos por la Dirección General de Política Científica (MEC), Junta de Andalucía y fondos FEDER durante los últimos doce años. Quiero agradecer a dos evaluadores anónimos sus acertados comentarios.

#### Bibliografía

- D. Eisenberg, W. Kauzmann, The Structure and Properties of Water, Clarendon Press: Oxford, U.K., 1969.
- 2. P. Ball, Chem. Rev. 2008, 74-108.
- C. Johnston, N. Kastelowitz, V. Molinero, J. Chem. Phys. 2010, 133, 154516.
- R. Kumar, J. R. Schmidt, J. L. Skinner J. Chem. Phys. 2007, 126, 204107.
- 5. P. Geissler, J. Am. Chem. Soc. 2005, 127, 14930–14935.
- J. D. Smith, C. D. Cappa, K. R. Wilson, R. C. Cohen, P. L. Geissler, R. J. Saykally, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2005, 102, 14171–14174.
- 7. A. K. Soper, Mol. Phys. 2008, 106, 2053-2076.
- 8. E. B. Moore, V. Molinero, J. Chem. Phys. 2009, 130, 244505.
- 9. A. K. Soper, J. Phys. Chem. B 2011, 115, 14014-14022.
- G. W. Robinson, C. H. Cho, J. Urquidi, J. Chem. Phys. 1999, 111, 698–702.
- 11. G. Walrafen, J. Chem. Phys. 1968, 48, 244-251.
- S. Woutersen, U. Emmerichs, H. J. Bakker, Science 1997, 278, 658–660.
- 13. F. Rull, Pure. Appl. Chem. 2002, 74, 1859-1870.
- P. Wernet, D. Nordlund, U. Bergmann, M. Cavalleri, M. Odelius,
   H. Ogasawara, L. Naslund, T. Hirsch, L. Ojamae, P. Glatzel,
   L. Pettersson, A. Nilsson, Science, 2004, 304, 995–999.
- C. Huang, K. T. Wikfeldt, T. Tokushima, D. Nordlund, Y. Harada, U. Bergmann, M. Niebuhr, T. M. Weiss, Y. Horikawa, M. Leetmaa, M. P. L. Jungberg, O. Takahashi, A. Lenz, L. Ojamäe, A. P. Lyubartsev, S. Shin, L. G. M. Pettersson, A. Nilsson, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2009, *162*, 15214–15218.
- F. G. Moore, G. L. Richmond, Acc. Chem. Res. 2008, 41, 739–748.
- Por ejemplo, el valor del desplazamiento químico para moléculas de H<sub>2</sub>O diluidas en tetracloruro de carbono es de 0,59 ppm:
   J. A. Goodnough, L. Goodrich, T. C. Farrar, *J. Phys. Chem. A* 2007, 111, 6146–6150.
- 18. El enlace de hidrógeno se corresponde con "la estructura del estado de transición" que conduce a la autoionización de la molécula de agua en iones hidrónio e hidróxido.

- P. L. Geissler, C. Dellago, D. Chandler, J. Hutter, M. Parrinello, Science 2001, 291, 2121–2124.
- A. Hassanali, M. K. Prakash, M. Parrinello, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2011, 108, 20410–20415.
- E. S. Stoyanov, I. V. Stoyanova, C. A. Reed, J. Am. Chem. Soc. 2010, 132, 1484–1485.
- E. Garand, T. Wende, D. J. Goebbert, R. Bergmann, G. Meijer, D. M. Neumark, K. R. Asmis, *J. Am. Chem. Soc.* 2010, *132*, 849–856.
- R. A. Relph, T. L. Guasco, B. M. Elliot, M. Z. Kamrath, A. B. McCoy, R. P. Steele, D. P. Scofield, K. D. Jordan, A. A. Viggiano, E. E. Ferguson, M. A. Johnson, *Science* 2010, 327, 308–312.
- 24. K. G. Libbrecht, Rep. Prog. Phys. 2005, 68, 855-895.
- 25. K. Dill, Biochemistry 1990, 29, 7133-7155.
- 26. P. Agre, Angew. Chem. Int. Ed. 2004, 43, 4278-4290.
- 27. En biología es preferible definir como agua *unlike* (U) en lugar de "agua con características de agua líquida" y agua *like* (L) en lugar de características de agua en "estado de vapor"; esto es, sin hacer referencia a conceptos aplicables sólo al mundo macroscópico.
- 28. Esta aproximación permite simplificar el "efecto hidrofóbico", "hidratación hidrofóbica" y, en general, los procesos que ocurren por cambios estructurales en las moléculas de agua en ecuaciones químicas que así lo expresen.
- 29. En un sistema en equilibrio, la "coordenada de reacción" que conduce de una a otra situación del equilibrio ha de ser en cada detalle idéntica con independencia de la dirección que consideremos. Este análisis permite la aproximación a la "estructura del estado de transición" en una transformación química, o al concepto de "análisis retrosintético" cuando nos referimos a la dirección antitética de una secuencia de pasos de síntésis.
- H. Carrasco, C. Foces-Foces, C. Pérez, M. L. Rodríguez,
   J. D. Martín, J. Am. Chem. Soc. 2001, 123, 11970–11981.
- M. Febles, N. Pérez-Hernández, C. Pérez, M. L. Rodríguez, C. Foces Foces, M. V. Roux, E. Q. Morales, G. Buntkowsky, H. H. Limbach, J. D. Martín, J. Am. Chem. Soc. 2006, 218, 10008–10009.
- M. Febles, C. Pérez, C. Foces-Foces, M. L. Rodríguez, N. Pérez Hernández, E. Q. Morales, J. D. Martín, *Org. Lett.* 2004, 6, 877–880.
- 33. L. Xu, V. Molinero, J. Phys. Chem. B 2011, 115, 14210-14216.
- N. Pérez-Hernández, T. Q. Luong, C. Pérez, J. D. Martín, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2010, 12, 6928–6932.
- T. Yamada, R. Yonamine, T. Yamada, H. Kitagawa, M. Tyagi, M. Nagao, O. Yamamuro, *J. Phys. Chem. B* 2011, *115*, 13563–13569.
- N. Pérez-Hernández, E. H. L. Falcao, C. Pérez, D. Fort,
   J. D. Martín, J. Eckert, J. Phys. Chem. B 2010, 114, 5694–5699.
- N. Pérez-Hernández, M. Febles, C. Pérez, J. Spandl, J. D. Martín, H. H. Limbach, *J. Phys. Chem. C* 2011, *115*, 9393–940.
- N. Pérez-Hernández, T. Q. Luong, M. Febles, C. Marco, H. H. Limbach, M. Havenith, C. Pérez, M. V. Roux, R. Pérez, J. D. Martín, J. Phys. Chem. C 2012, 116, 9616–9630.
- D. Thirumalai, G. Reddy, J. E. Straub, Acc. Chem. Soc. 2012, 45, 83–92.
- G. M. Shankar, S. Li, T. H. Mehta, A. García-Muñoz, N. E. Shepardson, I. Smith, F. M. Brett, M. A. Farrel, M. J. Rowan, C. A. Lemere, C. M. Regan, D. M. Walsh, B. L. Sabatini, D. J. Selkoe, *Nat. Med.* 2008, *14*, 837–842.
- 41. L. Addadi, R. W. Gurney, Nature 2001, 411, 753-755.
- E. P. Sunde, P. Setlow, L. Hederstedt, B. Halle, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2009, 106, 19334–19339.
- C. P. Barnes, D. Silk, X. Sheng, M. P. H. Stumpf, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2011, 108, 15190–15195.

# Aprendiendo de la naturaleza: reacciones en cascada en síntesis

Jorge Otero, Juan R. Granja

Resumen: Los terpenos constituyen una de las clases más vasta y diversa de productos naturales, con más de 55.000 compuestos aislados. Las rutas biosintéticas involucradas en su formación constan de dos aspectos fundamentales: una policiclación en cascada para generar el sistema carbocíclico seguido de sucesivas etapas de oxidación. En esta revisión se ofrece una visión general de las ventajas que ofrecen las reacciones en cascada para la síntesis total de terpenoides con complejas arquitecturas moleculares, así como el potencial sintético de las insaturaciones carbono-carbono en los procesos dominó.

Palabras clave: Síntesis total, terpenos, cascada, eninos, metales.

Abstract: Terpenes are one of the most abundant class of natural products, with over 55.000 compounds isolated. Two fundamental aspects must be considered in the biosynthetic routes involved in their training. On one hand, a cascade polycyclization reaction, to generate the polycyclic skeleton followed by, successives steps of oxidation and/or derivatization. This review gives an overview of the advantages offered by cascade reactions toward total synthesis of terpenoids with complex molecular architectures, as well as synthetic potential of insaturation in domino processes.

Keywords: Total synthesis, terpenes, cascade, envnes, metals.

#### Introducción

A lo largo de la evolución de nuestro planeta, la naturaleza ha sido capaz de crear multitud de compuestos, caracterizados por poseer, en no pocas ocasiones, estructuras altamente complejas, con diversos grupos funcionales y estereoquímicas definidas. La química orgánica, en general, y la química orgánica sintética, en particular, ha centrado su atención durante muchos años en los productos naturales, debido al interés social que despiertan por su amplio abanico de aplicaciones, sobre todo en el campo de la medicina y la biología. <sup>1</sup> Sin embargo, la síntesis total, pese a los éxitos logrados hasta la fecha, todavía no ha alcanzado el nivel de perfección de la naturaleza. Si se observa el progreso de las metodologías empleadas en la obtención de los productos naturales,<sup>2</sup> se comprueba un empleo frecuente de grupos protectores, y de transformaciones químicas que requieren de una purificación en cada una de las etapas sintéticas.3 Ambos factores, unidos a un número relativamente grande de pasos sintéticos, contribuyen a disminuir su eficiencia, incrementándose los residuos obtenidos y reduciéndose,





J. Otero

J. R. Granja

Dpto. de Química Orgánica y Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CIQUS).

C/ Jenaro de la Fuente s/n. 15782. Campus Vida.

Universidade de Santiago de Compostela.

C-e: juanr.granja@usc.es

Recibido: 24/03/2012. Aceptado: 03/05/2012.

en muchos casos de forma drástica, el rendimiento del proceso global. El empleo de reacciones dominó o en cascada es importante porque ayuda a minimizar dichos inconvenientes, ya que se reducen tanto el número de etapas sintéticas como el de grupos protectores empleados en la obtención de compuestos con una estructura molecular compleja.<sup>4</sup>

#### Reacciones en cascada, ¿por qué?

#### La naturaleza, experta en síntesis

La "síntesis ideal" de un compuesto dado debería llevarse a cabo en una sola operación sintética con un rendimiento del 100%, a partir de sustancias de partida asequibles y sin generar residuos. Además, debería ser sencilla, segura, económicamente aceptable y respetuosa con el medio ambiente. Se trata, obviamente, de una visión idealista de la síntesis perfecta, y pese a que la síntesis total de productos naturales y de otros compuestos biológicamente activos ha alcanzado un elevado nivel de sofisticación, todavía estamos lejos de llegar a ese grado ideal de perfección. Pero, ¿existen hoy en día rutas sintéticas que cumplan todos los aspectos de dicha "idealidad"? La respuesta es, sin duda, complicada. Sin embargo, es un hecho real que la naturaleza produce sustancias con estructuras muy complejas y variadas, y que lo hace utilizando de forma viable los recursos disponibles a su alcance.

#### **Terpenos**

Este tipo de sustancias es una de las clases más importantes de los productos naturales tanto por su abundancia como por la gran riqueza estructural que poseen. Son además un claro ejemplo de la eficiencia de la naturaleza en la obtención de compuestos químicos, ya que por oligomerización enzimática de unidades metabólicas de isopreno (2-metil-1,3-butadieno),<sup>7</sup> y concretamente a través del pirofosfato de isopentilo y el pirofosfato de dimetilalilo, se generan compuestos tan complejos como los carotenoides, las hormonas esteroideas y ciertos tipos de sustancias anticancerosas. Entre

éstas están terpenos cíclicos como el paclitaxel (Taxol), cuyas biosíntesis implican una primera etapa de ciclación en cascada catalizada por una enzima ciclasa a partir de un oligómero formal de isopreno. A este proceso dominó le suele seguir una serie sucesiva de etapas de oxidación que, en función del número y regioquímica, conducen a los distintos terpenos.8 Esta estrategia se rige en primera instancia por la química típica de los carbocationes, utilizándose las insaturaciones presentes en el terpeno lineal de partida para "alimentar" el proceso, de forma que el carbocatión generado en primer lugar produce un enlace covalente carbono-carbono y regenera un nuevo carbocatión, que a su vez reacciona con una nueva insaturación hasta que el proceso llegue al final y todo ello controlado por la enzima ciclasa correspondiente. De este modo, mediante una reacción en cascada, se construve, por ejemplo, el esqueleto policarbocíclico 6-8-6 de los taxanos en una sola operación sintética y a partir de una sustancia lineal con un número reducido de centros reactivos (Esquema 1).

**Esquema 1.** Esquema simplificado de la biosíntesis del Taxol, terpeno perteneciente a la familia de los taxanos.

#### Reacciones dominó

En 1993 Tietze definió la reacción dominó<sup>9</sup> como aquella en la que se producen dos o más transformaciones químicas de forma consecutiva, sin que ello suponga la adición de más reactivos o catalizadores. Es decir, aquella en la que la formación de una especie inicial dé lugar a las sucesivas transformaciones que conducen al producto. Además de "dominó", otros términos, como "tándem" o "cascada" se utilizan de forma indistinta en la bibliografía para referirse a este tipo de procesos. Pese a que las diferencias entre ellos no están completamente establecidas, las reflexiones existentes apuntan a los términos "dominó" y "cascada", como los más adecuados y, por tanto, ambos términos se utilizan indistintamente a lo largo de esta revisión.

La economía de etapas y de átomos, 10 así como el ahorro de tiempo, trabajo, reactivos y una menor generación de residuos son aspectos que caracterizan a las reacciones dominó o en cascada. Dichos procesos pueden considerarse incluso como afines a las directrices marcadas por la "quí-

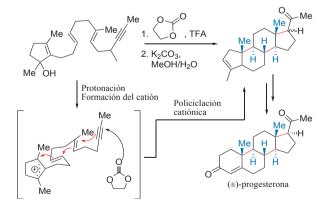
mica verde", <sup>11</sup> debido a que en una única transformación se generan varios enlaces, lo que implica el empleo de un único disolvente de reacción, así como de una sola elaboración y purificación. Todas estas consideraciones las hacen muy atractivas, no solo desde el punto de vista químico, sino también del socioeconómico porque entrañan una minimización de los contaminantes generados.

Desde el punto de vista químico, las reacciones en cascada contribuyen enormemente a la ciencia y al "arte" de la síntesis total, no solo por su mayor eficiencia práctica, sino también porque aumenta la elegancia del plan sintético. Dados estos argumentos, se podría suponer que se trata de un fenómeno nuevo, pero los procesos dominó ya atrajeron la atención de los químicos orgánicos desde los años en los que la síntesis total se estaba formando como disciplina. Robinson aportó quizás el trabajo base de este campo en 1917, con la síntesis de la tropinona basada en dos reacciones de Mannich sucesivas y que implicaba la formación de dos ciclos y cuatro nuevos enlaces (Esquema 2).<sup>12</sup>

$$\begin{array}{c} O \\ O \\ H \\ O \\ O \\ O \end{array} = O \begin{array}{c} Me \\ Me \\ H_2O, \ rt \\ \end{array} \begin{array}{c} Me \\ N \\ CO_2H \\ \hline NaOH \\ \end{array} \begin{array}{c} Me \\ N \\ \hline NaOH \\ \end{array} \begin{array}{c} O \\ CO_2H \\ \hline NaOH \\ \end{array}$$

Esquema 2. Síntesis de la tropinona llevado a cabo por Robinson.

Años más tarde se produjo la aportación más intuitiva de los procesos dominó cuando en 1971, Johnson y colaboradores dieron a conocer la síntesis de la progesterona, <sup>13</sup> que obtuvieron mediante un proceso dominó basado en intermediarios carbocatiónicos, con lo que se hacen patentes las ventajas de este tipo de metodología sintética (Esquema 3). En una única etapa, se consigue la formación del esqueleto tetracíclico de la progesterona mediante un procedimiento experimental sencillo, y lo más importante, con estereoquímica definida (se generan seis nuevos estereocentros, de los cuales, solo uno no posee una configuración estereoquímica definida).

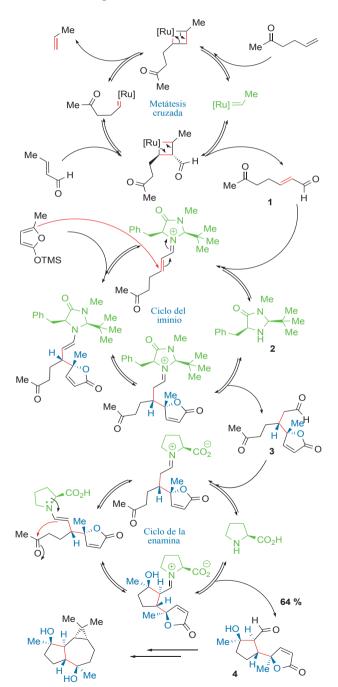


**Esquema 3.** Ciclación en cascada mediante intermedios catiónicos diseñada por Johnson para la síntesis de progesterona.

Antes de adentrarnos a ilustrar algunos de los casos más característicos de las reacciones en cascada, deben mencionarse otros ejemplos como son las transformaciones multicomponente o las *one-pot*, que presentan alguna de las características más destacadas de los procesos domi-

Juan R. Granja et al.

nó como la economía de etapas o la minimización de los residuos generados. <sup>14</sup> Un ejemplo significativo es el recientemente desarrollado por el grupo de MacMillan en la síntesis del (-)-aromadendranediol cuya etapa clave se enmarcaría en los denominados procesos consecutivos o *one-pot* (Esquema 4). <sup>15</sup> El diseño y obtención del precursor terpénico con estereocontrol en los cuatro estereocentros formados, así como la novedad de los procesos catalíticos enlazados (metátesis y organocatálisis) le confieren un gran interés metodológico.



**Esquema 4.** Propuesta mecanística del proceso *one-pot* diseñado para la síntesis del aromadendranediol por MacMillan y que requiere de la sucesiva adición de tres catalizadores diferentes.

La estrategia utilizada se basa en una secuencia de transformaciones que se inicia con una reacción de metátesis cruzada que da lugar al cetoenal 1. A continuación, se genera un ión iminio con el organocatalizador 2, que desemboca en el compuesto tricarbonílico 3 a través de una reacción tipo Michael en la que se generan dos estereocentros de forma estereoselectiva. El proceso se completa con un segundo ciclo organocatalítico, obteniéndose el dicetoalcohol 4 con dos nuevos estereocentros, mediante una reacción aldólica intramolecular. Finalmente, el intermedio 4 se transformó en el producto natural mediante una serie de reacciones, en las que el sistema bicíclico dirige la incorporación diastereoselectiva del grupo gem-dimetilo.

#### Tipos de reacciones en cascada

La familia de los terpenos, a la que pertenecen la progesterona y el taxol, <sup>16</sup> es una de las más idóneas para aplicar la metodología dominó en su síntesis, ya que suelen poseer anillos de cinco, seis, siete u ocho eslabones, <sup>17</sup> así como insaturaciones y algún tipo de grupo funcional oxigenado. Establecer una clasificación de los procesos en cascada para la preparación de los terpenos y de otros compuestos con esqueletos policarbocíclicos resulta, por tanto, complicado debido a la gran variedad estructural de los mismos. Pese a ello, se pueden distinguir de forma más o menos clara, atendiendo a la naturaleza del proceso que tiene lugar, cuatro clases de reacciones en cascada: <sup>18</sup> de tipo nucleófilo, electrófilo, radicálico y mediadas por metales de transición.

#### Reacciones en cascada de tipo nucleófilo

Se pueden incluir en este grupo a todos aquellos procesos en los que la etapa inicial implica un ataque nucleófilo. Para ilustrar este proceso se muestra en el Esquema 5 la estrategia desarrollada por Shair v colaboradores<sup>19</sup> en la que a partir de  $\beta$ -cetoésteres con un sustituyente vinílico se genera un alcóxido de magnesio mediante la adición de un reactivo vinílico de Grignard. Este alcóxido desencadena una transposición sigmatrópica [3,3], seguida de una ciclación tipo Dieckmann, conduciendo al biciclo [5.3.1], que está presente, entre otros, en los terpenos taxánicos. Los rendimientos obtenidos en este proceso dominó fueron moderados, siendo factible la utilización de diferentes grupos olefínicos en la reacción sigmatrópica, lo que pone de manifiesto el gran alcance de esta estrategia, siendo posible además la obtención estereoselectiva de sistemas policarbocíclicos con centros cuaternarios o terciarios (Esquema 5).

Esquema 5. Reacción en cascada mediante intermedios aniónicos.

#### Reacciones en cascada de tipo electrófilo

Dentro de este grupo se engloban aquellos procesos en los que el promotor es una especie catiónica. Como ejemplo de este tipo de transformaciones, además de los trabajos de Johnson ya ilustrados anteriormente, se muestra la síntesis total de la (+)- $\alpha$ -onocerina (5, Esquema 6), desarrollada por Corey y colaboradores.<sup>20</sup> En este caso, la reacción en cascada se inició con la activación de los epóxidos mediante un ácido de Lewis (MeAlCl<sub>2</sub>), seguida de la adición de un fluoruro para promover la salida del grupo trimetilsililo. Como en otros casos, la conformación reactiva, tipo silla-silla, adoptada por el intermediario que cicla, favorece la formación preferente de un estereoisómero. Esta síntesis demuestra el elevado potencial de las reacciones en cascada de este tipo para la construcción de moléculas complejas, dado que cada grupo funcional activado (epóxido) dio lugar a dos anillos de seis miembros. generándose en total cuatro anillos, cuatro enlaces carbonocarbono y seis nuevos estereocentros, todo ello en solo una operación sintética.

**Esquema 6.** Síntesis total de la (+)- $\alpha$ -onocerina desarrollada por Corey mediante una secuencia en cascada catiónica.

#### Reacciones en cascada de tipo radicálico

La síntesis biomimética desarrollada por Johnson (Esquema 3) ha inspirado múltiples estrategias novedosas y elegantes para la obtención del esqueleto de los esteroides basadas en procesos en cascada. Una de ellas es la propuesta por Pattenden y colaboradores, quienes completaron la síntesis total de la (±)-estrona utilizando un proceso radicálico en cascada en el que las distintas insaturaciones están situadas de forma precisa para favorecer un proceso dominó (Esquema 7).<sup>21</sup> La transformación se inicia con el tratamiento del yoduro 6 con un generador de radicales como el AIBN (azo-bis-isobutironitrilo) que da lugar, en una sola operación sintética, al precursor esteroídico 7. Dicha reacción comienza con la macrociclación del radical primario generado en primer lugar, formándose un radical terciario (8), de mayor estabilidad, contiguo al ciclopropilo. La liberación de la tensión del anillo ciclopropánico, la formación de un doble enlace, y la generación de un radical bencílico facilita la isomerización de 8. Finalmente, dos ciclaciones consecutivas con estereoquímica trans, seguidas de la reacción del radical secundario resultante con hidruro de *n*-tributilestaño. dan lugar al esqueleto tetracíclico de la estrona. Aunque el

**Esquema 7.** Secuencia mecanística del proceso radicalario en cascada propuesto para la preparación de la estrona.

rendimiento global del proceso es bajo (13%), se forman, en una única operación sintética, tres anillos (tres enlaces carbono-carbono) de forma diastereoselectiva con cuatro nuevos estereocentros. El bajo rendimiento global observado se puede atribuir a la dificultad de la macrociclación inicial. Probablemente, la cinética de este proceso es más lenta que la de otras reacciones secundarias, como la reacción del radical primario con hidruro de *n*-tributilestaño. De hecho, el producto mayoritario del proceso es el compuesto reducido 9, que se aisla con un rendimiento del 52%. La síntesis de la (±)-estrona se completó por oxidación del precursor 7, con el reactivo de Jones, seguida de la desprotección del grupo metoxilo del anillo aromático.

#### Reacciones en cascada con metales de transición

El desarrollo de nuevas reacciones mediadas por metales de transición es una de las áreas más punteras de la investigación química actual, y una de las que más importancia ha cobrado en los últimos años.<sup>22</sup> Junto con las reacciones organocatalíticas<sup>23</sup> y los procesos enzimáticos,<sup>24</sup> las reacciones en las que participan metales de transición aportan un amplio abanico de herramientas a la síntesis química, empleando en muchos casos cantidades catalíticas de la especie metálica. Aunque las reacciones mediadas por metales de transición no presentan una relación tan estrecha con las rutas biosintéticas como otros procesos dominó, poseen sin embargo características comunes con las estrategias biomiméticas, como la economía de etapas, de átomos o la minimización de los residuos generados.<sup>25</sup> La aparición de este tipo de procesos, con una clara inspiración en la naturaleza, pero recurriendo a herramientas que ésta no puede utilizar, ponen de manifiesto que la creatividad de los químicos permite soñar con nuevos horizontes no constreñidos a los modelos de la naturaleza.

Las reacciones de Pauson-Khand, Nicholas, carbonilación o la ciclotrimerización de alquinos ponen de manifiesto los complejos de cobalto poseen un gran interés sintético.<sup>26</sup> Dentro de las estrategias de formación de múltiples enlaces mediante la concatenación de varios procesos diferentes en una única operación sintética cabe destacar en primer lugar, Juan R. Granja et al.

la propuesta del grupo de Vollhardt en el año 1980, aplicada a la síntesis total de la estrona (Esquema 8).<sup>27</sup> Para ello, propusieron una secuencia de reacciones en cascada que comienza con la ciclotrimerización del bistrimetilsililacetileno con el enodiino 10, catalizada por un complejo de cobalto. El ciclobuteno generado experimenta una reacción de apertura electrocíclica, resultando un dieno que permite completar el proceso mediante una reacción de Diels-Alder con el alqueno presente en 11. De esta forma se generan tres de los anillos del sistema esteroidal. El bajo rendimiento alcanzado (18%), se mejoró sustancialmente con la protección del grupo carbonilo.

**Esquema 8.** Aplicación de la ciclotrimerización de alquinos catalizada por un complejo de cobalto en una reacción en cascada para la preparación de un precursor de la estrona.

Por otra parte, la repercusión de las reacciones de acoplamiento cruzado catalizadas por paladio ha sido notable en las últimas décadas, y continúa hoy en día, en desarrollo.  $^{28}$  El interés en este tipo de reacciones radica en que la formación de enlaces carbono-carbono o carbono-heteroátomo y la obtención de estereocentros terciarios o cuaternarios (obtenidos de forma enantioselectiva o diastereoselectiva) constituyen una poderosa herramienta en el diseño de rutas sintéticas. Aunque existen multitud de precedentes bibliográficos para la construcción de sistemas policíclicos basados en acoplamientos de este tipo, tal vez uno de los ejemplos más llamativos sea la reacción en cascada constituida por una secuencia de reacciones de Heck que conduce a un intermedio avanzado de la síntesis de la  $3-\alpha$ -hidroxi-9,15-ciclogiberelina A (Esquema 9).  $^{29}$ 

**Esquema 9.** Construcción del sistema policarbocíclico de la  $3-\alpha$ -hidroxi-9,15-ciclogiberelina A (representada en la parte inferior de la figura) mediante reacciones intramoleculares de Heck.

El proceso se inicia con la adición oxidante del catalizador de paladio al enlace bromo-carbono de un bromodienino, formándose un intermedio de paladio que experimenta dos ciclaciones tipo Heck intramolecular consecutivas. El intermedio de paladio (12) en vez de sufrir la esperada  $\beta$ -eliminación, evoluciona mediante una ciclación 5-exo-trig para generar el anillo central de cinco miembros. Este intermedio de paladio tiene una olefina que participa en una nueva reacción intramolecular tipo Heck para generar el anillo ciclopropánico. Cabe resaltar la versatilidad de la estrategia ya que, en la primera etapa de la secuencia de reacciones del proceso en cascada, se pueden formar anillos de seis, siete, e incluso, de ocho eslabones, controlado por la longitud de la cadena del bromodienino de partida. Es de destacar, por otro lado, cómo a partir de un compuesto completamente lineal se genera un sistema tetracíclico, consiguiéndose aumentar enormemente la complejidad estructural en una única operación sintética. En total, se formaron cuatro nuevos enlaces carbono-carbono y tres estereocentros con estereoquímica definida, y todo ello con rendimientos de moderados a buenos.

La reacción de metátesis es, tal vez, una de las transformaciones que ha experimentado un mayor desarrollo en las últimas dos décadas, pese a que su descubrimiento se efectuó en los años cincuenta cuando Anderson y Merckling describieron el primer reordenamiento de un doble enlace carbono-carbono.<sup>30</sup> Sin embargo, no fue hasta la década de los noventa, con el descubrimiento de los catalizadores de Schrock y Grubbs, cuando la química orgánica sintética comenzó a emplear este tipo de reacciones, favoreciéndose el progreso de este campo tanto en investigaciones académicas como industriales.<sup>31</sup>

La metátesis de olefinas es una reacción catalizada por un metal de transición en la cual se produce el intercambio de grupos alquilideno entre dos olefinas sustituidas (Esquema 10). Se trata de una redistribución del esqueleto carbonado en la que los dobles enlaces carbono-carbono se reordenan en presencia de complejos metal carbeno a través de una serie de procesos reversibles de formación y apertura de metalaciclobutanos.<sup>32</sup>

Esquema 10. Mecanismo de la reacción de metátesis de olefinas.

Una de las variantes de la reacción de metátesis es la ciclación de dieninos que formalmente implica una doble metátesis en cascada. El primer ejemplo de una metátesis de este tipo, encaminado a la síntesis de un producto natural, fue descrito por Grubbs en el curso de sus investigaciones sobre la metátesis intramolecular de dieninos.<sup>33</sup> Cuando dienodiinos o dienopoliinos especialmente diseñados se someten a las condiciones de la reacción de metátesis generan, parcial o totalmente, el esqueleto policarbocíclico de los esteroides (anillos ABCD, Esquema 11). El proceso comienza con una reacción de metátesis cruzada con la olefina

menos sustituida, generándose un nuevo metalcarbeno, que experimenta sucesivas reacciones de metátesis de cierre de anillo con los alquinos para finalmente, mediante una nueva reacción de metátesis, ahora con la olefina más sustituida, completar el esqueleto esteroídico con un 70% de rendimiento. Además del buen rendimiento obtenido, la reacción en cascada proporciona múltiples olefinas, susceptibles de ser posteriormente modificadas, lo que aporta una ventaja adicional a este tipo de procesos.

**Esquema 11.** Construcción del sistema policíclico de los esteroides mediante una reacción de metátesis dominó intramolecular.

Hanna y col. desarrollaron unos años más tarde una ruta para la síntesis total del guanacastepeno A, en la que queda patente la utilidad de las insaturaciones que se obtienen en el proceso de formación del sistema bicíclico.<sup>34</sup>

Para la síntesis de este terpeno, se emplea como precursor del proceso dominó el trienino 13, que tras experimentar una reacción de metátesis en cascada da lugar al trieno 14, como mezcla de epímeros, con un rendimiento del 82% (Esquema 12). La epoxidación del producto obtenido con el

Esquema 12. Síntesis del (±)-guanacastepeno A.

ácido 3-cloroperbenzoico transcurrió de forma quimioselectiva, reaccionando la olefina con mayor densidad electrónica, y estereoselectiva, estando controlada en este caso por el grupo metilo presente en el anillo ciclopenténico. Esta selectividad permite que la apertura del epóxido, a través de una reacción S<sub>N</sub>2', produzca dos diastereómeros, siendo el isómero de interés el que se forma en mayor proporción. Dicho intermedio puede convertirse en el guanacastepeno A siguiendo el procedimiento descrito en la bibliografía.<sup>35</sup>

La reacción de metátesis en cascada de dieninos también se aplicó con éxito a la construcción de compuestos con estructura taxánica, tanto naturales como de origen sintético. Un ejemplo de este último tipo son los taxoesteroides, que se caracterizan por poseer una estructura que resulta de la fusión del sistema bicíclico AB de los taxanos con el biciclo CD de los esteroides (Esquema 13).<sup>36</sup>

**Esquema 13.** Combinación de taxanos y esteroides: taxoesteroides. Sch indica la cadena lateral esteroídica.

En nuestro grupo de investigación llevamos a cabo estudios sintéticos de este tipo de compuestos, encontrando que el derivado dienínico 15 mediante una reacción de metátesis conduce, pese a la elevada tensión anular presente en el biciclo generado, al sistema taxoesteroide deseado con un excelente rendimiento (90%) (Esquema 14).

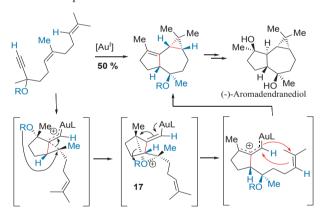
Posteriormente se extendió esta metodología a la formación del sistema taxánico empleando el dienino 16, que se construyó sobre una ciclohexenona en vez del biciclo CD esteroídico (Esquema 14). Nuevamente, el proceso de metátesis generó el dieno esperado con buen rendimiento, consolidando la validez de esta metodología para la obtención de compuestos con un esqueleto carbocíclico [5.3.1].<sup>37</sup> Los análogos taxánicos y taxoesteroideos resultantes se funcionalizaron de forma análoga a como ocurre en los sistemas

**Esquema 14.** Metátesis en cascada en la obtención de los sistemas taxoesteroidal y taxánico.

Juan R. Granja et al.

biológicos, mediante procesos de oxidación quimioselectiva y estereoselectivos, destacando una novedosa formación de sistemas 2-en-1,4-dioles mediante un proceso de apertura radicálico de diepóxidos.<sup>38</sup> En definitiva, las ciclaciones mediante metátesis en cascada constituyen, no sólo una valiosa herramienta sintética para la formación de anillos de tamaño mediano, sino que generan también sistemas poliénicos susceptibles de posteriores funcionalizaciones, aumentando la versatilidad y utilidad sintética de esta metodología.

Un último ejemplo, que ilustra la gran diversidad de los procesos asistidos por metales, es la elegante síntesis del (-)-aromandendranediol desarrollado por Echavarren en la que se utiliza un complejo de oro (Esquema 15).39 La utilización de complejos de oro ha emergido en los últimos años como una metodología importante para desarrollar procesos sintéticos versátiles de sistemas policíclicos a partir de compuestos poliinsaturados. El proceso se inicia mediante la interacción de un complejo de oro (I) con el alquino, seguida de la formación del anillo de cinco miembros del sistema terpénico. A continuación se produce un ataque del grupo alcóxido (OR) sobre la posición catiónica alílica respecto al centro metálico, que conduce al intermedio 17. El reordenamiento de este intermedio genera un nuevo sistema  $\pi$  deslocalizado en torno al centro metálico, que finalmente da lugar a una ciclopropanación intramolecular con el alqueno de la cadena lateral con lo que se culmina el proceso. Globalmente, se forman cuatro nuevos enlaces carbono-carbono y cuatro estereocentros cuyo control viene dirigido por el centro cuaternario presente en la sustancia de partida.



**Esquema 15.** Reacción en cascada con complejos de oro en la que se genera el esqueleto carbocíclico del (-)-aromandendranediol.

#### **Conclusiones**

A lo largo de millones de años de selección y evolución, la naturaleza ha desarrollado estrategias sintéticas altamente eficientes y selectivas a partir de sustratos insaturados sencillos para la preparación de una gran variedad de productos naturales como los terpenos. Los químicos se vienen inspirando en estos procesos naturales para poner a punto métodos sintéticos que permiten no sólo la preparación de productos naturales, sino también de una gran diversidad de moléculas no naturales para su utilización en medicina, biología y otros muchos ámbitos de nuestra vida. A pesar de que aún

queda mucho camino por recorrer para que los procesos químicos alcancen la eficiencia de los biológicos, es cierto también que en muchas ocasiones las metodologías químicas han superado las naturales de las que se ha inspirado. Un ejemplo claro lo tenemos en los procesos en cascada. En los primeros estudios se desarrollaron estrategias y plantearon objetivos similares a los encontrados en los seres vivos, pero en los últimos años han surgido novedosas estrategias utilizando herramientas no presentes en los procesos biológicos, siendo de destacar las que utilizan metales de transición, que permiten generar además compuestos con arquitecturas moleculares novedosas. El énfasis e interés mostrado a lo largo de estos años por las reacciones en cascada se debe a su economía de etapas y de átomos, al ahorro de tiempo y de reactivos. así como a la reducción de los residuos que se generan. Todos estos aspectos permiten asegurar que en los próximos años seguiremos asistiendo al desarrollo de nuevos procesos de este tipo, mucho más eficientes y creativos.

#### **Agradecimientos**

J.O.F. agradece al Ministerio de Educación, Cultura y Deporte la beca de Formación del Profesorado Universitario (F.P.U.).

#### Bibliografía

- K. C. Nicolaou, T. Montagnon, Molecules that Changed the World: A Brief History of the Art and Science of Synthesis and its Impact on Society, Wiley-VCH, 2008.
- a) K. C. Nicolaou, E. J. Sorensen, Classics in Total Synthesis, Wiley-VCH, 1995.
   b) K. C. Nicolaou, S. A. Snyder, Classics in Total Synthesis II, Wiley-VCH, 2003.
   c) K. C. Nicolaou, J. S. Chen, Classics in Total Synthesis III, Wiley-VCH, 2011.
- 3. A. M. Walji, D. W. C. MacMillan, Syn. Lett. 2007, 1477-1489.
- a) K. C. Nicolaou, D. J. Edmonds, P. G. Bulger, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2006, 45, 7134–7186. b) H. M. L. Davies, E. J. Sorensen, *Chem. Soc. Rev.* 2009, 38, 2981–2982. c) K. C. Nicolaou, J. S. Chen, *Chem. Soc. Rev.* 2009, 38, 2993–3009.
- 5. P. A. Wender, B. L. Miller, Nature 2009, 460, 197-201.
- 6. R. A. Yoder, J. N. Johnston, Chem. Rev. 2005, 105, 4730–4756.
- a) L. Ruzicka, *Experentia* 1953, 9, 357–367. b) A. Eschenmoser,
   D. Arigoni, *Helv. Chim. Acta* 2005, 88, 3011–3050. c) F. Y. Lin,
   E. Oldfield, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2012, 41, 1124–1137.
- a) H. M. Davies, *Nature* **2009**, 459, 786–787.
   b) K. Chen, P. S. Baran, *Nature* **2009**, 459, 824–828.
- L. F. Tietze, U. Beifuss, Angew. Chem. Int. Ed. 1993, 32, 132–163
- a) B. M. Trost, *Science* 1991, 254, 1471–1477. b) P. A. Wender, V. A. Verma, T. J. Paxton, T. H. Pillow, *Acc. Chem. Res.* 2008, 41, 40–49. c) T. Newhouse, P. S. Baran, R. W. Hoffmann, *Chem. Soc. Rev.* 2009, 38, 3010–3021.
- a) P. T. Anastas, J. C. Warner, Green Chemistry: Theory and Practice, Oxford University Press, Oxford, 2000, p. 135.
   b) A. S. Matlack, Introduction to Green Chemistry, Marcel Dekker, New York, 2001, p. 570. c) R. A. Sheldon, Chem. Soc. Rev. 2012, 41, 1437–1451.
- 12. R. Robinson, J. Chem. Soc. Trans. 1917, 111, 762-768.
- a) W. S. Johnson, M. B. Gravestock, B. E. McCarry, J. Am. Chem. Soc. 1971, 93, 4332–4334.
   b) M. B. Gravestock, W. S. Johnson, B. E. McCarry, R. J. Parry, B. E. Ratcliffe, J. Am. Chem. Soc. 1978, 100, 4274–4282.

- a) A. N. Alba, X. Companyo, M. Viciano, R. Rios, Curr. Org. Chem. 2009, 13, 1432–1474. b) C. Grondal, M. Jeanty,
   D. Enders, Nature Chem. 2010, 2, 167–178. c) B. Westermann,
   M. Ayaz, S. S. Van Berkel, Angew. Chem. Int. Ed. 2010, 49, 846–849. d) L. Albrecht, H. Jiang, K. A. Jørgensen, Angew. Chem. Int. Ed. 2011, 50, 8492–8509.
- B. Simmons, A. M. Walji, D. W. C. MacMillan, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2009, 48, 4349–4353.
- 16. E. Breitmaier *Terpenes: Flavours, Fragrances, Pharma, Pheromones*, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, **2006**.
- T. J. Maimone, P. S. Baran, *Nature Chem. Biol.* **2007**, *3*, 396–407.
   E. C. Cherney, P. S. Baran, *Isr. J. Chem.* **2011**, *51*, 391–405.
- 18. Las reacciones pericíclicas pueden considerarse una clase más aunque, generalmente, éstas suelen ser la transformación clave en alguno de los cuatro grupos ya mencionados, véase ejemplo ilustrado en el esquema 5. Para más información consultar: J. Poulin, C. M. Grisé-Bard, L. Barriault, *Chem. Soc. Rev.* 2009, 38, 3092–3101.
- S. M. Sheedan, G. Lalic, J. S. Chen, M. D. Shair, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2000, 39, 2714–2715.
- Y. Mi, J. V. Schreiber, E. J. Corey, J. Am. Chem. Soc. 2002, 124, 11290–11291.
- a) G. Pattenden, L. K. Reddy, A. Walter, *Tetrahedron Lett.* 2004, 45, 4027–4030. b) G. Pattenden, M. A. González,
   S. McCulloch, A. Walter, S. J. Woodhead, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2004, 101, 12024–12029.
- a) Comprehensive Organometallic Chemistry II, Vol. 12 (Eds.: E. W. Abel, F. G. A. Stone, G. Wilkinson), Pergamon, Oxford, 1995, p. 1359.
   b) L. S. Hegedus, Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules, 2nd ed., University Science Books, Sausalito, 1999.
   c) Transition Metals for Organic Synthesis 2nd ed. (Eds.: M. Beller, C. Bolm), Wiley-VCH, Weinheim, 2004, p. 1344.
- a) P. I. Dalko, L. Moisan, Angew. Chem. Int. Ed. 2004, 43, 5138–5175. b) Asymmetric Organocatalysis (Eds.: M. Beller, C. Bolm), 2<sup>nd</sup> ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2005, p. 440. c) C. Grondal, M. Jeanty, D. Enders, Nature Chem. 2010, 2, 167–178.
- a) B. G. Davis, V. Boyer, Nat. Prod. Rep. 2001, 18, 618–640. b) Enzyme Catalysis in Organic Synthesis, Vols. 1–3 (Eds.: K. Drauz, H. Waldmann), 2<sup>nd</sup> ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2002, p. 1556.

- a) A. Padwa, Chem. Soc. Rev. 2009, 38, 3072–3181. b) T. Vlaar,
   E. Ruijter, R. V. A. Orru, Adv. Synth. Catal. 2011, 353, 809–841.
- C. Aubert, O. Buisine, M. Petit, F. Slowinski, M. Malacria, *Pure Appl. Chem.* 1999, 71, 1463–1470.
- R. L. Funk, K. P. C. Vollhardt, J. Am. Chem. Soc. 1980, 102, 5253–5261.
- a) K. C. Nicolaou, P. G. Bulger, D. Sarlah, Angew. Chem. Int. Ed. 2005, 44, 4442–4489. b) L. F. Tietze, H. Ila, H. P. Bell, Chem. Rev. 2004, 104, 3453–3516. c) Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions, 2nd ed., Vols. 1 y 2 (Eds.: F. Diederich, P. J. Stang), Wiley-VCH, Weinheim, 2004, p. 916. d) Handbook of Organopalladium Chemistry for Organic Synthesis (Ed.: E. I. Negishi), Wiley Interscience, New York, 2002, p. 3350.
- S. Schweizer, Z. Z. Song, F. E. Meyer, P. J. Parsons, A. de Meijere, *Angew. Chem. Int. Ed.* 1999, 38, 1452–1454.
- 30. A. W. Anderson, N. G. Merckling, U.S. Patent, 1955, 2721189.
- a) G. C. Vougioukalakis, R. H. Grubbs, Chem. Rev. 2010, 110, 1746–1787. b) M. Mori, Adv. Synth. Catal. 2007, 349, 121–135.
- a) R. H. Grubbs, S. H. Pine en Comprehensive Organic Synthesis vol. 5, cap. 9.3 (Eds.: B. M. Trost, I. Fleming, L. A. Paquette), Pergamon: New York, 1991. b) K. J. Ivin, J. C. Mol, Olefin Metathesis and Metathesis Polymerization, Academy Press, San Diego, 1997.
- a) S. H. Kim, W. J. Zuercher, N. B. Bowden, R. H. Grubbs, *J. Org. Chem.* 1996, 61, 1073–1081. b) W. J. Zuercher, M. Scholl, R. H. Grubbs, *J. Org. Chem.* 1998, 63, 4291–4298.
- 34. F. D. Boyer, I. Hanna, L. Ricard, Org. Lett. 2004, 6, 1817–1820.
- B. Shi, N. A. Hawryluk, B. B. Snider, J. Org. Chem. 2003, 68, 1030–1042.
- a) R. García-Fandiño, E. M. Codesido, E. Sobarzo-Sánchez,
   L. Castedo, J. R. Granja, Org. Lett. 2004, 6, 193–196. b)
   M. J. Aldegunde, R. García-Fandiño, L. Castedo, J. R. Granja,
   Chem. Eur. J. 2007, 13, 5135–5150.
- M. J. Aldegunde, L. Castedo, J. R. Granja, Org. Lett. 2008, 10, 3789–3792
- M. J. Aldegunde, L. Castedo, J. R. Granja, Chem. Eur. J. 2009, 15, 4785–4787.
- 39. E. Jiménez, A. M. Echavarren, Top. Catal. 2010, 53, 924-930.



#### Historia de la Química

# Histoquímica

#### A. Ulises Acuña, José Elguero

Resumen: La química de colorantes contribuyó al avance de áreas científicas muy diversas, entre ellas la histología. El histólogo utiliza una larga serie de colorantes para obtener imágenes de la morfología de tejidos biológicos y anatomía celular, mediante microscopía óptica. El estudio microscópico de los componentes y reacciones químicas que caracterizan los tejidos biológicos constituye la histoquímica, y se basa, asimismo, en la utilización de colorantes muy específicos. En España, Santiago Ramón y Cajal destacó no solamente por sus investigaciones sobre el sistema nervioso, sino también como un gran innovador de la neurohistología, ciencia que encontró brillantes continuadores en nuestro país en el siglo pasado.

Palabras clave: Histología, histoquímica, colorantes, Ramón y Cajal, microscopía.

Abstract: Dye chemistry facilitated important advances in several scientific areas, as is the case of histology. In this field dyes are used to record images of biological tissues and cell anatomy under the light microscope. Besides that, the related science of Histochemistry addresses the understanding of the chemical composition and reaction mechanisms taking place in biological tissues. In Spain Santiago Ramón y Cajal, well known by his crucial contributions to the current knowledge of the nervous system, was also a leading innovator of staining methods for neurohistology, inaugurating a tradition of noted Spanish histochemists.

Keywords: Histology, histochemistry, dyes, Ramón y Cajal, microscopy.

#### Introducción

Todos los químicos conocen la importancia que tuvieron los colorantes en el desarrollo de su disciplina,<sup>1,2</sup> aunque también saben que actualmente es un área de la química relativamente poco frecuentada.

Hay, sin embargo, una parte de la ciencia de los colorantes que ha jugado un papel histórico en otra especialidad: la histología. El histólogo estudia, en primer lugar, la estructura microscópica de tejidos, células y orgánulos celulares para describir su morfología y posible función. Además, le interesa llevar esta descripción a nivel molecular, y llegar a conocer con resolución espacial la composición y reactividad químicas (histoquímica) del sistema biológico. Para obtener imágenes de composición química o de actividad metabólica *in situ*, manteniendo célula y tejido intactos, utiliza fundamentalmente la microscopía óptica. El microcopio óptico de transmisión se perfeccionó considera-





A. Ulises Acuña

J. Elguero<sup>2</sup>

- <sup>1</sup> Instituto Química-Física "Rocasolano", Consejo Superior de Investigaciones Científicas, 28006 Madrid. C-e: roculises@iqfr.csic.es
- <sup>2</sup> Instituto de Química Médica, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, 28006 Madrid. C-e: iqmbe17@iqm.csic.es

Recibido: 20/06/2011. Aceptado: 03/09/2011.

blemente en Alemania a finales del siglo XIX, gracias al trabajo conjunto de Carl Zeiss, de su responsable de investigación Ernst Abbe y de Otto Schott, que consiguió desarrollar los nuevos tipos de vidrio que requerían los objetivos calculados por Abbe. En este tipo de microscopía, las muestras de tejidos o las células individuales tienen espesores pequeños (0,02-10 µm), por lo que los cambios de intensidad debidos a la absorción de luz por las diferentes partes de su estructura no alcanzan el 10-20% necesario para que el ojo humano pueda identificar imágenes correctamente.<sup>3</sup> Para aumentar el contraste se recurrió muy pronto a aprovechar la extraordinaria sensibilidad del ojo a diferentes longitudes de onda (colores), mediante técnicas de tinción de células y de orgánulos celulares. Así, por ejemplo, se utilizó la mauveína en preparaciones histológicas poco tiempo después de su descubrimiento por Perkin.<sup>2</sup> En la mayoría de los casos se buscaba que la tinción fuera muy específica<sup>4</sup> y, por supuesto, que no alterase la delicada estructura del sistema biológico. 5,6 En la historia de la ciencia, pero aún más en la historia de la ciencia española, la figura de Santiago Ramón y Cajal está indisolublemente unida a los métodos de tinción de tejidos, a la histología y a lo que hoy se conoce como histoquímica.

#### Colorantes histológicos y química médica

Paul Erhlich (1854-1915, Premio Nobel de Medicina en 1908) realizó su investigación de doctorado sobre la teoría y práctica de la tinción histológica ("Beiträge zur Theorie und Praxis der histologischen Färbung", Facultad de Medicina de Leipzig, 1878). A él se debe la demostración de la existencia de la barrera hematoencefálica al colorear con anilina la sangre de un ratón y observar que el cerebro del animal no se teñía. Una de sus mayores innovaciones consistió en el uso de diferentes colorantes (azules de metileno y de indofenol) para la tinción selectiva de diferentes tipos de células. Erlich clasificaba como basófilas, acidófilas y neutrófilas aquellas células que se coloreaban específicamente con colorantes básicos,

Histoquímica 115

ácidos o neutros, respectivamente, explicando dicha especificidad mediante la presencia de los correspondientes grupos ionizables. También fueron importantes sus aportaciones al campo de la quimioterapia, que incluyen el descubrimiento del 606 (por ser fruto de 606 experimentos), en 1901, de la "bala mágica" o Salvarsán (arsfenamina), una preparación de arsénico orgánico empleada en el tratamiento de la sifilis y de la fiebre recurrente, y del Neosalvarsán (neoarsfenamina). El neosalvarsán fue conocido durante mucho tiempo como (Ehrlich 914) por tratarse del compuesto nº 914 preparado por Ehrlich y su ayudante para combatir dichas enfermedades.

Gerhard Domagk (1895-1964, Premio Nobel de Medicina 1939), trabajó en los laboratorios de microbiología de IG Farben en el uso de los colorantes como antibióticos, siguiendo las pautas marcadas por Ehrlich. Encontró que la sulfonamida prontosil (un colorante rojo, "prontosil rubrum", en realidad un profármaco) era efectiva contra las infecciones causadas por estreptococos. Experimentó el producto en su propia hija, afectada de una grave septicemia que había contraído al pincharse con una aguja, logrando una curación espectacular. Domagk obtuvo el premio Nobel por el descubrimiento del prontosil, primer fármaco efectivo contra las infecciones bacterianas. Fue forzado por el régimen nacionalsocialista a rehusar el premio, que recibió finalmente en 1947.

Ehrlich descubrió en 1891 que el azul de metileno constituía un tratamiento efectivo contra la malaria, 7,8 pero era ligeramente tóxico, coloreaba la orina en verde y el blanco de los ojos en azul. Durante la Segunda Guerra Mundial aquellos países que luchaban en el Pacífico, como EE UU y Francia (Indochina), buscaron disminuir su toxicidad y sus propiedades colorantes reduciéndolo de fenotiacinio a fenotiacina (Figura 1). En los laboratorios Rhône-Poulenc se descubrió que las fenotiacinas no poseían actividad contra la malaria. pero eran potentes antihistamínicos. Sucesivas modificaciones (Figura 1) llevaron a la prometazina (Fenergan®) y de ésta, con la colaboración de los médicos Laborit, Delay y Deniker, a la clorpromazina (Largactil®, Torazina®), el mayor avance jamás realizado para el tratamiento de las enfermedades mentales.<sup>9</sup> Simone Courvoisier, la responsable de farmacología en los laboratorios Rhône-Poulenc, jugó un papel crucial diseñando originales experimentos con animales de laboratorio para identificar los efectos de la clorpromazina sobre el sistema nervioso central.

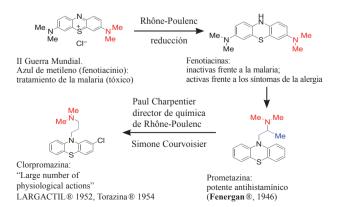
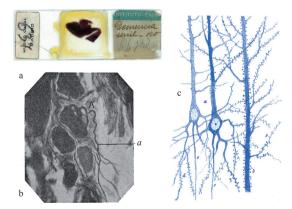


Figura 1. Desarrollo de fármacos a partir del azul de metileno.

#### Cajal y las técnicas tintoriales en neurohistología

La tinción de tejido nervioso era un problema difícil, debido, entre otras razones, a la elevada concentración de lípidos que impedía el uso de los colorantes polares habituales. Cajal desarrolló varios métodos originales de tinción específica<sup>10,11</sup> y modificó, mejorándolos, algunos de los ya existentes, como el de Golgi. En 1903 descubrió el método del nitrato de plata reducido,<sup>10</sup> que le permitió estudiar la estructura de las neuronas en fases de su desarrollo en las que el método de Golgi no era útil. Son dos métodos complementarios,<sup>12</sup> el de Golgi impregna la superfície celular, salvo en la modificación para teñir el aparato de Golgi, y permite estudiar células enteras y sus conexiones, mientras que el del nitrato reducido se usa para estudiar la estructura del citoplasma y núcleo celular (neurofibrillas, cuerpo de Cajal, etc.).

Probablemente Cajal no hubiese tenido tanto éxito si no hubiesen concurrido dos circunstancias: era un gran dibujante y un excelente fotógrafo (Figura 2); veía más allá que los otros histólogos de su tiempo, y donde éstos pretendían ver una red inextricable, un continuo (el reticularismo), influidos por consagrados criterios "de escuela", Cajal comprobó la existencia de neuronas individuales<sup>11</sup> (el neuronismo). La ciencia no es descripción neutra, es interpretación de lo observado. Sin sus dotes artísticas, sus colorantes y su independencia de criterio posiblemente Cajal no hubiera alcanzado una comprensión revolucionaria del sistema nervioso.



**Figura 2.** (a) Preparación histológica de Cajal del cerebro de un enfermo con demencia senil en la que utiliza su método del oro-sublimado. <sup>13</sup> (b) Microfotografía combinada del ganglio plexiforme de un perro en la que Cajal, utilizando su método del nitrato de plata reducido, consigue mostrar el recorrido del axón (a) combinando tres microfotografías de otros tantos planos focales. (c) Dibujo de una célula piramidal de conejo, realizado por Cajal a partir de una preparación en la que utilizó su modificación del método del azul de metileno (reproducción autorizada por los herederos de S. Ramón y Cajal).

Partiendo inicialmente de los hallazgos de Camillo Golgi y de Luis Simarro, <sup>14</sup> Cajal mostró una paciencia, una constancia y una obstinación ejemplares. En una aproximación desprovista de todo fundamento racional, que recuerda a las de Erhlich y Domagk, probó todo lo que le habían dicho, todo lo que otros descubrieron, incluidas las técnicas de Freud (Figura 3) para el sistema nervioso central, <sup>15</sup> todo lo que pudo imaginar, para mejorar las imágenes de sus cortes neurohistológicos. Así, hasta los últimos días de su vida. <sup>16</sup>

A. Ulises Acuña et al.

A NEW HISTOLOGICAL METHOD FOR THE STUDY OF NERVE-TRACTS IN THE BRAIN AND SPINAL CHORD.

BY DR. SIGM. FREUD,

Assistant Physician to the Vienna General Hospital

In the course of my studies on the structure and development of the medulla oblongata I succeeded in working out the following method, which will be found a powerful aid in tracing the course of fibres in the central nervous system of the adult and the embryo.

Pieces of the organ are hardened in bichromate of potash, or in Eriteki's fluid (2½ parts of bichromate of potash and ½ of sulphate of copper to 100 parts of water), and the process of hardening is finished by placing the specimen in alcohol; thin sections are cut by means of a microtome and washed in distilled water. The washed sections are brought into an aqueous solution of chloride of gold (1 to 100) to which is added half or an equal volume of strong alcohol. This mixture is to be preferred to the simple aqueous solution of chloride of gold, which has been hitherto used in staining preparations; the sections are to remain in it from 3 to 5 hours. With the aid of a wooden rod (metal to be avoided) they are taken out of this solution, washed in distilled water and placed in a concentrated solution of caustic soda (1 to 5 or 6 of water); which very soon renders them transparent and slippery. After 2 or 3 minutes the preparations are taken out of the soda with the same wooden rod (toothpick or match), and the superfluous soda is allowed to drop off. The sections are then, with the soda they still contain, put into a 10 per cent. solution of iodide of potash where they almost immediately receive a tender rose-colouring, which changes into darker hues of red during the next 5 to 15

Figura 3. Método de tinción de tejido nervioso desarrollado por Sigmund Freud.

El conocido interés de Cajal por la fotografía y el avanzado carácter de sus trabajos en este campo<sup>17</sup> nos llevan a preguntarnos si su uso de la plata en fotografía precedió o siguió a su uso en histología. Históricamente, el interés de Cajal por la fotografía fue anterior (1868, 1879) a sus trabajos histológicos (1881), pero luego ambos campos se entrecruzan y fertilizan mutuamente, avanzando en paralelo (su libro *La fotografía en colores* es de 1912). Así por ejemplo, para su técnica favorita de tinción histológica mediante nitrato de plata, Cajal recomienda la utilización de un reductor fotográfico, el pirogalol.

### La histoquímica en el Instituto Cajal

El interés por la investigación histoquímica renació en la segunda mitad del siglo XX en el Instituto Cajal (CSIC) de la mano del Dr. Ricardo Martínez Rodríguez, Jefe del Departamento de Neurohistoquímica y Neurobioquímica. El Dr. Martínez (Ribadavia, Orense, 1925), médico de la Armada, se especializó en Histología bajo la tutela del Dr. A. Carrato, catedrático de histología y anatomía patológica (Univ. Complutense de Madrid) y Director del Instituto Cajal (1963-1981). Asimismo, Martínez trabajó con Raymond J. Wegmann, Director del *Institute de Histochimie* de las Universidades de París y omnipresente impulsor de la histoquímica y biología molecular y celular en Europa y Sudamérica (Figura 4).

Martínez puso a punto, en los laboratorios del Instituto Cajal, numerosas técnicas histoquímicas y desarrolló métodos originales para detectar actividades enzimáticas *in situ*, como parte de su investigación sobre neurotransmisores que fue reconocida con el Premio Ramón y Cajal del CSIC (1967). Para sistematizar y difundir este extenso conocimiento escribió, a finales de la década de los 70, un tratado de histoquímica de más de 1000 páginas, del cual se distribuyeron copias producidas de manera artesanal. A partir de esta obra, Martínez y Gragera editaron recientemente un enciclopédico compendio de la teoría y práctica de la Histoquímica, de al que contribuyeron, además, Joaquín Plumet, Ricardo Martínez-Murillo y Javier Capilla.



Figura 4. De izquierda a derecha A. Carrato, R. J. Wegmann y R. Martínez, en una de las visitas del histólogo francés a España (1979).

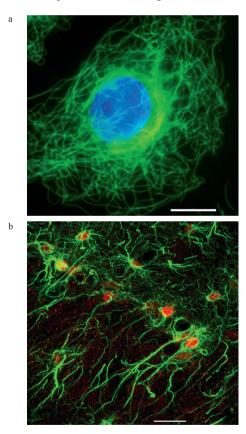
El lector encontrará aquí métodos histoquímicos específicos para la determinación *in situ* de diferentes grupos funcionales orgánicos (aldehídos, cetonas, alcoholes,...), de aminoácidos, proteínas, lípidos, hidratos de carbono, ácidos nucleicos, etc., así como de una larga serie de enzimas y de procesos metabólicos. En cada capítulo se discute el fundamento químico de la reacción de tinción, cuando se conoce, y, a continuación, se detalla el correspondiente protocolo de trabajo. Para un químico es curioso comprobar que, en la mayoría de los casos, el mecanismo de la reacción responsable de la selectividad del método histológico se conoce sólo fragmentariamente.

# La histoquímica hoy: microscopía de fluorescencia y nanoscopía

El microscopio óptico de transmisión alcanzó, hacia 1900, el límite físico de resolución lateral (~ 0.2 \(\mu\mathrm{m}\)), que viene dado por la condición de difracción de Abbe. 19 Los nuevos instrumentos, como el microscopio confocal de transmisión, <sup>20</sup> que mejoró la resolución a lo largo del eje perpendicular al plano de la muestra, o el de contraste de fases interferencial, que no requiere la tinción previa del sistema biológico, no pueden escapar al límite de Abbe. La ruptura de la barrera de difracción tendría que esperar al desarrollo de la microscopía de fluorescencia, una técnica que se inició tempranamente en Alemania.<sup>21</sup> En un microscopio de fluorescencia se incorpora a la muestra un colorante fluorescente (fluoróforo) y se observa desde el mismo lado del que se excita (epi-iluminación), como cuando se observa un objeto opaco; idealmente este instrumento podría proporcionar imágenes con un contraste infinito (luz/ oscuridad). La utilidad de esta técnica depende de la habilidad del químico para obtener fluoróforos con las propiedades de selectividad que requiere el biólogo y que, además, emitan eficientemente y sean fotoestables una vez incorporados al sistema biológico. Para resolver este arduo problema hoy se recurre a ingeniosos diseños moleculares, 22 anticuerpos, cristales semiconductores o proteínas fluorescentes. La disponibilidad de marcadores fluorescentes, unida a la de nuevos láseres, cámaras digitales y técnicas de análisis de imágenes, ha dado como resultado el moderno microscopio confocal de fluorescencia, que permite obtener imágenes de especímenes vivos y tejidos de una excelente calidad (Figura 5), con una resolución lateral muy próxima al límite de difracción.

Histoquímica 117

Las técnicas de imagen basadas en la fluorescencia han conducido, además, a la aparición de la microscopía óptica con resolución de nanómetros, es decir, la nanoscopía.<sup>23</sup> Entre los varios métodos que actualmente se están desarrollando destacamos aquellos que se basan en la utilización de fluoróforos "biestables", es decir, que pueden bascular entre un estado apagado (no fluorescente) y encendido (fluorescente). En estos métodos (por ejemplo PALM y STORM, por sus siglas en inglés), se marca densamente el objeto con moléculas del fluoróforo que se encuentran inicialmente en el estado "apagado". Mediante un pulso láser de muy baja intensidad se hace pasar al estado "encendido" a unas pocas moléculas distribuidas al azar por la superficie del objeto. La tecnología electroóptica actual permite determinar la posición de estas moléculas únicas, ahora fluorescentes, con una exactitud mejor de 1 nm, por lo que, repitiendo el proceso un número elevado de veces, se puede reconstruir la imagen del objeto con resolución lateral nanométrica.<sup>24</sup> Desgraciadamente, hoy se conocen muy pocas sustancias fluorescentes con esta propiedad. El gran reto del (histo)químico del siglo XXI es el diseño de los nuevos tipos de moléculas fluorescentes que necesita la nanoscopía, con la bioespecificidad que reclama el biólogo.<sup>25</sup>



**Figura 5.** Imágenes de microscopía confocal de fluorescencia: a) Célula de carcinoma de pulmón humano. El sistema de microtúbulos (verde, diám.  $\sim 25$  nm) se marcó con un análogo fluorescente del fármaco antitumoral paclitaxel<sup>26</sup> y el núcleo se tiñó con el colorante Hoechst 33342.<sup>27</sup> Barra 10  $\mu$ m (imagen cedida por la Dra. I. Barasoaín); b) Astrocitos de cerebro de ratón. El citoplasma (verde) y el núcleo (rojo) se marcaron mediante anticuerpos fluorescentes específicos de proteínas que aparecen únicamente en dichas localizaciones. Barra 20  $\mu$ m (imagen cedida por el Dr. R. Martínez Murillo).

#### **Agradecimientos**

Agradecemos al Dr. Miguel A. Freire la Figura 2, así como su inestimable ayuda y comentarios durante la elaboración de este trabajo; y a los Drs. R. Martínez Murillo, A. Toledano, F. Amat y P. García Madrazo su valiosa colaboración. Los autores agradecen a los herederos de Santiago Ramón y Cajal el permiso para la reproducción de la Figura 2. Trabajo financiado por el Proyecto CTQ2010/16457 del Ministerio de Ciencia e Innovación, España.

#### Bibliografía

- (a) H. Zollinger, Color Chemistry. Synthesis, Properties, and Applications of Organic Dyes and Pigments, Third edition, Wiley-VCH, Verlag Helvetica Chimica Acta, Zürich, 2003.
   (b) K. Nassau, The physics and Chemistry of Color, Wyley-Interscience, New York, 1983.
- 2. S. Garfield, Mauve: How One Man Invented a Color That Changed the World, Faber & Faber Ltd., London, 2001.
- Para aumentar el contraste se han desarrollado varios métodos ópticos muy ingeniosos, que transforman diferencias de índice de refracción (fase), polarización, etc. en diferencias de intensidad de luz.
- 4. El teñido en microscopía óptica no sólo se utiliza para aumentar el contraste en un tejido, sino para determinar la localización espacial de un tipo específico de compuestos (lípidos, p. ej.) o de una actividad enzimática.
- 5. Existen numerosos manuales sobre las técnicas de tinción y los colorantes más utilizados en histología, p. ej. (a) J. Kiernan, Histological and Histochemical Methods: Theory and Practice, Pergamon Press, Elmsford, 1981. (b) E. B. Prophet, B. Mills, J. B. Arrington, L. H. Sobin, Eds. Laboratory Methods in Histotechnology, American Registry of Pathology, Washington, D. C., 1992. (c) Uno de los más célebres es R. W. Horobin, J. A. Kierman, Eds. CONN'S Biological Stains, 10th Edition, Biological Stain Comission, Oxford, 2002. (d) R. Martínez Rodríguez, R. R. Gragera Martínez Eds. Fundamentos teóricos y prácticos de la Histoquímica. Publicaciones del CSIC, 2008.
- Hay varias revistas cuyo título incluye la palabra Histoquímica, p. ej.: Biotechnic and Histochemistry, Histochemistry and Cell Biology y Journal of Histochemistry & Cytochemistry. Otras, aunque no la incluyen, publican esencialmente artículos de tipo histoquímico.
- 7. En 1876, Heinrich Caro (el científico responsable de la "reacción de Caro" y el "ácido de Caro"), trabajando en la BASF, preparó un nuevo colorante, el azul de metileno, a partir de p-amino-dimetilanilina. Auguste Bernthsen, un químico de Heidelberg, determinó su estructura, a petición de Caro, y denominó fenotiazina al anillo. Siguiendo la teoría de la bala mágica de Ehrlich, Koch usó azul de metileno para caracterizar la micobacteria de la tuberculosis. Ehrlich encontró que el azul de metileno también coloreaba el parásito de la malaria, lo que le llevó a ensayarlo como antipalúdico. También descubrió que coloreaba las células nerviosas, lo que condujo a Pietro Bodoni en 1899 a usarlo para tratar desórdenes psicóticos (sin éxito). Sin el azul de metileno no hubiera habido antihistamínicos (dos Premios Nobel, Daniel Bovet y James Black) y sin antihistamínicos no hubiera habido antipsicóticos ni antidepresivos tricíclicos.
- 8. Martínez y Gragera<sup>5d</sup> mencionan con detalle varias de sus aplicaciones histológicas, incluida la determinación de residuos básicos (basofilía) en tejidos (p. 375). En 5c se describe el cambio de color en metanol desde el azul, λ<sub>abs</sub>=656 nm, a incoloro, λ<sub>abs</sub>=330 nm, por reducción a azul de leucometileno, una fenotiacina (p. 93), así como sus propiedades como colorante de tinción celular (pp. 299 y 423).

A. Ulises Acuña et al.

- (a) J. E. Kristiansen, Dan. Med. Bull. 1989, 36, 178–185. (b) W. Sneader, Drug News & Perspectives 2002, 15, 466–471.
- J. De Felipe, E. G. Jones, *Trends in Neurosciences* 1992, 15, 237–245.
- 11. T. R. Heinz, Biotechnic & Histochemistry 2005, 80, 211-222.
- 12. Se pueden encontrar excelentes reproducciones de los dibujos y preparaciones histológicas de Ramón y Cajal en las publicaciones de Miguel Freire y colaboradores: (a) A. Martínez, V. G. Marín, S. Ramón y Cajal Junquera, R. Martínez-Murillo, M. Freire, *Nature Rev. Cancer* 2005, 5, 904–909. (b) V. García-Marín, P. García-López, M. Freire, Cajal's contributions to glia research, *Trends Neurosci.* 2007, 30, 479–487. (c) V. García-Marín, P. García-López, M. Freire, *J. History Neurosci.* 2009, 18, 197–210. (d) P. García-López, V. García-Marín, M. Freire, *Front. Neuroanatomy* 4:9. doi 10:3389/neuro 05.009.2010.
- En este método se utiliza para la tinción una mezcla de cloruros aúrico y mercúrico, conocido éste en el siglo XIX como "sublimado corrosivo".
- 14. N. Fernández, C. Breathnach, J. Hist. Neurosci 2001, 10, 19-26.
- K. Mayer, Chlorure d'or: À propos des études chimiques et histochimiques de Sigmund Freud, 1996, 312, 406–408.
   Freud, 1884, 7, 86–88.
- J. Elguero, Metodología de la investigación: los ejemplos de Freud y de Cajal, Anexo III (Métodos de tinción), Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Madrid, 2004.
- M. B. Márquez, Santiago Ramón y Cajal: Ámbitos 2004, 139–153.
- R. Martínez Rodríguez, con la colaboración de A. Toledano Gasca,
   R. Martínez Murillo, L. M. García-Segura, Histoquímica 1979.

- 19. E. Abbe, Arch. Mikroskop. Anat. 1873, 9, 413-418.
- 20. El microscopio confocal de barrido es uno de los grandes avances de la microscopía óptica. Fue inventado en 1956 en la Universidad de Harvard (EE UU) por el joven matemático M. L. Minsky (Nueva York, 1927), el cual estaba interesado en mejorar las técnicas de observación, precisamente, de las sinapsis neuronales. Para explotar las grandes posibilidades de este tipo de microscopio hubo que esperar a los nuevos láseres, detectores y microprocesadores de la década de los 90. Minsky se trasladó en 1958 al Massachusetts Institute of Technology, en donde creó una nueva especialidad científica, la inteligencia artificial, por la cual es mundialmente conocido.
- 21. O. Heimstadt, Z. Wissens. Mikrosk. 1911, 28, 330.
- 22. Hay una gran variedad de marcadores fluorescentes disponibles comercialmente, ver p. ej. *Molecular Probes Handbook*, 11th Edit. 2010, Invitrogen Corp. (Carlsbad, EEUU) o *Fluorescent Labels and Dyes Catalog*, ATTO-TEC (Siegen, Alemania).
- 23. S. W. Hell, Science 2007, 316, 1153-1158.
- G. Patterson, M. Davidson, S. Manley, J. Lippincot-Schwartz, Ann. Rev. Phys. Chem. 2010, 61, 345–367.
- 25. S. W. Hell, Nature Methods 2009, 6, 24-32.
- (a) A. A. Souto, A. U. Acuña, J. M. Andreu, I. Barasoaín, M. Abal, F. Amat-Guerri, *Angew. Chem. Intl. Ed.* 1996, 34, 2710–2712; (b) M. Abal, A. A. Souto, F. Amat-Guerri, A. U. Acuña, J. M. Andreu, I. Barasoaín, *Cell Motil. Cytoskel.* 2001, 49, 1–15.
- El colorante Hoechst 33342 es una bisbenzimida cuyo rendimiento cuántico de fluorescencia aumenta considerablemente al intercalarse en la doble hélice del ADN.



#### 13 de julio de 2012

Finaliza el plazo para la recepción de candidaturas.

#### 28 de septiembre de 2012

Entrega de premios en las instalaciones de Lilly en Alcobendas (Madrid), con las conferencias de la Dra. Cristina Nevado (Chemistry University of Zurich) y del Dr. Phil S. Baran (Scrips Research Institute)

Bases de los premios y otros datos en www.lilly.es/investigacion-y-desarrollo

Eli Lilly es una compañía farmacéutica global con centros de investigación en EEUU y Europa, líder en el descubrimiento, desarrollo y comercialización de nuevos medicamentos. El centro de I+D en Alcobendas, dedicado a Química Médica, Orgánica y Analítica, a través del Comité Europeo para Relaciones Académicas (EUACC), se complace en convocar en España los X Premios de Investigación para alumnos de doctorado.

Eli Lilly en Europa:

España: Alcobendas, www.lilly.es Reino Unido: Windlesham, www.lilly.co.uk Irlanda: Kinsale, www.lilly.ie





# La corona de Gerión y el Eureka de Arquímedes

José Antonio Martínez-Pons

Resumen: Basándose en una de las leyendas que se cuentan sobre Arquímedes, se propone un recurso didáctico en el que, partiendo del concepto y la medida de la densidad de sólidos y líquidos, se pretende mostrar, junto con la comprensión de los conceptos básicos, un conjunto de aplicaciones físicas, químicas, incluso matemáticas de la densidad y diferentes modos de medirla, y algunos recursos didácticos que pueden extraerse así como la extensión de las ideas a propiedades similares junto con una introducción a la medida y tratamiento de los resultados.

Palabras clave: Arquímedes, Magnitudes específicas, Densidad. Propiedad característica. Regresión.

Abstract: Departing from one of the legends that are counted on Archimedes a didactic resource is proposed in the one that, starting from the concept and the measure of the density is claimed besides the comprehension of the basic concepts, a set of physical, chemical, even mathematical applications of the density and different manners of measuring it, are shown, and some didactic resources that can be extracted as well as the extension of the ideas to similar properties, as well as an introduction to the measure and the treatment of the results.

Keywords: Archimedes, Specific Magnitudes, Density. Typical property. Regression.

#### Introducción y un poco de historia

Los antiguos manuales de química elemental solían empezar con una definición de esta ciencia y a renglón seguido exponían que sus objetivos fundamentales eran dos: El análisis, o conjunto de procesos y procedimientos que permitían identificar una sustancia y sus componentes elementales y la síntesis, operaciones y procesos para obtener una determinada sustancia a partir de otras. (Puig)<sup>1</sup> (Vitoria).<sup>2</sup>

Respecto al análisis, relata Vitruvio que el tirano de Siracusa Gerión o Herón, allá por el siglo III antes de Cristo, encargó a un artesano que le hiciera una corona para cuyo fin le entregó una cierta cantidad de oro. El orfebre concluyó su trabajo pero el tirano sospechó que el artífice había sustituido parte del oro por otro metal de inferior calidad. Pesó la corona y su peso era el correcto, mas el tirano persistió en su duda. Así pues solicitó a Arquímedes de Siracusa (285-212 a J.C.) que, como sabio de la corte, averiguara la verdad sin destruir la corona. Arquímedes en un principio no sabía cómo, pero un día al meterse en la bañera observó que al sumergirse el nivel del agua subía debido al agua que su cuerpo desplazaba y saltó de la pileta exclamando ¡Eureka! (Lo encontré). Había dado con la solución al problema.



J. A. Martínez Pons

Universidad Antonio de Nebrija. C Pirineos 55 Madrid. C-e: jamartinezpons @educa. madrid.org

Recibido: 06/06/2011. Aceptado: 11/08/2011.

Su idea feliz consistía en tomar una masa de oro puro idéntica a la de la corona. Sumergirla en un recipiente con agua y marcar el nivel alcanzado por el agua, sacar el oro y repetir la operación con la corona. El nivel alcanzado con el oro fue menor que con la corona, lo cual probaba que el material de la corona no era oro ya que un mismo peso desplazaba una cantidad de agua diferente. La sospecha de Gerión era fundada.

Así pues, Arquímedes habría establecido el fundamento del análisis químico, esto es, las sustancias poseen ciertas propiedades, físicas o químicas, que permiten caracterizarlas. Además había introducido en la física la idea de la densidad, por supuesto muy lejos del concepto actual, aunque sabía que a igual masa, dos muestras de la misma sustancia debían desplazar el mismo volumen de agua por tanto ésa era una propiedad característica.

#### Densidad v peso específico absolutos v relativos

Aunque densidad y peso específico son dos conceptos muy relacionados, son diferentes, pero muchas veces, se confunden, en ocasiones por simple abuso de nomenclatura. La densidad absoluta, de aquí en adelante *densidad*, es *la masa de la unidad de volumen*.\* Es un escalar cuyas dimensiones son  $[\rho] = [M][L^{-3}]$  y sus unidades en el S. I. son kg m<sup>-3</sup>, aunque en la práctica se utilicen unidades más manejables comoelgcm<sup>-3</sup>. Elpesoespecíficoesel $[p_e] = \frac{[F]}{[V]} = \frac{[M]}{[t]^2[T]^2}$ 

*peso de la unidad de volumen*, sus dimensiones serian por tanto y su unidad internacional N m<sup>-3</sup>

y conviene recordarlo a los alumnos, aunque el lenguaje corriente no sea muy claro en la distinción. Ambas magnitudes se relacionan por la aceleración de gravedad.

$$p_e = \rho \mathbf{g}$$

<sup>\*</sup> Preferimos esta definición a la puramente operativa de "masa partido por volumen" tan corriente, que puede ser útil desde el punto de vista de cálculo pero es muy pobre desde el punto de vista conceptual.

120 José Antonio Martínez-Pons

Existe otra magnitud semejante, la "densidad relativa", que compara la masa de un determinado volumen con la del mismo volumen de una sustancia de referencia, generalmente, el agua.† La densidad y el peso específico relativos son adimensionales.

La mayoría de medidas se hacen por medio de básculas electrónicas, que miden el peso y no la masa, aunque bien calibradas pueden proporcionar el valor de la masa.<sup>‡</sup> A partir de aquí se considerará que las básculas electrónicas están adecuadamente calibradas y registran masas.

#### Conceptos relacionados con el término densidad

La idea de cantidad por unidad volumen se extiende a otras magnitudes extensivas, asociándoles una magnitud intensiva, por ejemplo, la *densidad atómica o molecular*, es decir, átomos o moléculas por unidad de volumen, interesante, por ejemplo, en astrofísica, o la *densidad de carga eléctrica*, carga por unidad de volumen, que en el S. I. se mide en coulomb m<sup>-3</sup> o A·s·m<sup>-3</sup>. Además también es usual cambiar la referencia a la unidad de superfície. Así se habla de *densidad superficial*, por ejemplo el gramaje del papel, o a la unidad de longitud, se llama *densidad lineal*, magnitud importante en el estudio de las vibraciones de una cuerda tensa.

Estos conceptos también son extrapolables a otras magnitudes, como la carga eléctrica y así se tendría *la densidad lineal de carga* de un hilo dieléctrico cargado, cuyo campo creado tradicionalmente suele ser uno de los primeros problemas que se propone a los estudiantes de electromagnetismo, o la *densidad superficial de carg*a que aparece, por ejemplo, en el cálculo del campo creado por un plano de cargas. La analogía con la distribución de masa ayuda en la comprensión de las magnitudes electrostáticas.

#### Como medir la densidad

A lo largo del trabajo que sigue se propondrán diferentes técnicas de medida de la densidad referidas a sólidos y líquidos y el principio físico en que se basan. Es muy importante que, tan pronto como se pueda, los alumnos se acostumbren estimar la incertidumbre de sus resultados, aunque sea de un modo elemental, y que discutan qué factores pueden interferir en éstos.

#### Medidas cualitativas

#### La Corona de Gerión

Se trata de reproducir el experimento de Arquímedes. Es suficiente un recipiente transparente, un rotulador, y dos muestras de la misma masa de materiales diferentes. Se sumerge una de ellas en el recipiente, se marca el nivel alcanzado. Se saca la muestra y se introduce la segunda, marcándose el nuevo nivel. Lo normal es que las marcas no coincidan, lógicamente el que desplaza menos volumen, marca inferior, es el más denso. Arquímedes tuvo la suerte de que, en sus tiempos, el material más denso conocido era el oro, de modo que pudo demostrar que la corona y la muestra eran materiales

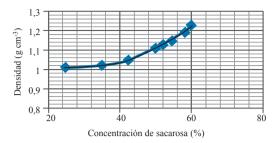


Figura 1. Curva de calibrado con la se calcularía el grado Brix (% equivalente de sacarosa) de una disolución azucarada (Martínez Pons).<sup>4</sup>

diferentes y que la corona no era oro puro. El estudio riguroso de las densidades de las aleaciones está fuera de lugar en este trabajo, ya que depende de la estructura interna de los metales aleados y no tiene que ser rigurosamente proporcional a la proporción de la aleación. Igual puede decirse y observarse, por ejemplo en disoluciones líquidas. Con una adecuada curva de calibrado (Figura 1) cuya construcción es un ejercicio muy interesante, puede calcularse gráficamente la concentración de una disolución, (Martínez Pons)<sup>4</sup> y verificar, al menos cualitativamente, el efecto de *contracción de volumen*.

#### Principio de Arquímedes

Como es sabido, según estableció Arquímedes, todo cuerpo sumergido en un fluido experimenta un empuje vertical y hacia arriba igual al peso del fluido que el cuerpo desaloja, si el empuje es mayor que el peso del cuerpo éste flota y se sumerge en caso contrario.

De modo cualitativo puede utilizarse y de hecho es una técnica industrial corriente, para separar materiales de diferente densidad introduciéndolos en líquidos de densidad conocida, de modo que los flotantes tendrán densidad inferior a la del líquido y los que se hundan, densidad mayor. Aquí se ejemplifica en la separación de muestras de plásticos. Las disoluciones pueden prepararse por ejemplo con mezclas de agua y alcohol ( $\rho$ <1) y agua y sal ( $\rho$ >1). Si se realiza el experimento téngase la precaución de añadir unas gotitas de detergente al agua y de agitar bien para evitar fenómenos de tensión superficial (Figura 2) (Gómez Antón, <sup>6</sup> Pérez<sup>7</sup>). Si se prepara un conjunto de disoluciones normalizadas, se puede efectuar una especie de "marcha analítica" con los diferentes plásticos,§ separando en cada ensayo flotantes y sumergidos e introduciéndolos en sendos líquidos de diferentes densidades intermedias, repitiendo el proceso, si es necesario.



**Figura 2.** Separación de plásticos en disolución acuosa de densidad 1,2 g cm<sup>-3</sup> fondo PVC (blanco); superficie PS (rojo).

<sup>†</sup> En enología se suele llamar "masa volúmica" a la densidad absoluta y el término densidad se refiere a densidad relativa respecto al agua, siempre a 20 °C (García Cazorla).<sup>3</sup>

<sup>‡</sup> Sabido es que cuando dos magnitudes se relacionan mediante una constante, afectos prácticos acaban confundiéndose, valga el ejemplo de la masa y la energía en física de partículas (E = mc2).

<sup>§</sup> Recuérdese que no es lo mismo "plástico", material complejo, que "polímero", base química de los plásticos, pero la técnica propuesta da bastante buenos resultados incluso con aquéllos.

#### Medidas cuantitativas

Se debe conocer el fundamento de cada método, sus ventajas y sus inconvenientes, y como se ha dicho, que las medidas se acompañen de una estimación de la incertidumbre y, si se realiza la medida de la densidad de una misma sustancia por diferentes métodos, se comparen los resultados. No se trata de un análisis en profundidad de errores ni de regresión ni otras sutilezas estadísticas, que a juicio de quien esto escribe sobrepasan lo que se puede exigir a un estudiante de bachillerato, pero sí una aproximación adecuada. En cualquier caso, el lector interesado puede consultar la referencia 5. Se pueden realizar dos tipos de medidas. En unas se mide una sola muestra y se calcula la densidad. En otras se mide masa v volumen de una serie de muestras de la misma sustancia v se construye la correspondiente recta. De este modo se verifica que la densidad es una propiedad que no depende de la cantidad de materia, es decir, es intensiva.

#### Técnicas que se basan en el propio concepto de densidad

#### Sólidos regulares

En estos casos se medirán las dimensiones características del sólido y se pesará (de aquí en adelante, con abuso de la terminología se utilizará, la voz *pesar* indistintamente para medir masas o pesos). Lo ideal es utilizar un calibre. Se aplicará la fórmula matemática correspondiente y se estimará el error. Se consigue de este modo manejar el calibre. En alumnos de bachillerato se recomienda el método de la derivación logarítmica para la estimación de la incertidumbre<sup>4</sup> insistiéndose siempre en que el "valor real" es una entelequia, ya que todos los valores son "medidos" con mayor o menor precisión. Por tanto, de lo que se trata es de establecer una cota: "el error no es mayor que" o, para ser más rigurosos; "la incertidumbre en la medida no es mayor que". Este apunte vale para todo el trabajo.

#### Sólidos irregulares

Es este caso se debe medir el volumen por un método indirecto. El más usual es por el volumen de un líquido desplazado. Si se trata de objetos de pequeño tamaño puede utilizarse una probeta y leer directamente el volumen por variación de nivel. El método está limitado por la poca precisión de una probeta de tamaño adecuado y porque, cuando el volumen es pequeño, la imprecisión derivada de su cálculo por diferencia puede ser comparable con la incertidumbre total de las medidas individuales. Además la muestra debe ser más densa e insoluble en el líquido a medir.

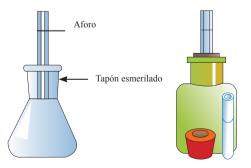


Figura 3. Esquema del picnómetro, y del picnómetro auto construido.

Más preciso es el uso del picnómetro, aparato diseñado expresamente para este objetivo. Se trata de un pequeño matraz con tapón que lleva incorporado un tubo fino con un aforo (Figura 3). Aunque el aparato no es excesivamente caro, puede construirse con un pequeño erlenmeyer o un simple frasco y un tapón de caucho (no de corcho) perforado en el que se ajusta un tubito transparente en el que, con lima o rotulador se marca el aforo. Incluso se puede proponer su construcción a los estudiantes. (Figura 3).

Uso del picnómetro para medir densidades de sólidos. Pesadas

Primera pesada  $M_1$  = Picnómetro vacío.

Segunda pesada  $M_2$ =Picnómetro con el sólido.

Tercera pesada  $M_3$ =Picnómetro conteniendo el sólido y agua hasta enrase.

Cuarta pesada  $M_4$ =Picnómetro sólo con agua hasta enrase. La forma más simple de hacer un enrase correcto consiste en hace un pequeño macarrón con papel de filtro e introducirlo en el cuello del picnómetro absorbiendo el exceso de líquido. Cálculos

Masa del sólido  $M_s = M_2 - M_1$  (puede medirse directamente, con lo que se evita una diferencia).

Masa del agua con sólido  $M_5 = M_3 - M_2$ .

Masa del agua sin sólido  $M_6 = M_4 - M_1$ .

Masa de agua desplazada por el sólido  $M_d$ = $M_6$ - $M_5$ = $M_4$ - $M_1$ - $M_3$ + $M_2$ = $M_4$ - $M_3$ + $M_s$ .

Densidad relativa  $\rho = M_s/M_d$ .

Para calcular la densidad absoluta es suficiente multiplicar por la densidad del agua a la temperatura de trabajo.

$$\rho = d \times \rho L$$

Obsérvese que, por forma de operar, no es preciso que el material sea menos denso que el líquido del picnómetro y ni una muestra continua (pueden ser, por ejemplo, fragmentos o limaduras).

**Ejemplo**: Se ha medido la densidad de una cadenita de bisutería obteniéndose  $M_s$  = 5,02 g;  $M_3$  = 91,48 g;  $M_4$  = 87,11 g con una incertidumbre en cada pesada de  $\pm$  0,02g.

Entonces  $M_d = M_4 - M_1 + M_2 \Delta M_d \le 0.02 + 0.02 + 0.02 = 0.06$  (se han necesitado tres pesadas).

$$\rho = \frac{M_s}{M_d} = 7,72; \frac{\Delta \rho}{\rho} \le \frac{\Delta M_s}{M_s} + \frac{\Delta M_d}{M_d} = \frac{0,02}{5,02} + \frac{0,06}{0,65} = 0,096; \Delta \rho = 7,692 \times 0,096 = 0,74$$

Por tanto  $\rho = 7,7 \pm 0,7$  y es adimensional al ser una densidad relativa respecto al agua. Pese a su color dorado, sugiere una aleación de hierro.

Aplicación: La medida de la densidad se utiliza en el análisis de plásticos, apoyada por otras, para determinar el polímero constitutivo. En el laboratorio escolar puede emplearse de modo aproximado con muestras de plásticos de uso común, aunque en rigor habría que disolver este plástico en un disolvente adecuado, filtrar para eliminar cargas y otros aditivos, eliminar el disolvente mediante un rota vapor, secar el residuo y analizar éste. Estas técnicas

<sup>¶</sup> Este aparato efectúa una destilación a baja presión, no es normal en laboratorios escolares, pero desde 2006 se comercializa para su uso en alta cocina bajo el nombre de "rotaval".

122 José Antonio Martínez-Pons

fuera del alcance de un estudiante de bachillerato que además no es conveniente que manipule disolventes orgánicos. Como ejemplo, se ha medido la densidad de un agitador transparente obteniéndose  $\rho = 1,08 \pm 0,02$  g cm<sup>-3</sup>, lo que sugiere un poliestireno.\*\*

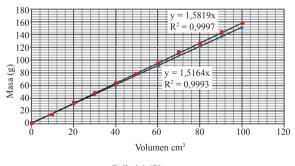
# Medida de la densidad de líquidos, áridos, limaduras o materiales granulosos

Para medir la densidad de los líquidos es suficiente medir la masa de un volumen determinado y, también aquí, el instrumento más adecuado es el picnómetro. Si solo se desea la densidad relativa, es suficiente tarar el aparato vacío, enrasar con el líquido problema, pesar, cambiar por el líquido de referencia, normalmente agua, y pesar. La relación de ambas masas da la densidad relativa. Muchos picnómetros vienen calibrados de fábrica con indicación de su volumen hasta el aforo a la temperatura indicada, lo que facilita el trabajo.

Con los materiales granulares se puede distinguir entre la densidad aparente, resultado de medir la densidad de la muestra como si se tratara de un fluido, y la real, en cuyo caso hay que medir el volumen real ocupado por los gránulos. La comparación entre ambas medidas proporciona una estimación de la *porosidad*, porcentaje de huecos, del material.

#### Medidas de un conjunto de muestras: Mejor recta

En estos casos se trata de medir una serie de muestras de diferente volumen. Una representación masa frente a volumen debe proporcionar una recta que pasa por el origen, cuya pendiente obtenida, ya sea de modo gráfico ya de modo analítico, proporciona la densidad buscada. La experiencia se puede realizar a un nivel muy bajo, simplemente dibujando los puntos e insertando por intuición la mejor recta, insistiéndose siempre en que no se unan los puntos mediante una línea quebrada, y calculando la pendiente gráficamente a partir de dos puntos de esta recta que se evitará que sean puntos experimentales. En niveles más avanzados se pueden dibujar las correspondientes barras de error y hacer el correspondiente análisis de regresión.



Ballotini 470
Ballotini 250
Lineal (Ballotini 470)
Lineal (Ballotini 250)

**Figura 4.** Recta de regresión masa frente a volumen, ajustada a punto fijo (0,0). La pendiente es la densidad aparente de los ballotini, obsérvese la difrente pendiente, mayor para las esférulas de menor radio.

Si se dispone de hoja de cálculo o de un programa semejante, se puede recurrir a esta herramienta siempre que los alumnos hayan demostrado que son capaces de hacerlo sin la ayuda informática. Deben comprender, por lo menos, la importancia del coeficiente de determinación lineal R² (o R) entendiendo que un valor próximo a la unidad indica buena correlación lineal y próximo a cero mala, pero no necesariamente independencia, a la par que tener en cuenta que, con pocos puntos, este coeficiente suele dar valores aceptables, aunque se observe claramente que la tendencia de los puntos no es una recta. Como error en la pendiente se puede aceptar el error más probable en la pendiente que proporciona la propia regresión.††

**Ejemplos:** Se muestran los resultados obtenidos midiendo la densidad aparente de esferillas ("ballotini") de vidrio. adecuadamente tamizadas para que sus diámetros midan en torno a 470 µm. Si no se dispone de este material puede utilizarse, por ejemplo, balines esféricos de PVC o torneaduras de aluminio, no se recomiendan perdigones de hierro ni de plomo. Se hicieron 10 medidas desde los 10 hasta los 100 cm<sup>3</sup> obteniéndose una pendiente, que representa la densidad, de  $1,516\pm0,007$  g cm<sup>-3</sup> (como valor de incertidumbre se toma el error más probable en la pendiente) y un coeficiente de determinación R<sup>2</sup>=0,9998. Repitiendo la medida con bolitas de 250  $\mu$ m entonces los resultados fueron  $\rho = 1.582 \pm 0.006$  g cm<sup>-3</sup>. Midiendo la densidad real con el picnómetro se obtiene  $\rho = 2,44 \pm 0,02 \text{ g cm}^{-3} \text{ y } \rho = 2,44 \pm 0,03 \text{ g cm}^{-3} \text{ respectivamen}$ te, prácticamente el mismo valor, mientras cuanto menor es el tamaño de las partículas, mayor es su densidad aparente Figuras 4 y 5.



Figura 5. Medida de la densidad de los ballotini.

Un análisis más avanzado, con la interpretación de los restantes parámetros que proporcionan los programas de tratamiento de datos, muy interesante al nivel universitario, como un buen entrenamiento al análisis de regresión, parecen fuera de lugar en este trabajo. Para un estudio más profundo puede verse por ejemplo en las referencias 5,6 y 9.

<sup>\*\*</sup> Habría que completar con otras técnicas, algunas muy simples como ensayo a la llama, pH de los vapores, ensayo de solubilidad.

 $<sup>^{\</sup>dag \uparrow}$  Un análisis riguroso de los diferentes parámetros de la regresión pueden encontrarse en cualquier manual por en las referencias 5, 6 y 9.

#### Densidad lineal y superficial

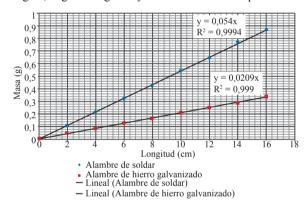
#### Densidad lineal

Se puede medir cortando pedazos del cuerpo problema, pesándolos y hallando gráficamente la pendiente de la recta masa frente a longitud. Una aplicación práctica podría ser evaluar la longitud de un ovillo de hilo, midiendo su densidad lineal y pesando el ovillo (Figuras 6 y 7). Se ha medido un alambre de soldar de 1mm se diámetro obteniendo un densidad lineal  $\lambda$ =0,054±0,003 g cm<sup>-1</sup>.

Un ovillo del mismo, registró una masa de 28,040 g a la que correspondía un longitud  $L=m/\lambda=519,17$  cm Estimada la incertidumbre, la longitud fue  $L=519\pm3$  cm. La medida directa del hilo fue de L=519, 8 cm. Por vía de comparación se ha medido la densidad lineal de un acero galvanizado de 0,57 mm obteniéndose  $\lambda=0,021\pm0,001$  g cm<sup>-1</sup>.

#### Densidad superficial

Es el mismo concepto aplicado a una superficie. La metodología más simple consiste en recortar una serie de cuadrados de una misma cartulina, pesarlos y representar primero la masa frente al lado y después la masa frente la superficie. Los alumnos, a la vista de las figuras, deciden la "mejor" representación. Como es lógico, eligen la segunda y hallan la densidad superficial.



**Figura 6.** Densidad lineal en g/cm de un hilo de estaño de soldadura y de un alambre de hierro galvanizado.

Una aplicación típica es medir la superficie de un país mediante una balanza. Para ello se recorta un rectángulo del mismo papel en que esta dibujado el mapa y se pesa, a continuación se recorta el mapa del país, se pesa, se establece la correspondiente proporción entre ambas masas y superficies y se aplica el factor de escala. El método no es muy preciso, con una incertidumbre intrínseca debida al carácter fractal del perímetro del mapa, pero tampoco se requiere más. En esta línea se propone como aplicación el cálculo aproximado de integrales.

#### Cálculo de integrales con una balanza

Es corriente confundir el concepto de integral con el de primitiva. No es momento éste de extenderse, pero integral es la medida de un área, en tanto que primitiva de una función es otra función que derivada da la primera. Si se conoce la primitiva de una función, entonces la regla de Barrow permite el cálculo inmediato de la integral entre dos determinadas abscisas. Existen sin embargo muchas funciones

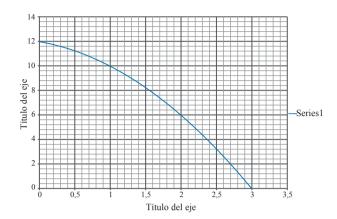


Figura 7. Recinto que se integra.

integrables que carecen de primitiva, en estos caso no puede recurrirse a la regla de Barrow y hay que recurrir al cálculo numérico, por ejemplo métodos de los rectángulos, de los trapecios, de Simpson.<sup>9</sup>

Aquí se propone una aproximación utilizando el concepto de densidad superficial. Para ello se dibujará la región que se desea integrar. Puede usarse la hoja de cálculo. Se recortará el rectángulo en que se incrusta el recinto a integrar y se calculará su área utilizando las unidades en que se ha representado. Se pesará este rectángulo. Se recortará el recinto a integrar, se pesará el recorte y la correspondiente proporcionalidad dará la integral.

**Ejemplo:** Cálculo de la integral entre 0 y 3 de la parábola  $y=-x^2-x+12$ , o lo que es lo mismo, el área del recinto limitado por la parábola y los semiejes positivos (Figura 8). Si se integra según la regla de Barrow:

$$\int_0^3 (-x^2 - x + 12) dx = -\frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2} + 12x \Big|_0^3 =$$

$$= -9 - 4.5 + 36 = 22.50u^2$$

El rectángulo tiene un área, corregida la escala, de  $3.5 \times 14 = 49 \text{ u}^2$ . Su masa es 2.455 g y su densidad superficial  $\lambda = 2.455/49 = 0.050 \text{ g/u}^2$ .

Recortado el sector de parábola, su masa es 1,130 g por tanto el área del sector, ya corregida la escala, vale:

 $A=1,130/0,050=22,55 \text{ u}^2$ .

Como se puede ver, hay una gran concordancia. Si no se dispone de balanzas con precisión del mg es conveniente utilizar un papel más bien grueso. (Figura 8).

Aquí se ha utilizado papel de fotocopia normal.





Figura 8. Pesada del rectángulo y del recinto.

124 José Antonio Martínez-Pons

#### Otros métodos de medida de la densidad no basados en su definición

#### Empuje arquimediano A

Se requiere un dinamómetro o una balanza hidrostática, muy poco frecuente en los laboratorios escolares.

Las operaciones necesarias son pesar el cuerpo en el aire, peso real P<sub>o</sub> y pesarlo sumergido en un líquido de referencia. Se observará que el registro del dinamómetro, peso aparente,  $P_a$  es menor que  $P_o$ . Este peso aparente es igual al peso real menos el empuje.

$$P_a = P_o - E$$

A su vez el empuje es  $E = gV\rho_L$ , siendo V el volumen sumergido g la gravedad y  $\rho_I$  la densidad del fluido. Si el cuerpo está completamente sumergido el volumen de fluido desalojado es el mismo que el del cuerpo y el empuje es igual a la diferencia entre el peso real y el peso aparente entonces,

$$V = \frac{E}{g\rho_L} = \frac{P_0 - P_a}{g\rho_L}$$

$$\rho_C = \frac{m}{V_C} = \frac{\frac{P_0}{g}}{V_C} = \frac{\frac{P_0}{g}}{\frac{P_0 - P_a}{g\rho_L}} = \frac{P_0 \rho_L}{P_0 - P_a}$$

Para obtener el peso real se requeriría pesar el cuerpo en el vacío porque el aire es un fluido y ejerce un cierto empuje, pero en general, este empuje se puede despreciar y tomar como peso real el peso en el aire. El principal inconveniente, supuesto que se disponga de un dinamómetro adecuado, es que el sólido debe ser insoluble y más denso que el líquido de referencia.

#### Empuie arauimediano B

El método anterior se puede modificar de modo que permite utilizar y visualizar de un modo práctico la tercera ley de Newton, es decir, el principio de acción y reacción. En este caso se precisa simplemente un recipiente con teniendo un liquido de referencia y una balanza electrónica.

Cuando el cuerpo problema se suspende de un filo hilo y se introduce completamente en el líquido este ejerce sobre el empuje arquimediano, pero en según la 3ª ley el cuerpo ejerce una reacción igual y de sentido contrario sobre el liquido que es precisamente registrada por la báscula. En consecuencia el empuje se lee directamente y la formula final del apartado anterior se reduce a  $\rho_c = \frac{P_0}{E} \rho_L$ , si se desea solo la densidad relativa respecto al líquido de referencia es suficiente con calcular la primera fracción.

**Ejemplo:** Se ha tomado un tornillo y su tuerca.

$$P_0 = 10,92 \text{ g}; E = 1,48 \text{ g}$$

$$\rho_C = \frac{P_0}{E} \rho_L = \frac{10,92}{1,48} = 7,38 \times 0,98 = 7,2 \pm 0,1 \text{gcm}^{-3}$$

Con este método no es necesario que el cuerpo sea más denso que el líquido, basta con insertarle una pequeña varilla rígida e introducirlo en el líquido. Como experimento comprobatorio se ha utilizado un cilindro de madera barnizado de 4,5 cm de altura y 2,1 cm de diámetro. La medida geométrica da un volumen de 15.58 cm<sup>3</sup> la medida de la masa de agua desalojada es de 15,15 g que corresponde a un volumen de 15,46 cm<sup>3</sup>.

#### Aerometría

Uso de un densímetro (o aerómetro) (sc.ehu.es.)<sup>10</sup> que no es sino un cuerpo de masa constante y con una escala graduada de de modo que registra el hundimiento del cuerpo en el líquido y con adecuado calibrado permite la lectura directa. Se basa también en el principio de Arquímedes. El principal problema de estos instrumentos, a parte de su fragilidad al estar construidos con vidrio, es que normalmente operan en un rango muy reducido de densidades. (Muchas veces vienen optimizados para un tipo concreto de líquidos, así los alcoholímetros que ya vienen calibrados para la medida directa del grado alcohólico) Su ventaja es la rapidez de su uso. Puede proponerse a los alumnos que fabriquen uno utilizando un tubito de plástico obtenido de una carcasa de bolígrafo fuera de uso, unos perdigones, un poco de plastilina y una varilla ligera. La mayor dificultad está en calibrarlo adecuadamente. lo que se hará con dos disoluciones patrón, que constituirán los extremos del intervalo de utilidad del aparato (Figura 9). Construir un aparato ayuda a entender su funcionamiento y el que los estudiantes interesados en la ciencia experimental desarrollen una cierta habilidad manual, puede serles de utilidad en un futuro.

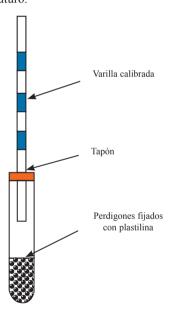


Figura 9. Densímetro artesanal.

#### Método de los vasos comunicantes

En este método se utiliza el concepto de presión hidrostática. Si se vierten en un tubo en "U" dos líquidos inmiscibles y se deja que se separen, se distribuirán en los dos brazos de modo que sobre los punto A y B situados al mismo nivel coincidiendo B con la separación entre ambos líquidos, actúa la misma presión que de acuerdo con las leyes de la hidrostática vale  $P_0 + g\rho_1 H_1 = P_0 + g\rho_2 H_2$  siendo  $P_0$  la presión atmosférica. Operando y reduciendo términos:

$$\rho_2 = \frac{H_1}{H_2} \rho_1$$

Es decir, las alturas de los líquidos son inversamente proporcionales a sus respectivas densidades (Figura 10).

Este método, aunque muy interesante desde el punto de vista didáctico por sus implicaciones con la hidrostática, es poco preciso e implica problemas sobre todo de limpieza del material. Es conveniente, una vez vertidos los líquidos, fijar y equilibrar con la ayuda, por ejemplo, de una plomada el tubo y tomando una cartulina como referencia y un rotulador, marcar los niveles, para medir después con más comodidad. A veces la interfase no queda muy clara, e incluso se forman burbujas en ella que suelen desaparecer con el tiempo. Con las manipulaciones, es posible que se produzca cierta emulsión. Aquí se presenta la medida de la densidad de un aceite de girasol frente al agua. (Altura de la columna de agua: 5,9 cm; altura de la columna de aceite 6,6 cm).

$$\rho_{aceite} = \frac{5.9}{6.6} \rho_{H_2O} = 0.89 \rho_{H_2O}$$

Puede teñirse el agua para distinguir mejor los dos líquidos. En vez de aceite vegetal, puede hacerse con otros líquidos inmiscibles.

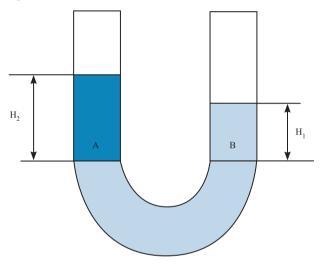


Figura 10. Esquema de medida con unos vasos comunicantes.

#### Variación de la densidad con la temperatura

Se trata de medir la densidad de una misma sustancia y verificar su dependencia, al menos cualitativa con la temperatura. Operando con el material habitualmente disponible, la reproducibilidad es baja, como en muchos experimentos relacionados con la termología, sobre todo porque los termó-

metros usuales suelen tener bastante inercia térmica y si se trabaja en condiciones de medir con sencillez, la temperatura cambia durante el experimento. Queda ahí pues la idea.

Ejemplo: Variación de la densidad, el agua con la temperatura.

Líquido: Agua corriente T:65 °C masa picnómetro vacío: 41,95 g; Masa picnómetro lleno: 87,19 g Masa agua: 47,19 g Densidad: 0,94±0,03 g cm<sup>-3</sup>.

Temperatura: 3,3 °C masa picnómetro vacío: 41,95 g; Masa picnómetro lleno: 91,30 g Masa agua: 49,27 g Densidad 0,98±0.03 g cm<sup>-3</sup>.

#### **Conclusiones**

La medida de la densidad puede constituir un buen recurso didáctico, tanto para iniciarse en el manejo de técnicas de medida, regresión y cálculo de errores como en el estudio de las propiedades físicas que permiten medir esta magnitud, además de facilitar la comprensión de otras magnitudes específicas, como la densidad de carga.

También para explicar otras aplicaciones que se apoyan en la densidad como técnicas de separación de materiales diferentes, tan importantes en el reciclado de basuras o en la minería y sobre todo recordar que el análisis químico es posible gracias a la existencia de propiedades específicas de las especies químicas y la densidad es una de ellas, por supuesto, no la única, ni la más precisa pero que es, en general, fácil de medir.

#### Bibliografía

- I. Puig. Curso de química general. 7ª edición. Manuel Marín Editor. 1946, pp 27–28.
- E. Vitoria. Manual de química moderna. Eds. Tip. Cat. Casals. 1944, pp 31–32.
- J. García Cazorla, M. Girau. Técnicas usuales de análisis en enología, Panreac Química S. A. 1995.
- 4. J. A. Martinez Pons, An. Quím 2009, 105 (1), pp 221–226.
- V. P. Spiridonov, A. A. Lopatkin. Tratamiento matemático de datos físico químicos. MIR. Moscú 1973, Caps. I-IV, V y VI.
- 6. R. Gómez Antón, J. R. Gil Bercero. Los plásticos y el tratamiento de los residuos. Aula Abierta UNED 1997, pp 285–28.
- 7. A. A. Pérez Dorado, Identificación de plásticos. 1995, Video UNED.
- 8. M. R. Spiegel *Probabilidad y estadística*. Series Schaum. McGraw Hill **1976**, Cap 8.
- 9. E.A. Volkov. Métodos numéricos MIR Moscú 1980, pp 78-94.
- http://www.sc.ehu.es/sbweb/fisica/fluidos/estatica/aerometro/ aerometro.htm



# El Año Internacional de la Química: una celebración útil para la docencia de la química en la educación secundaria

Alberto Aguayo, Covadonga Gutiérrez

Resumen: La celebración del Año Internacional de la Química (AIQ) en 2011 ha supuesto un marco excepcional para la realización de actividades por y para el alumnado de la educación secundaria. En este trabajo se enumeran y detallan las realizadas en el IES Valle del Saja, así como algunas de las reflexiones que suscita la relación entre una mayor presencia de la química durante un año en la comunidad educativa y los resultados conseguidos.

Palabras clave: Año Internacional de la Química, educación secundaria, actividades y experimentos en química, tabla periódica.

Abstract: The celebration of the International Year of Chemistry (IYC) has been a unique opportunity for activities by and for students of secondary education. In this paper we list and specify those in the IES Valle del Saja and some of the reflections arising from the relationship between increased presence of chemistry for a year in the educational community and the results achieved.

Keywords: International Year of Chemistry, secondary education, activities and experiments in chemistry, periodic table.

#### Introducción y objetivos

Este artículo nace con la finalidad de mostrar el modo en que los alumnos y los profesores del IES Valle del Saja¹ de Cabezón de la Sal, en Cantabria, se sumaron a la celebración, en el año 2011, del Año Internacional de la Química (AIQ).

Cuando en diciembre de 2008 la 63ª Asamblea General de las Naciones Unidas, con el apoyo de la IUPAC y de la UNESCO, aprobaba la resolución que proclamaba el año 2011 como AIQ, bajo el lema Química: nuestra vida, nuestro futuro, cuatro fueron los objetivos que quedaron propuestos: 1) incrementar la apreciación y el entendimiento por parte del público de la química en las necesidades del mundo; 2) fomentar el interés de los jóvenes por la química; 3) generar entusiasmo por el potencial y futuro creativo de la química; 4) celebrar, por una parte, el rol de la mujer en la química o en eventos históricos de esta ciencia, incluido el centenario de la concesión del Premio Nobel de Química a Marie Curie; por otra, el centenario de la fundación de la Asociación Internacional de Sociedades químicas, precursora de la IUPAC (International Union of Pure and applied Chemistry).





A. Aguayo

C. Gutiérrez

Departamento de Física y Química del IES Valle del Saja (Cabezón de la Sal, Cantabria).

C-e: fqsaja@gmail.com

Recibido: 20/04/2012. Aceptado: 30/04/2012.

En el Departamento de Física y Química del IES Valle del Saja pensamos que la educación secundaria comprende un tramo educativo en el que los alumnos suelen manifestarse especialmente sensibles y receptivos ante lo que se persigue en el aula, de tal modo que, con las actividades adecuadas y la correcta dirección de las mismas, es posible alcanzar una interacción profesor-alumnos que conduzca a que éstos encuentren en la materia que se aborda un atractivo y unas posibilidades que, de otra manera, con el trabajo habitual en el aula, no aciertan siquiera a sospechar. Es por esta razón por la que, desde que fuimos conocedores de la resolución que declaraba el año 2011 como AIQ, nos propusimos desde el Departamento desarrollar algunas actividades.

La finalidad de las actividades debía residir en alcanzar, con carácter fundamental, uno de los objetivos al que antes se ha aludido, concretamente el que persigue fomentar entre los jóvenes, en este caso nuestros alumnos, el interés por la química. Entendimos que el modo de conseguirlo radicaba en lograr una presencia continuada de la química en nuestra comunidad educativa, superior así a la que acostumbra tener cualquier otro año. No se trataba solamente de realizar tareas de divulgación, sino también de contribuir al verdadero *leitmotiv* del AIQ, llevar a la sociedad a una reflexión profunda sobre el papel de la química en nuestras vidas; igual que se resumía en su lema, tratar de ver en qué medida somos y dependemos de la química.

La asignatura de física y química se imparte en 3° y 4° de ESO, y en 1° de bachillerato en la modalidad de *ciencias y tec-nología*; además, en 2° de bachillerato y en la misma modalidad se cursan las asignaturas de química y física. Contábamos por tanto con los alumnos de estos niveles educativos, con edades comprendidas entre los 14 y 17 años, para llevar a cabo el proyecto; también como espectadores, en el caso de algunas actividades, contábamos con los alumnos del resto de niveles educativos –1° y 2° de ESO–, así como con todos aquellos que no habían optado por la física y/o química como materias de su currículo. Además participaron, prestando su colaboración, los profesores de otros departamentos.

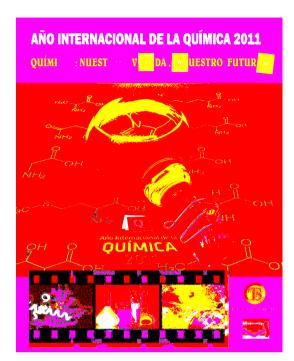


Figura 1. Cartel que anuncia la celebración del AIQ en el Instituto.

Procedimos así a la elaboración de un programa de actividades que nos ocuparía dos cursos escolares, el 2010/11 y el 2011/12. La enumeración de las actividades que se incluyeron, así como su desarrollo y detalle, es lo que se expone en lo que sigue. Muchas de ellas resultan difíciles de presentar aquí de manera adecuada dado su marcado carácter multimedia, por ello será obligada la inclusión de enlaces web en el apartado de referencias.

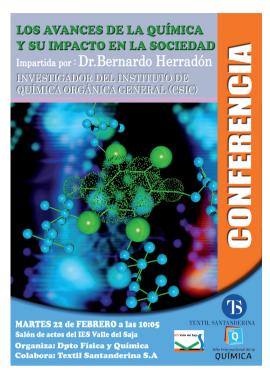
Una forma de iniciar el proyecto consistió en presentarlo a nuestra comunidad educativa (Figura 1).

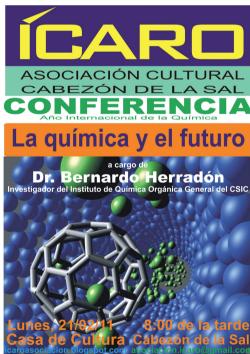
#### Inauguración del AIQ en el IES Valle del Saja y en la villa de Cabezón de la Sal

Había que comenzar por la inauguración oficial del AIQ y, de esta manera, del programa de actividades. Para ello contamos con la inestimable colaboración de Bernardo Herradón,<sup>2,3</sup> investigador científico del CSIC, hoy también editor general de esta revista.

En su visita a nuestro centro, en calidad de ponente, disertó acerca de algunos de los variados aspectos que ofrece la química a través de dos conferencias. En una de ellas, celebrada en el instituto,<sup>4</sup> se dirigió a los alumnos y profesores del centro; en otra, promovida también a través de la asociación cultural *Ícaro* de Cabezón de la Sal, a los vecinos de la villa.

La primera, de título *Los avances de la química y su impacto en la sociedad: beneficios en nuestra vida cotidiana y enseñanzas sobre la tabla periódica*,<sup>5</sup> desarrolla un breve análisis histórico de los avances en esta ciencia e incide, principalmente, en algunas de sus múltiples aplicaciones en muy diferentes ámbitos. En lo que respecta a la segunda, *La química y el futuro*,<sup>6</sup> muestra el panorama de las implicaciones de la química en la sociedad del futuro (Figura 2).





Colabora: Textil Santanderina S.A

Figura 2. Carteles que anuncian la celebración de las conferencias inaugurales.

Nos pareció que en esta jornada inaugural debía mostrarse la cara experimental de la química para lo cual hicieron su intervención los alumnos de 2º de bachillerato desarrollando y explicando dos experiencias consideradas como hitos en la historia de esta ciencia, *la electrolisis del agua* y *la síntesis del nailon*. Detallamos el contenido de estas experiencias en un apartado posterior de este artículo.

Durante la estancia de Bernardo Herradón en Cabezón los alumnos de bachillerato tuvieron además la oportunidad de entrevistarle; pudieron así escuchar de primera mano los intereses relacionados con la química de un químico dedicado a tareas de investigación y divulgación. El contenido de la entrevista<sup>7</sup> constituyó además una de las colaboraciones en la revista del instituto con motivo del AIQ.

#### Blog recopilatorio de actividades y noticias químicas

Una buena manera de archivar todas las actividades que se realizaron en el centro con motivo del AIQ consistió en publicarlas en un blog. De este modo se creó *A hombros de gigantes*,<sup>8</sup> en el que se colgó información diversa relacionada con las actividades del AIQ.

Por otra parte sirvió como medio y soporte durante todo el año para una de las actividades programadas, concretamente la búsqueda, por parte de los alumnos, de noticias de actualidad correspondientes a cualquiera de los ámbitos en los que la química proyecta su actividad. De esta manera se intentó conseguir que nuestros alumnos conocieran, a través de pequeñas indagaciones e investigaciones, el desarrollo de la química y su contribución a los avances científicos que se producen en nuestro mundo.

Pero, además, con las publicaciones en el blog nuestros alumnos han logrado convertirse en pequeños divulgadores de la química –al menos por un año— entre el resto de compañeros y profesores del centro.

#### Conferencias y exposiciones

En la villa de Cabezón de la Sal se encuentra ubicada una empresa química perteneciente al sector textil, *Textil Santanderina*, *S.A.*<sup>9</sup> Su gerente y director general, Juan Parés, fue el ponente en el instituto de la conferencia de título *La empresa y la sociedad*, <sup>10</sup> con la que se dirigió a los alumnos de 4º de ESO y bachillerato, exponiéndoles, a grandes rasgos, las características del mundo empresarial y, acercándose más a los intereses propios de alumnos de esa edad, los requisitos, en lo concerniente a formación y capacidades, que se buscan entre los jóvenes que deciden optar por su desarrollo profesional en la empresa. También, y aunque su disertación estuvo más bien referida a cualquiera de los ámbitos de trabajo empresarial, hizo hincapié en la formación específica a la que podían acceder los alumnos con la finalidad de desarrollar su trabajo en el terreno de la química.

De este modo quedó plasmada la colaboración de *Textil Santanderina* y de su equipo directivo con la celebración del AIQ en el instituto, aunque éste no fue el único aporte ya que contamos también tanto con su apoyo económico como de suministro de algunas sustancias químicas de las que no se disponía en los laboratorios del centro y ello permitió la realización de otras actividades.

Pudimos disponer de la exposición itinerante *Entre moléculas*, preparada por el CSIC para conmemorar el AIQ y comisariada por Bernardo Herradón. La exposición consta de 21 paneles informativos cuya finalidad reside en la contribución a la divulgación y didáctica de la química, y está dirigida especialmente a los estudiantes de secundaria. La exposición también aporta además la posibilidad de trabajarla con el apoyo de una serie de unidades didácticas realizadas

conforme a los diferentes niveles de secundaria y de bachillerato. La exposición estuvo en nuestras instalaciones durante un mes y durante ese tiempo, la disfrutamos y trabajamos con los alumnos en el aula (Figura 3).<sup>11</sup>



Figura 3. Exposición Entre moléculas en el IES Valle del Saja.

#### Experiencias y demostraciones químicas

Una de las actividades destacadas consistió en la realización de diferentes experiencias y demostraciones químicas; ello corrió a cargo de los alumnos de 2º de bachillerato. Intentamos así alcanzar lo que se recoge en la siguiente cita y que puede considerarse una máxima de las ciencias experimentales, *No hay nada que impresione tanto la mente con hechos químicos como la exposición de experiencias interesantes* (Samuel Parkes, 1816).

Algunas de las experiencias fueron expuestas, según quedó indicado antes, durante la jornada inaugural; el resto se desarrollaron a lo largo de varias semanas en el transcurso de algunos de los recreos, con entrada libre para todo aquel profesor o alumno que gustara de presenciarlas. Estas sesiones semanales las denominamos *Los recreos de la química*. Todas ellas quedaron registradas en vídeo y recogidas en el blog.

Los dos experimentos de la inauguración fueron:

#### La síntesis del nailon<sup>12,13</sup>

Las investigaciones sobre la seda condujeron, en 1930, a la Dupont Corporation y a uno de sus químicos más brillantes, Wallace Hume Carothers, a la síntesis del nailon. El nailon (una poliamida con una estructura similar a la de la seda) había sido fabricado y no parecía tener ninguna propiedad especialmente útil, de tal modo que fue puesto aparte en un estante sin patentarlo. <sup>14</sup> Más tarde, podría decirse por circunstancias azarosas, se descubrieron las características del polímero y, en consecuencia, su verdadero potencial. Éste fue tal que a raíz de su introducción en la Feria Mundial de Nueva York de 1939, se convirtió en uno de los más espectaculares artículos de consumo de todos los tiempos.

Reprodujimos la síntesis del nailon 6-10 a través de un experimento, <sup>15-19</sup> con variaciones respecto al original, que esquematizamos así:

n H<sub>2</sub>N(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>NH<sub>2</sub> (ac)+n ClOC(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>COCl (ciclohexano) → H<sub>2</sub>N[(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>NHCO(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>]<sub>n</sub> COCl + n HCl (ac) nailon 6-10

Se pudo comprobar la obtención de las largas hebras de nailon (Figura 4).



Figura 4. Obtención de una hebra de nailon 6-10 utilizando fenolftaleína que colorea la fase acuosa alcalina.

#### La electrolisis del agua<sup>20,21</sup>

Los experimentos correspondientes al análisis y la síntesis del agua se convirtieron en la época de Lavoisier en uno de los emblemas de las nuevas ideas químicas. Así, con sus nuevos y costosos instrumentos, Lavoisier repitió estas dos operaciones durante los días 27 y 28 de febrero de 1785, frente a unos treinta estudiosos, entre los que se encontraban una docena de testigos elegidos por la *Académie des Sciences*. Lavoisier consideraba que la coincidencia de resultados del análisis y la síntesis de una sustancia era suficiente para determinar con certeza cuál era su composición. Sin embargo los resultados cuantitativos que obtuvo del análisis y la síntesis del agua, aunque bastante semejantes, no eran idénticos.<sup>22</sup> A raíz del descubrimiento en 1800 de la pila eléctrica por el físico italiano Alessandro Volta, pudo desentrañarse la composición exacta del agua mediante electrolisis.

Para nuestra experiencia<sup>16,23-25</sup> utilizamos un voltámetro de Hoffman que nos permitió llegar a comprobar la proporción volumétrica 2:1 en la que se encuentran combinados el hidrógeno y el oxígeno (Figura 5), respectivamente, en el agua.

Las ecuaciones químicas representativas de las semirreacciones en cada uno de los electrodos son:

Ánodo: 
$$2 \text{ H}_2\text{O (l)} \rightarrow \text{O}_2 \text{ (g)} + 4 \text{ H}^+ \text{ (ac)} + 4 \text{ e}^-$$
  
Cátodo:  $4 \text{ H}_2\text{O (l)} + 4 \text{ e}^- \rightarrow 2 \text{ H}_2 \text{ (g)} + 4 \text{ OH}^- \text{ (ac)}$ 

Y la correspondiente al proceso global:

$$2 H_2O(1) \rightarrow O_2(g) + 2 H_2(g)$$



Figura 5. Proporción volumétrica para los gases obtenidos mediante la electrolisis del agua observada por una estudiante.

Los experimentos que se desarrollaron en *Los recreos de la química* se enmarcan bajo los dos epígrafes siguientes:

#### La espontaneidad de los procesos químicos<sup>26,27</sup>

Se pusieron aquí en práctica una batería de reacciones químicas de las que se quiso resaltar, por una parte, lo común a todas ellas, a saber, su carácter exotérmico y espontáneo, y por otra, las diferencias relativas al modo en que llegan a manifestar esa espontaneidad. Los alumnos de 2º de bachillerato explicaron como preámbulo a la audiencia el concepto de espontaneidad, así como otros relacionados con él como los de energía química, variaciones de entropía, velocidad de reacción, energía de activación...

El resumen y clasificación de las diferentes reacciones lo presentamos así:

1. Espontáneas a temperatura y presión ambientes.<sup>28</sup>

Reacción entre el permanganato de potasio y la glicerina: 15,16,29

14 KMnO<sub>4</sub>(s)+4 C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>(OH)<sub>3</sub>(l) 
$$\rightarrow$$
 7 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(s)+7 Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub>  
(s)+5 CO<sub>2</sub>(g)+16 H<sub>2</sub>O (g)

2. Espontáneas tras el aporte inicial de energía térmica.<sup>28</sup>

Síntesis del sulfuro de zinc (Figura 6) a partir de sus elementos: 15,30,31

$$8 \text{ Zn (s)} + S_8 (s) \rightarrow 8 \text{ ZnS (s)}$$

También se producen:

 $Zn(s)+\frac{1}{2}O_2(g) \rightarrow ZnO(s)$  (amarillo en caliente, blanco en frío)

$$S(s)+O_2(g) \rightarrow SO_2(g)$$

- 3. Espontáneas tras el aporte inicial de energía mecánica.<sup>32</sup>
  - 3.1. Reacción entre el fósforo rojo y el clorato de potasio:  $^{15,33}$  3  $P_4$  (s, rojo)+10 KClO $_3$  (s)  $\rightarrow$  3  $P_4$ O $_{10}$  (s)+10 KCl (s)
  - 3.2. Descomposición del triyoduro de nitrógeno: 15,34,35 Previamente se sintetizó el compuesto en el laboratorio.
    - a. Síntesis del NI<sub>3</sub>:

$$3 I_{2}(s) + 2 NH_{3}(ac) \rightarrow NI_{3} NH_{3}(s) + 3 HI(ac)$$

b. Descomposición del NI<sub>3</sub>:

$$2 \text{ NI}_3(s) \rightarrow N_2(g) + 3 \text{ I}_2(g)$$

- Espontáneas tras la adición de un catalizador o aporte de medio acuoso.<sup>36</sup>
  - 4.1. Síntesis del yoduro de zinc (Figura 7) a partir de sus elementos: 15,37

$$Zn(s)+I_2(s) \rightarrow ZnI_2(s)$$

4.2. Descomposición del nitrato de amonio y formación del óxido de zinc:

$$Zn(s)+NH_4NO_3(s) \rightarrow N_2(g)+ZnO(s)+2H_2O(g)$$

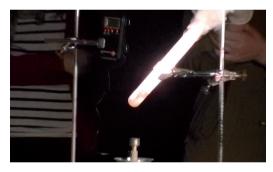
 Espontáneas tras el incremento de temperatura y de la concentración de alguno de los reactivos.<sup>38</sup>



**Figura 6.** Síntesis del sulfuro de zinc después de poner en contacto los elementos constituyentes con una varilla de vidrio caliente.



**Figura 7.** Estudiantes demostrando la síntesis del yoduro de zinc en la que, simultáneamente, consiguen la sublimación de parte del yodo debido a la energía térmica desprendida en el proceso.



**Figura 8.** Reacción de combustión de la sacarosa (gominola) previa obtención de oxígeno mediante la descomposición de clorato de potasio.

Combustión de la sacarosa (Figura 8) utilizando como comburente el oxígeno liberado en la descomposición térmica de clorato de potasio: 15,39

2 KClO<sub>3</sub> (s) 
$$\rightarrow$$
 2 KCl (l)+3 O<sub>2</sub> (g)  
C<sub>12</sub>H<sub>22</sub>O<sub>11</sub> (s)+12 O<sub>2</sub> (g)  $\rightarrow$  12 CO<sub>2</sub> (g)+11 H<sub>2</sub>O (g)

#### La energía química<sup>27</sup>

En este caso se centró la atención en el signo del intercambio de energía que se produce en los procesos que se detallan a continuación:<sup>15</sup>

#### 1. Endotérmicos. 40

- 1.1. Ba(OH)<sub>2</sub> 8 H<sub>2</sub>O (s)+2 NH<sub>4</sub>NO<sub>3</sub> (s) $\rightarrow$ Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (s)+ 2 NH<sub>3</sub> (ac)+10 H<sub>2</sub>O (l).
- 1.2. Disolución de nitrato de amonio (NH<sub>4</sub>NO<sub>3</sub>) (Figura 9).
- 1.3. Aplicación comercial del proceso anterior en las denominadas "bolsas de frío instantáneo".



**Figura 9.** Proceso de disolución acuosa del nitrato de amonio y control instantáneo del descenso de temperatura.



Figura 10. Reacción entre el óxido de calcio y el agua y medida del aumento de temperatura.

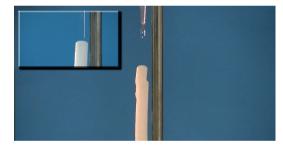


Figura 11. Formación de una "estalagmita" de acetato de sodio durante el proceso de cristalización que se produce al dejar gotear una disolución acuosa sobresaturada de acetato de sodio trihidratado.

- 2. Exotérmicos.41
  - 2.1. HCl (ac)+NaOH (ac) $\rightarrow$ Na<sup>+</sup>(ac)+Cl<sup>-</sup>(ac)+H<sub>2</sub>O (l).
  - 2.2. CaO (s)+ $H_2O$  (l)  $\rightarrow$  Ca(OH), (ac) (Figura 10).
  - 2.3. Al igual que en el caso de los procesos endotérmicos se analizó una de las aplicaciones que se comercializan haciendo uso de reacciones químicas similares a la anterior, las llamadas "bolsas (o latas) de calor instantáneo".

#### 3. Reversibles. 42

Preparación y posterior cristalización de una disolución sobresaturada de un sólido (acetato de sodio) en un líquido (agua) (figura 11). Nuevamente se hizo el estudio de alguna aplicación comercial a través de las "bolsas de calor reversible".

#### La Tabla Periódica<sup>43</sup>

Éste fue, sin duda, el trabajo que vertebró el año. Las razones fueron varias pero podríamos resaltar dos; por una parte, el símbolo que representa y la herramienta de trabajo que supone para la química, y por otra, el hecho de ser la actividad en la que participaron la totalidad de los alumnos de las asignaturas de física y química, desde 3º de ESO hasta 2º de bachillerato.

En el desarrollo del proyecto contamos con la colaboración del jefe del Departamento de Educación Plástica y Visual. Pudimos de este modo cuidar la parte estética del tra-





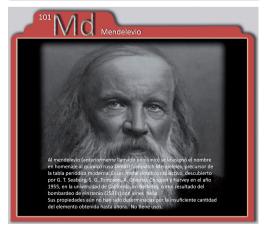


Figura 12. Elementos químicos pertenecientes a la tabla periódica del IES Valle del Saja.

bajo plasmada en el diseño de las "fichas" correspondientes a cada elemento químico.

Cada alumno indagó sobre un elemento y reflejó el resultado de su investigación en una ficha elaborada utilizando el programa Photoshop®. La información debía incluir:

- Etimología del nombre.
- Descubrimiento: fecha, autor, lugar, procedimiento...
- Usos y aplicaciones más importantes.

Además debían insertarse imágenes correspondientes al elemento en su estado natural (o en alguna de sus combinaciones importantes) y/o a alguna de sus aplicaciones destacadas (Figura 12).

Una vez fue dada por concluida la elaboración de los 118 elementos químicos, se procedió a construir con ellos la tabla periódica. An Necesitábamos para exponerla una superficie amplia (6 m x 3 m), instalándose en una de las paredes del instituto. En la inauguración de recibimos la visita del Consejero de Educación de Cantabria y de la Alcaldesa de Cabezón de la Sal.

La tabla periódica ha quedado expuesta de manera permanente (Figura 13) siendo motivo de visualización y consulta no sólo para su utilización en la asignatura de física y química sino también por parte de los profesores de otros departamentos como lenguas clásicas, lengua castellana o ciencias sociales, cuando solicitan de sus alumnos alguna investigación relacionada con mitologías, etimologías o la importancia histórica de algún elemento.

#### El día de la química<sup>46,47</sup>

Con motivo de la celebración el 15 de noviembre de la festividad de San Alberto Magno, patrono, entre otros, de los estudiantes de ciencias químicas, y dado que con esa misma fecha se celebra oficialmente en España en los últimos años el día de la química, decidimos sumarnos a esa celebración con un conjunto de actividades que simultáneamente servirían para, en cierta manera, clausurar el Año.

La actividad principal consistió en el desarrollo de una feria de experiencias químicas, donde participaron todos los alumnos del centro; algunos de ellos, concretamente alumnos de física y química de diferentes niveles, realizaban y explicaban los experimentos; el resto se convirtieron en espectadores y oyentes de los mismos. Para ejecutar el proyecto se utilizaron las dependencias del polideportivo que se encuentra ubicado en el recinto del Instituto de modo que, durante una gran parte de la mañana lectiva, los alumnos de los diferentes niveles fueron acercándose hasta cada uno de los puestos que albergaba cada experimento con la finalidad de que sus responsables se lo mostraran y explicaran. La actividad resultó altamente satisfactoria pues se puso de manifiesto el enorme interés que muestran los alumnos por presentar a sus compañeros y profesores el trabajo del que ellos se sienten protagonistas.

El contenido de la feria química (Figura 14) se resume en las siguientes experiencias: 15,16,23,48-52

- Electrolisis del agua y del yoduro de potasio.
- Descomposición térmica del tiocianato de mercurio (II).
- Descomposición catalítica del peróxido de hidrógeno.

- Formación de un espejo de plata.
- La reacción cronometrada Old-Nassau.
- La reacción oscilante de Briggs-Rauscher.
- La botella azul: reacción redox glucosa-azul de metileno.
- Obtención y recogida de dióxido de carbono.
- La reacción química y el color: reacciones ácido-base, de precipitación y de formación de complejos.
- La quimioluminiscencia del luminol.
- Pilas de Volta, de Daniell y otras elaboradas con materiales caseros.

Una vez finalizada la feria, alumnos y profesores, asistimos en el salón de actos a la proyección de un vídeo-documental en el que distintos profesores de nuestro centro ponían voz a otros tantos químicos de importancia histórica (Figura 15). Su posterior difusión creó un gran interés en nuestra comunidad educativa, y es que el apunte biográfico expresado a través de rostros conocidos produce un acercamiento y una credibilidad que a veces no se logra con la lectura de una fría biografía basada únicamente en datos profesionales.

El video-documental lo denominamos *Gigantes de la química*<sup>53</sup> y en él quedaron brevemente retratados: Marie Curie, Ernest Rutherford, Amedeo Avogadro, Linus Carl Pauling, Joseph Louis Proust, Robert Boyle, Humphry Davy,



Figura 13. Tabla Periódica del IES Valle del Saja.



**Figura 14.** Algunos de los experimentos desarrollados en el transcurso de la *feria química* (electrolisis, recogida de dióxido de carbono, quimioluminiscencia, descomposición de peróxido de hidrógeno).



Emilia J. de los Galanes Profesora de Psicología



Alberto Muñoz Profesor de Ed. Plástica

**Figura 15.** Instantáneas correspondientes al vídeo-documental *Gigantes de la química* en las que dos profesores ponen voz a Marie Curie y Antoine Laurent de Lavoisier, respectivamente.





Figura 16. Presenciando el desarrollo y el resultado final de una aluminotermia.





**Figura 17.** Estudiantes soltando globos de helio que portan imágenes de los elementos químicos de la tabla periódica elaborada por ellos.

Rosalind Franklin, Dimitri Ivánovich Mendeléiev, Louis Pasteur, Alfred Nobel, John Dalton, Felix Hoffmann y Antoine Laurent de Lavoisier.

A continuación, en el patio del instituto, se llevó a cabo una aluminotermia<sup>54-56</sup> (Figura 16), experimento espectacular más adecuado para espacios exteriores.

Para el final de la jornada preparamos 118 globos de helio de los que colgamos otras tantas miniaturas correspondientes a los 118 elementos de la tabla periódica que los alumnos habían elaborado a lo largo del año (Figura 17). Buscamos, en ese afán de dar presencia a la química, que personas ajenas a nuestro instituto pudieran recoger en algún lugar uno de estos globos y pensar que se celebraba el Año Internacional de la Química.

Por otra parte, esa jornada especial de la química tuvo eco en la prensa local,<sup>57</sup> con lo que nuestros alumnos vieron reconocido su papel de protagonistas además de suponer una contribución más en ese intento de lograr una mayor presencia de la química en nuestras vidas.

#### **Conclusiones**

Las principales conclusiones giran en torno al objetivo que se estipuló como principal en la programación de este proyecto, aunque el desarrollo progresivo de las actividades generó algunas otras que detallamos.

- Con la interrelación profesor-alumno que se establece durante el diseño y preparación de actividades con un objetivo destacado, se consigue una sintonía mayor que la derivada del habitual trabajo en el aula.
- La propuesta al alumno de realización de tareas en las que se le brinda la oportunidad de erigirse en protagonista ante compañeros y profesores, genera en él la manifestación de capacidades y habilidades que se constituyen como un elemento más de aprendizaje a considerar para su futuro académico y laboral.
- Se observa el elevado interés que muestra el alumnado cuando se le presentan campos de investigación o del ámbito laboral, relacionados con alguna disciplina de su currículo académico, que hasta el momento desconocía.
- Se constata que, si nos detenemos en la información de los medios, encontramos de modo permanente noticias en las que quedan recogidos aspectos relacionados de manera determinante con la química. Esto facilita que el alumno manifieste cierta predisposición a detenerse en informaciones de esta índole.
- Se puso de manifiesto el carácter transversal e interdisciplinar de alguno de los trabajos realizados puesto que departamentos didácticos de diferentes disciplinas fijan su atención en ellos con la finalidad de aprovecharlos en algunas de las actividades que, a su vez, proponen a los alumnos.
- En una comunidad educativa la propuesta de actividades extraordinarias genera interés no sólo entre sus miembros, sino también entre sectores del público relacionados como familiares de alumnos y compañeros de la disciplina académica que las promueve.

• Se ha conseguido contribuir no sólo a la divulgación de la química sino también a algo que consideramos incluso de mayor importancia, que esta disciplina haya estado presente en nuestro centro e incluso en nuestra localidad de manera clara y atractiva. Así, se habló y se reflexionó sobre el papel de la química en nuestra sociedad; también, se aprendió química. Todo ello nos condujo a ver esta ciencia desde una perspectiva más ajustada a la realidad y con un mayor grado de libertad.

El desarrollo de este proyecto ha resultado extremadamente gratificante para los profesores y positivo para el desarrollo de las diferentes competencias que han de conseguirse en el alumnado de Secundaria.

Por otra parte, esto es algo que habíamos comprobado con anterioridad como resultado de las actividades que en su día se realizaron en el centro con motivo del *Año Mundial de la Física*. Sin duda alguna la experiencia que derivó de ello ha facilitado la elaboración y posterior desarrollo de las actividades conmemorativas del AIQ.

Los proyectos realizados con el pretexto de cualquiera de las conmemoraciones citadas han generado en nosotros ciertos cambios en nuestro modo de ver y abordar la enseñanza en la educación secundaria. Creemos que estos cambios son positivos por lo que confiamos en que tengan su influencia en nuestra labor docente en los cursos venideros.

#### Bibliografía

- 1. http://bit.ly/KlQeQd, visitada el 25/05/2012.
- 2. http://bit.ly/LuwkAj, visitada el 25/05/2012.
- 3. http://www.losavancesdelaquimica.com/, visitada el 25/05/2012.
- 4. http://bit.ly/JBtVKa, visitada el 25/05/2012.
- 5. http://db.tt/s2f1R9yR, visitada el 25/05/2012.
- 6. http://db.tt/XPLkBGPh, visitada el 25/05/2012.
- 7. http://bit.ly/Khsuw9, visitada el 25/05/2012.
- 8. http://fqsaja.blogspot.com.es/, visitada el 25/05/2012.
- 9. http://www.textilsantanderina.com/, visitada el 25/05/2012.
- 10. http://bit.ly/JLhmWB, visitada el 25/05/2012.
- 11. http://bit.ly/Kc2ln4, visitada el 25/05/2012.
- 12. http://bit.ly/Md4vks, visitada el 25/05/2012.
- 13. http://vimeo.com/39427322, , visitada el 25/05/2012.
- R. M. Roberts, Serendipia, descubrimientos accidentales en la ciencia, Alianza Editorial, S.A., Madrid, 2010.
- B. Z. Shakhashiri, Chemical Demonstrations. A Handbook for Teachers of Chemistry, volume 1, The University of Wisconsin Press, Madison, Wisconsin, 1983.
- T. Lister, Classic Chemical Demonstrations, The Royal Society of Chemistry, Editorial Síntesis, Madrid, 2002.
- Theo Gray's Mad Science Experiment, you Can Do at Home but Probably Shoudn't, Black Dog and Leventhal Publishers, Inc., New York, 2009.

- 18. http://bit.ly/otBZwU, visitada el 25/05/2012.
- 19. http://bit.ly/JhffK7, visitada el 25/05/2012.
- 20. http://bit.ly/KFOJBI, visitada el 25/05/2012.
- 21. http://vimeo.com/39428374, visitada el 25/05/2012.
- 22. J. R. Bertomeu Sánchez, A. García Belmar, *La revolución química*, *entre la historia y la memoria*, Universitat de Valencia, **2006**.
- B. Z. Shakhashiri, Chemical Demonstrations, A Handbook for Teachers of Chemistry, volume 4, The University of Wisconsin Press, Madison, Wisconsin, 1992.
- 24. http://bit.ly/MeLmy1, visitada el 25/05/2012.
- 25. http://bit.ly/MeLGwE, visitada el 25/05/2012.
- 26. http://bit.ly/LyiiRM, visitada el 25/05/2012.
- 27. http://bit.ly/Jxt9cj, visitada el 25/05/2012.
- 28. http://vimeo.com/39430802, visitada el 25/05/2012.
- 29. http://bit.ly/KwKR13, visitada el 25/05/2012.
- 30. http://bit.ly/L9ZN5C, visitada el 25/05/2012.
- 31. http://bit.ly/MzO2Fw, visitada el 25/05/2012.
- 32. http://vimeo.com/39431847, visitada el 25/05/2012.
- 33. http://bit.ly/Lqefap, visitada el 25/05/2012.
- 34. http://bit.ly/7b0fpq, visitada el 25/05/2012.
- 35. http://www.rsc.org/Education/EiC/issues/2010May/ExhibitionChemistry.asp, visitada el 25/05/2012.
- 36. http://vimeo.com/39437574, visitada el 25/05/2012.
- 37. http://bit.ly/Lqf9DN, visitada el 25/05/2012.
- 38. https://vimeo.com/39489735, visitada el 25/05/2012.
- 39. http://bit.ly/1q8j1, visitada el 25/05/2012.
- 40. https://vimeo.com/39491323, visitada el 25/05/2012.
- 41. https://vimeo.com/39493541, visitada el 25/05/2012.
- 42. https://vimeo.com/39499730, visitada el 25/05/2012.
- 43. http://joseagallego.com/otras/tabla\_periodica2, visitada el 25/05/2012.
- 44. http://bit.ly/KKw9SY, visitada el 25/05/2012.
- 45. http://bit.ly/JIECE2, visitada el 25/05/2012.
- 46. https://vimeo.com/37846706, visitada el 25/05/2012.
- 47. https://vimeo.com/37932732, visitada el 25/05/2012.
- 48. B. Z. Shakhashiri, *Chemical Demonstrations. A Handbook for Teachers of Chemistry*, volume 2, The University of Wisconsin Press, Madison, Wisconsin, **1985**.
- B. Z. Shakhashiri, Chemical Demonstrations. A Handbook for Teachers of Chemistry, volume 3, The University of Wisconsin Press, Madison, Wisconsin, 1989.
- 50. http://www.jce.divched.org/, visitada el 25/05/2012.
- 51. http://bit.ly/MEEz3u, visitada el 25/05/2012.
- 52. http://bit.ly/pX3001, visitada el 25/05/2012.
- 53. https://vimeo.com/32435325, visitada el 25/05/2012.
- 54. http://bit.ly/MEV4N5, visitada el 25/05/2012.
- 55. http://www.rsc.org/Education/EiC/issues/2011January/ExhibitionChemistry.asp, visitada el 25/05/2012.
- 56. http://bit.ly/JIFEjF, visitada el 25/05/2012.
- 57. http://bit.ly/viuz2Y, visitada el 25/05/2012.

## El Experimento Global del Año Internacional de la Química. Agua: Una solución química

Javier García-Martínez

Resumen: Durante 2011, con ocasión de la celebración del Año Internacional de la Química, cientos de miles de jóvenes de todo el mundo han participado en el *Experimento Global*, *Agua*: *Una solución química*, mediante la realización de experimentos sencillos relacionados con el agua. Los resultados de sus análisis han permitido confeccionar un mapa global cuyos datos están siendo examinados con software específico para visualizar y comparar grandes cantidades de datos en función de su procedencia. Los objetivos principales de esta actividad han sido promover el interés de los jóvenes por la química, la experimentación y el uso sostenible del agua.

Palabras clave: Año Internacional de la Química, educación, redes sociales, agua, sostenibilidad.

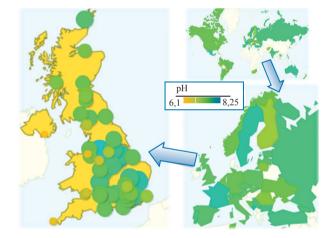
Abstract: During 2011, with the occasion of the celebration of the International Year of Chemistry, hundreds of thousands of young people from around the world have participated in the *Global Experiment, Water: A chemical solution*, by conducting simple experiments related to water. The results of their analysis have produced a global map whose data are being revised using special software to visualize and compare large amounts of data according to its location. The main objectives of this activity have been to promote the interest of young people in chemistry, experimentation and the sustainable use of water.

Keywords: International Year of Chemistry, education, social media, water, sustainability.

#### Introducción

Al poco tiempo de que la Organización de las Naciones Unidas (ONU) anunciara que 2011 sería el Año Internacional de la Química, la IUPAC y la UNESCO crearon un grupo de trabajo para idear una actividad global centrada en promover el interés por la química entre los jóvenes. Durante la Asamblea General de la IUPAC en Glasgow en 2009, se celebraron las primeras reuniones en las que se acordó que esta actividad consistiría en experimentos sencillos relacionados con el agua, cuyos resultados se compartirían en internet. Con ello se pretendía que los chavales fueran los protagonistas de su propio aprendizaje, que salieran del aula para realizar experimentos sencillos relacionados con actividades cotidianas y que intercambiaran experiencias, fotos y los datos de sus resultados en la web.

Con este fin se creó la página web oficial del Experimento Global<sup>2</sup> donde se podían descargar las instrucciones para realizar los experimentos, subir los resultados y ver los datos obtenidos por estudiantes de otras partes del planeta. La



**Figura 1.** Los datos recogidos por los alumnos se muestran en un mapa que presenta los distintos resultados de acuerdo con su valor, localización y número de participantes.

J. García Martínez

Laboratorio de Nanotecnología Molecular. Dpto. Química Inorgánica, Universidad de Alicante. Carretera Alicante-S. Vicente s/n, 03690, Alicante. C-e: j.garcia@ua.es, www.nanomol.es

Recibido: 11/04/2012. Aceptado: 27/04/2012.

página web del proyecto, disponible en cinco idiomas: inglés, francés, español, ruso y chino, pretende ser una web interactiva que sirva como centro de información para los profesores y centros adscritos.

La página web se diseñó para que los jóvenes participaran activamente en este Año Internacional de la Química y aprendieran la relación que existe entre el agua y muchos de los problemas actuales, desde la escasez de alimentos hasta el cambio climático y cómo la química tiene un papel fundamental tanto en la comprensión como en la resolución de estos grandes retos.<sup>3,4</sup> Otras actividades anteriores centradas en la educación sobre el papel del agua fueron eminentemente divulgativas y centradas en la concienciación.

En el Año Internacional de la Química, se decidió apostar por una actividad fundamentalmente experimental, convencidos de que mediante la realización de experimentos sencillos 136 Javier García-Martínez

el alumno aprendería mejor porque el agua es tan esencial para la vida, conocería de primera mano sus propiedades químico-físicas tan especiales y el papel que tiene la química en la medida de la calidad del agua y en su potabilización.<sup>5</sup>

Mediante su participación en el Experimento Global, los alumnos aprendieron conceptos químicos importantes como la salinidad, la solubilidad, el pH y las distintas soluciones que la química nos proporciona para que tengamos acceso a agua potable de forma segura. Ésta es una iniciativa que se encuadra dentro de los propios objetivos del Año Internacional de la Química; esto es, mejorar la comprensión de las soluciones que la química aporta a los grandes retos y fomentar el interés de los jóvenes por esta ciencia. Finalmente, los estudiantes crearon con los resultados de sus experimentos un mapa global, que recogía las aportaciones de todas las escuelas, institutos o centros participantes (Figura 1).

#### Descripción del Experimento Global del Agua

Los experimentos se diseñaron para que pudieran realizarse con el mínimo número de equipos y recursos posibles y para que pudieran incrementarse niveles de sofisticación de forma sencilla. Se elaboró también material docente con conocimientos básicos que permitiera a los profesores de cada nivel ponerlos en práctica en su clase adaptados al nivel educativo de sus alumnos.

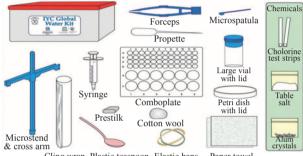
Con el objetivo de hacer los experimentos accesibles a cualquier persona, independientemente de su lugar de procedencia, los experimentos fueron traducidos a once idiomas.

Los cuatro experimentos que formaron parte de esta actividad fueron divididos en dos grupos:

- Actividades relacionadas con la medida de la calidad del agua:
  - a. Acidez: Los alumnos aprendieron a realizar medidas de pH del agua local usando distintos indicadores.
     Por otra parte, se habituaron al uso de técnicas para comprobar la fiabilidad de los resultados obtenidos.
     Todo ello proporcionó una serie de resultados que permitieron la elaboración de un mapa global que ilustra el trabajo realizado desde colegios de todo el mundo.
  - Salinidad: El experimento de la salinidad facilitó a los estudiantes la oportunidad de medir el contenido en sales de muestras de agua mediante su evaporación y posterior pesada.
- 2. Actividades relacionadas con la purificación de agua:
  - c. Filtración: En esta actividad los propios alumnos construyeron una unidad de filtración y evaluaron la eficiencia y capacidad de diversos materiales, sometiendo a filtración una muestra de agua local. A continuación, investigaron sobre los métodos de tratamiento locales y realizaron comparaciones en la medida de lo posible. Al igual que con otras actividades, ésta genera datos y resultados con los que confeccionar el mapa global.
  - d. Destilación: Durante el desarrollo de esta actividad se investigó una forma alternativa de purificar el agua usando la energía solar y se estudió el proceso de destilación.

Adicionalmente, los estudiantes tuvieron la oportunidad de diseñar y construir su propio sistema de destilación. Estos experimentos fueron pensados para una variedad de entornos educativos y las actividades pueden adaptarse por los profesores gracias a los materiales proporcionados, pudieron adaptarse a cualquiera de ellos. Sin embargo, para que el Experimento Global fuera realmente global era necesario que todos los niños y niñas pudieran participar independientemente de los recursos o localización de su escuela, incluso en aquellas regiones más pobres. Para ello se enviaron de forma gratuita 150 paquetes escolares formados cada uno por 10 minilaboratorios a 30 países en desarrollo, lo que permitió llegar a 50.000 estudiantes que de otra forma no hubieran podido participar (Figura 2).

#### Components of the IYC Global water kit



Cling wrap Plastic teaspoon Elastic bans Paper towel

Figura 2. Esquema de los minilaboratorios que se enviaron a treinta países de forma gratuita que incluye, una balanza, los reactivos necesarios para llevar a cabo todas las actividades del Experimento Global (sal de mesa, cristales de alumbre y tiras reactivas para el cloro), unas pinzas, una pipeta, una microespátula, un vial, un placa petri, una jeringuilla, film transparente, una toalla de papel, una cuchara de plástico, un poco de algodón y un adhesivo.

#### Repercusión del Experimento Global del Agua

Desde el lanzamiento del Experimento Global en el Día Mundial del Agua en marzo de 2011 en Sudáfrica, más de 128.000 estudiantes de más de 80 países compartieron sus resultados en la página web de esta actividad, lo que permitió adquirir una cantidad enorme de datos sobre la calidad del agua del planeta (Figura 3). Sin embargo, el número real de personas que tomaron parte en el Experimento Global es muy superior, ya que no todos compartieron los resultados en la página web.

Los organizadores del Experimento Global en Brasil han estimado que solo en su país más de 1,5 millones de estudiantes participaron en esta actividad, ya que el Gobierno de Brasil se involucró directamente en esta actividad enviando 30.000 paquetes escolares para que sus escolares pudieran participar en esta actividad central del Año Internacional de la Química. De forma similar, en el Reino Unido, donde la Royal Society of Chemistry organizó el Día del Experimento Global del Año Internacional de la Química, miles de estudiantes participaron en esta actividad. Es posible que nunca sepamos la cifra exacta de estudiantes que participaron, pero lo importante es que gracias al Experimento Global miles de jóvenes de todo el mundo pudieron descubrir su interés por



**Figura 3.** Algunas de las imágenes recibidas de estudiantes de todo el mundo (800 ciudades en más de 80 países) participando en el Experimento Global del Año Internacional de la Química.



**Figura 4.** Herramienta interactiva contenida en la página web del Experimento Global que incluye Twitter, Facebook and Youtube.

la ciencia y disfrutar realizando experimentos sencillos a la vez que aprendían sobre química y el agua.

Un aspecto fundamental del Experimento Global ha sido el uso de las redes sociales. Gracias a ellas, los estudiantes intercambiaron experiencias, fotos e inquietudes en tiempo real gracias a Facebook, Twitter, Youtube o Flickr (Figura 4).6 Y lo que es más importante, ellos mismos han creado sus propias comunidades de amigos en las que comparten su interés por la Química como otros usan las redes sociales para conectarse con admiradores de un cantante o seguidores de un equipo. Con solo echar un vistazo a los videos que han subido los jóvenes estudiantes, las noticias que subieron a Facebook o las historias en el blog de página web del Experimento Global, se comprende rápidamente el poder educativo de las redes sociales y su importancia para llegar a millones de personas. El Experimento Global pretendió desde el principio ser no sólo una actividad dirigida a los jóvenes sino realizada por ellos mismos. Esto hubiera sido imposible sin el uso de las redes sociales que nos permiten evolucionar de la educación centrada en el estudiante hacia la educación protagonizada por el estudiante, que interacciona en comunidades virtuales de jóvenes con los que comparte intereses. Para agradecer



Figura 5. Algunos ejemplos de los medios de comunicación que se hicieron eco del Experimento Global.



**Figura 6.** Video sobre el Experimento Global realizado por Casual Films para presentar los principales resultados de esta acitividad del Año International de la Química.

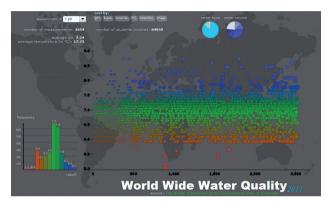
tanto a los estudiantes, como a los profesores, que han participaron en el Experimento Global, se envió un certificado a cada colegio participante en esta actividad.

Desde la BBC al Washington Post se hicieron eco del Experimento Global destacando su valor educativo (Figura 5). Posiblemente se trata del mayor experimento de química de la historia, debido al enorme número de participantes, pero lo que es más importante, se trata de un excelente ejemplo de como se puede utilizar el *crowdsourcing* en red para adquirir un gran número de datos científicos que de otro modo serían muy difíciles de conseguir.

Como agradecimiento a las miles de personas que han hecho posible el Experimento Global, la IUPAC y la UNESCO presentaron recientemente el video oficial de esta actividad, realizado por *Casual Films* (Figura 6).<sup>7</sup> En el video se explican los objetivos, los experimentos y las principales conclusiones de esta actividad, que ha servido para promover la química entre jóvenes de todo el mundo durante el Año Internacional de la Química. Este video es un homenaje a los miles de estudiantes que recogieron y analizaron muestras de agua local y compartieron sus resultados en la web.

Recientemente, el Experimento Global y Visualizing.org invitaron a diseñadores e informáticos de todo el mundo a 138 Javier García-Martínez





**Figura 7.** *Software* específico desarrollado para la visualización, comparación y análisis de los resultados del Experimento Global creado de forma cooperativa por programadores de todo en el mundo mediante la competición organizada por Visualizing.org.

desarrollar *software* capaz de visualizar, comparar y analizar la enorme cantidad de información (Figura 7) que se ha ido recogiendo durante el último año. <sup>8,9</sup>

Con el mismo espíritu del Experimento Global, este *software* se ha desarrollado de forma cooperativa. A partir de un diseño inicial, programadores de todo el mundo lo modificaron hasta crear una herramienta más eficaz que cualquiera de los diseños individuales capaz de procesar y analizar los datos por tipo de agua, país e incluso por escuela. El resultado final es un mapa interactivo en que se visualizan todos los datos obtenidos ordenados por tipo de experimento, origen de la muestra de agua y localización (Figura 7). Este instrumento será especialmente útil para extraer información relevante de los datos obtenidos por estudiantes voluntarios de todo el mundo.

#### **Conclusiones**

Los resultados de esta actividad se han presentado recientemente en el Foro Mundial del Agua (Marsella, 14/03/2012) donde despertó gran interés su valor educacivo y el énfasis que se ha hecho en la experimentación como herramienta de concienciación sobre la importancia del agua. Una vez concluida esta actividad, se está analizado la enorme cantidad de datos recogidos gracias a la herramienta interactiva diseñada a tal efecto. Los resultados de este análisis permitirá extraer importantes conclusiones sobre la calidad del agua en distintos países. Sin embargo, el Experimento Global del Año Internacional de la Química ha sido sobre todo una actividad educativa y de fomento de la química entre los más jóvenes. Desde la IUPAC y la UNESCO ya se está trabajando en la siguiente actividad para seguir fomentando el interés por la química y el respeto por el medioambiente. Para más información sobre actividades presentes y futuras derivadas del Experimento Global, contactar con el autor (j.garcia@ua.es).

#### Agradecimientos

Finalmente, quiero aprovechar estas líneas que me ofrece *Anales de Química* para agradecer a todas las personas que han hecho posible esta actividad a escala internacional y en nuestro país, especialmente a los profesores, en la mayoría de los casos de enseñanza secundaria, que han sabido buscar el tiempo necesario para hacer del Experimento Global posible. El autor pertenece al Bureau de la IUPAC y ha sido el coordinador del Experimento Global del Año Internacional de la Química.

#### Bibliografía

- Página web oficial del Año Internacional de la Química http:// chemistry2011.org/.
- Página web oficial del Experimento Global. Agua: una solución química water.chemistry2011.org.
- J. García Martínez, The Chemical Element. Chemistry's Contribution to Our Global Future, Wiley-VCH (2011) http:// www.thechemicalelement.com/.
- Descripción del Experimento Global en la página Año Internacional de la Química en español http://bit.ly/LblSRw, visitada el 21/05/12.
- 5. T. Wright, J. Garcia Martinez, Chem. Int. 2010, 32, 14-17.
- 6. J. Garcia Martinez, Chem. Int. 2010, 32, 4-7.
- Video oficial del Experimento Global, http://bit.ly/J80vx6, visitada el día 21/05/12.
- Página web oficial destinada al desarrollo del software de visualización y análisis de datos del Experimento Global http:// invent.ge/zeMqf8, visitada el día 21/05/12.
- 9. J. Garcia Martinez, R. Sigamoney Chem. Int. 2012, 34(3), 14–17.

## Un año con química en la Universidad de Jaén

María José Ayora-Cañada, Ana Domínguez-Vidal, Antonio Marchal, M. Paz Fernández-Liencres

Resumen: La declaración por parte de la UNESCO del 2011 como *Año Internacional de la Química* ha supuesto un revulsivo importante para que todo tipo de instituciones académicas públicas y privadas, pongan en marcha iniciativas encaminadas a divulgar la capacidad que tiene la química para resolver los retos futuros de la sociedad en términos de salud, alimentación, energía, etc., y de mejorar su imagen ante la sociedad. En este artículo comentamos las actividades impulsadas desde la Universidad de Jaén y hacemos balance de la repercusión que han tenido en la comunidad universitaria y en la sociedad jienense.

Palabras clave: Año Internacional de la Química, actividades de divulgación, talleres, Universidad de Jaén.

Abstract: The declaration by UNESCO of 2011 as the *International Year of Chemistry* has been an incentive for public and private academic institutions to promote initiatives aimed at solving future challenges of society in terms of health, food, energy, etc., and in this way, to improve the public appreciation of chemistry. In this paper, we report the commemorative activities developed at the University of Jaén and their impact in the society.

Keywords: International Year of Chemistry, outsourcing activities, workshops, University of Jaen.

#### Introducción

El año 2011 fue declarado por la UNESCO como Año Internacional de la Química. Para nosotros, como químicos, esta declaración no podía ser más que una ocasión inmejorable para acercar la química a la sociedad y mostrar sus aportaciones para el bienestar futuro de la humanidad. La Facultad de Ciencias Experimentales de la Universidad de Jaén (UJA) con la colaboración de la Unidad de Cultura Científica de la misma, se unió a la celebración del Año Internacional de la Química durante el 2011 a través de un amplio programa de actividades con el objetivo de despertar el interés por la química y, en general, por la investigación científica.

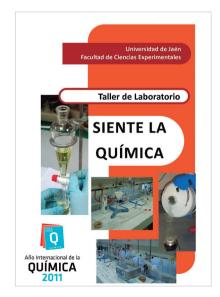
Las actividades fueron dirigidas a tres sectores: actividades dirigidas a los estudiantes y egresados de las titulaciones de ciencias, principalmente de química; actividades para alumnos de secundaria y bachillerato; y actividades para el público en general dirigidas muy especialmente al público más joven.

En esta contribución vamos a resumir las principales actividades desarrolladas, las impresiones de las personas implicadas en la celebración y la valoración global de lo que

ha representado esta conmemoración en nuestro entorno. Más información se puede encontrar en la página web que la Facultad preparó para el evento.<sup>1</sup>

#### Actividades realizadas

Iniciamos la conmemoración del Año Internacional de la Química en febrero con un taller de laboratorio *Siente la química* (Figura 1). Desde hace seis años, la Universidad de Jaén organiza cada año el Programa *Conoce tu universidad* en el que alumnos de segundo de bachillerato de la provincia visitan las instalaciones de la Universidad.<sup>2</sup> Aprovechando esta iniciativa, en 2011 propusimos a los profesores de bachillerato ampliar esta visita con un taller práctico en el laboratorio de química (Figura 1), en el que los alumnos realizaran algunas experiencias que dificilmente se pueden llevar a cabo en los laboratorios de los centros de enseñanza secundaria.



**Figura 1.** Portada del folleto editado para el taller de laboratorio *Siente la química*.



- Departamento de Química Física y Analítica.
   Universidad de Jaén. Campus Las Lagunillas, 23071-Jaén.
   C-e: mjayora@ujaen.es, adovidal@ujaen.es, liencres@ujaen.es
- <sup>2</sup> Departamento de Química Inorgánica y Orgánica. Universidad de Jaén. Campus Las Lagunillas, 23071-Jaén. C-e: amarchal@ujaen.es

Recibido: 16/04/2012. Aceptado: 08/05/2012.

María José Ayora-Cañada et al.

El taller, que pretendía ser a la vez divertido y didáctico, tuvo una excelente acogida por parte de los profesores y alumnos de bachillerato, y fue reeditado en noviembre haciéndolo coincidir con la celebración de la XI Semana de la Ciencia en la Universidad de Jaén.<sup>3</sup> Por la organización de estos talleres se recibió el premio a la Divulgación Científica que en su segunda edición convocaba la Universidad de Jaén.<sup>4</sup>

La química en nuestra vida fue el título elegido para otra de las actividades realizadas que consistió en un concurso de carteles dirigido, tanto a alumnos de bachillerato y secundaria, como a estudiantes universitarios de ciencias. Con este concurso se lograron plasmar algunos de los logros de la química que han permitido mejorar nuestra calidad de vida. Para la difusión de los trabajos realizados se organizó una Jornada de iniciación científica (Figura 2) con el formato de un mini-congreso cuyo programa ofreció la exhibición de carteles de los más jóvenes, la presentación de comunicaciones orales preparadas por becarios de investigación y estudiantes de último curso de química y, además, una conferencia plenaria impartida por el Prof. J. A. Anderson de la Universidad de Aberdeen (Escocia, Reino Unido) sobre sus recientes investigaciones en catálisis.

Durante todo el año se ha celebrado el ciclo *La química entre nosotros* (Figura 3) formado por un conjunto de jornadas sobre distintos temas que han mostrado la repercusión que tiene la química en diversos aspectos de nuestra vida. Cada tema fue abordado con una o varias conferencias, impartidas por ponentes de reconocido prestigio en cada campo, y con una actividad de carácter participativo.

Este ciclo (Tabla 1) ha tenido una excelente acogida por parte del público en general y de los estudiantes universitarios de ciencias en particular, y ha permitido que investigadores de vanguardia visiten nuestra universidad. Además, la participación de investigadores y empresarios del sector privado ha resultado de gran interés para los estudiantes ya que han conocido diversos ámbitos en los que poder desarrollar su futuro profesional como químicos.

La actividad que posiblemente mayor impacto ha tenido en la sociedad jiennense ha sido la feria *Acércate a la química* (Figura 5). Esta feria divulgativa se celebró en un parque muy conocido y céntrico de la ciudad, cedido por el Ayuntamiento de Jaén, durante un fin de semana de mayo.

La carpa de casi 300 m² dedicados a la química se dividió en tres espacios. A la entrada de la feria se encontraba la exposición *Entre moléculas* (comisariada por B. Herradón del CSIC), que ofrecía a través de sus paneles una visión general de la química y su papel central en la ciencia, seguida de un repaso breve de las principales aportaciones realizadas a lo largo de la historia y su relación con grandes campos como el medio ambiente, la salud, la energía y la alimentación. Esta exposición se completaba con las contribuciones de los alumnos de secundaria y estudiantes de universidad seleccionadas en el concurso de carteles y, además, con carteles confeccionados por los grupos de investigación de la UJA para dar a conocer sus líneas de trabajo y proyectos.

El espacio experimental ocupaba la mayor área de la feria y funcionaba de forma ininterrumpida. Entre otros experimentos, el público pudo observar la electrolisis del agua, fenómenos de quimioluminiscencia, los efectos del nitrógeno líquido, la síntesis de un polímero con propiedades adsorbentes, medidas de pH o la determinación de la acidez de un aceite (Figura 6). Este espacio experimental se completó



Figura 2. Presentación de carteles en la *Jornada de iniciación científica*.



Figura 3. Cartel correspondiente al ciclo de conferencias y talleres.

Tabla 1. Ciclo "La Química entre nosotros".

Tubia 1. Ciclo Ea Quinnea chare nesseros .				
Título	Ponente	Actividad complementaria		
La química escondida en la cocina	Pere Castells (Fundación Alicia)	Taller práctico de cocina (Figura 4)		
La química en la naturaleza: agentes terapéuticos y aromas	Teresa Ortega (U. Complutense de Madrid) Laura Raurell (Eurofrangance S.L.)	Taller de aromas Sofía Salido (U. Jaén)		
Química y medio ambiente: el ciclo del plástico	Mayca Bernardo (Cicloplast) Daniel Aguilera (Andaltec)	Exposición "Los plásticos con el medio ambiente"		
Química y salud	María Vallet (U. Complutense de Madrid) Javier Velasco (Neuron Bio)	Visita a los Laboratorios Farmacéuticos Rovi, Granada		
La química y el deporte	Bernardo Herradón (CSIC) Jesús Muñoz-Guerra (Laboratorio de Control de Dopaje, AEA)	Campeonato de fútbol 7		
¿Sabes cuánta química hay en el arte?	Juan Manuel Madariaga (U. País Vasco)	Demostración experimental Ana Domínguez, (U. Jaén)		



Figura 5. Cartel de la feria Acércate a la química.

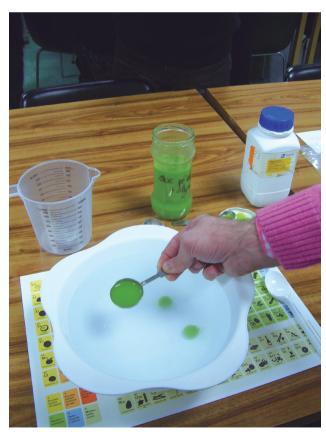


Figura 4. Un momento del taller práctico de cocina. Esferificación directa.



**Figura 6.** Estudiantes de química como monitores de las experiencias de la feria *Acércate a la química*.

142 María José Ayora-Cañada et al.

con un programa de talleres que requerían inscripción previa: Aromas y fragancias, Cata de aceite, Ciencia en la cocina, Parece agua pero es... ¡descúbrelo! y Elaboración de productos cosméticos.

Asimismo, la carpa contaba con un espacio dedicado a conferencias y audiovisuales donde los investigadores de la Universidad de Jaén divulgaron, mediante charlas breves, algunos de los proyectos actuales de investigación relacionados con la química. Además, se proyectaron vídeos divulgativos y documentales tales como Wolframio, un tipo con química, La química y nosotros, El aroma del vino, Todo es química, El misterio de los cristales gigantes, etc. Un espacio importante se dedicó a destacar la figura de Marie Curie con la conferencia Una vida dedicada a la química impartida por el investigador Tomás Peña (Universidad de Jaén).

Durante la mañana del primer día se contó con la asistencia de grupos organizados de alumnos de ESO y Bachillerato acompañados de sus profesores. El resto del fin de semana la feria contó con la participación de un público muy numeroso de todas las edades y procedencias que se mostraron especialmente atraídos por la zona experimental y los distintos talleres. En la organización participaron treinta profesores y más de cincuenta estudiantes de química de todos los cursos. Ha sido una experiencia muy gratificante ver como familias enteras abarrotaban la feria durante el fin de semana superando por completo nuestras expectativas de afluencia de público, a pesar de la complejidad de la organización y del enorme esfuerzo que supuso.

En la *Noche de los Investigadores* (23 de septiembre) la química también fue la protagonista en Jaén al estrenarse en el principal teatro de la ciudad y ante más de 900 personas la obra teatral "*Estáis hechos unos elementos*".<sup>5,6</sup> Una historia teatralizada de la Tabla Periódica" (Figura 7). La obra escrita por el profesor Antonio Marchal, de la Universidad de Jaén, muestra de forma divertida y amena cómo se descubrieron algunos elementos químicos, su utilidad y la vida de alguno de los científicos más relevantes de la historia de la química que participaron en sus descubrimientos. El texto y la grabación del día del estreno será en breve editado por la Universidad facilitando así su difusión entre el gran número de centros de enseñanza secundaria que lo han solicitado.

Estas actividades se completaron, en noviembre, con una exposición-museo de instrumentación química titulada *El laboratorio de química a través del tiempo*. El recorrido



**Figura 7.** Momento de la representación *Estáis hechos unos elementos* en la Noche de Investigadores de 2011.

por los diferentes instrumentos científicos del pasado de la Universidad de Jaén permitió conocer su historia como elementos indispensables en la enseñanza y en la investigación científica. Además del instrumental científico, se recuperaron folletos, catálogos de instrumentos e instrucciones de uso, y se expusieron algunos libros de química del fondo antiguo de la biblioteca de la propia universidad, así como facsímiles ilustrados de antiguos tratados cedidos por la editorial M. Moleiro S.A. tales como *Splendor Solis* o *Tacuinum Sanitatis*. Esta exposición se hizo coincidir con un *Encuentro de antiguos estudiantes de química*, organizado también con motivo del Año Internacional de la Química, y con la celebración de la XI Semana de la Ciencia en la Universidad de Jaén, en la que se organizaron visitas guiadas a la exposición de estudiantes de Enseñanza Secundaria.

El año fue clausurado con la conferencia *Nanociencia, la importancia de lo pequeño* impartida por Nazario Martín León, en aquel momento Presidente de la Real Sociedad Española de Química, con la asistencia de numerosos profesores de la Facultad de Ciencias Experimentales.

Todas las actividades han tenido un gran éxito de participación y en total más de 5.000 personas se han visto implicados en la celebración del Año Internacional de la Química en Jaén. La Tabla 2 muestra resultados más concretos. Se han recogido encuestas que califican con sobresaliente las actividades lo que indica la satisfacción de los participantes. El interés por la realización de este tipo de actividades no solo proviene de los centros de enseñanza secundaria y bachillerato sino por la sociedad jiennense que continúan demandando nuevas actividades para este año 2012.

**Tabla 2.** Participación y agentes implicados en las actividades desarrolladas.

Actividad	Implicados[a]	Asistentes[b]
Taller de laboratorio "Siente la química"	11	300
Concurso de carteles "La química en nuestra vida"	13	104
Jornada de iniciación científica	13	55
Ciclo "La química entre nosotros"	37	1027
Jornada de clausura	3	63
Feria "Acércate a la química"	86	2700
Teatro "Estáis hechos unos elementos"	15	1000

<sup>[</sup>a] Investigadores y técnicos implicados. [b] Número de participantes.

#### **Conclusiones**

Ha sido un año intenso, con muchas actividades. En total se han celebrado siete tipos de actividades diferentes lo que ha supuesto la colaboración de alrededor de 200 personas, entre estudiantes, profesorado y personal técnico especializado. Nuestro objetivo principal ha sido el de acercar la química a toda la sociedad para conseguir mejorar la imagen que suele acompañar a esta ciencia y, además, divulgar la capacidad

que tiene la química, junto con otras ciencias, para resolver los retos futuros de la sociedad en términos de salud, alimentación, energía, etc.

El balance es muy positivo y consideramos que este Año Internacional de la Química ha servido para poner de manifiesto las aportaciones fundamentales de la química a la sociedad, y la influencia de esta ciencia en buena parte del bienestar que disfrutamos, disminuyendo la percepción negativa de la misma. Esperamos también haber contribuido a despertar el interés y la curiosidad científica en los más jóvenes. Somos conscientes que esta labor no termina en 2011 sino que es nuestra responsabilidad como científicos seguir acercando la ciencia a la sociedad y comunicar de forma eficiente los resultados de la investigación y su impacto en nuestro día a día.

#### Agradecimientos

Los autores agradecen a todos los profesores, técnicos y estudiantes de la UJA que han colaborado desinteresadamente en la organización y desarrollo de las actividades, a la Unidad de Cultura Científica del

Vicerrectorado de Planificación, Calidad, Responsabilidad Social y Comunicación, a la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología (FECYT) por la financiación concedida al Proyecto "Acciones conmemorativas del Año Internacional de la Química en la Universidad de Jaén" (referencia FCT-11-1631), así como a las distintas instituciones colaboradoras: Ayuntamiento de Jaén, Colegio Oficial de Químicos, Asociación de Químicos de Andalucía y Real Sociedad Española de Química.

#### Bibliografía

- 1. http://guimica2011uja.weebly.com/ (visitada el 12/04/2012).
- http://www.ujaen.es/serv/acceso/conocelauja/ (visitada el 12/04/2012).
- 3. http://www.quimicaysociedad.org/evento.php?id=470 (visitada el 12/04/2012).
- http://www.actualidaduniversitaria.com/tag/premio-universidadde-jaen-a-la-divulgacion-cientifica/ (visitada el 12/04/2012).
- http://diariodigital.ujaen.es/files\_viccom/SC\_41597102.pdf (visitada el 12/04/2012).
- 6. A. Marchal, An. Quím. 2012, 108, 149-153.



## Valencia en el Año Internacional de la Química

#### Carmen Ramírez de Arellano Sánchez

Resumen: 2011, Año Internacional de la Química, coincidió con la primera celebración de la Reunión Bienal de la RSEQ en Valencia. La Sección Territorial realizó un esfuerzo especial a lo largo de este año programando actividades que incluyeron la realización de concursos, exposiciones, ciclos de conferencias y cine-forum y la edición de números especiales en diversas revistas de divulgación valencianas.

Palabras clave: Año Internacional de la Química, Sección Territorial de Valencia de la RSEQ, divulgación.

Abstract: During the 2011 International Year of Chemistry, the Biennial Meeting of the RSEQ was celebrated for the first time in Valencia. The Valencia Section of the Royal Society of Chemistry of Spain (RSEQ-Valencia) has made a special effort on programming different activities through this year. RSEQ-Valencia offered a range of activities dedicated to chemistry, including exhibitions, conferences, movies, competitions and special editions of Valencia magazines.

Keywords: International Year of Chemistry, RSEQ Valencia Section, popular science.

#### Introducción

La reunión Bienal de la RSEQ, en su XXXIII edición, aconteció por primera vez en la ciudad de Valencia coincidiendo con la celebración a nivel mundial del Año Internacional de la Química. En este año tan especial, la Sección Territorial de Valencia realizó un esfuerzo por sumarse al desarrollo de actividades de divulgación, que involucraran a distintos sectores de la ciudad y que contribuyeran al desarrollo de los objetivos marcados dentro del programa IYC 2011 "Química-nuestra vida, nuestro futuro".

Con la colaboración de la Ciudad de las Artes y las Ciencias, la Universidad Politécnica de Valencia, la Universidad de Valencia, el Instituto de Historia de la Ciencia y Medicina López Piñero, la Facultad de Química y los Colegios Mayores Luis Vives y Rector Peset así como de las revistas *Debats* y *Mètode*, fue posible realizar ciclos de conferencias y cine, concursos y exposiciones y llenar de química algunos números de publicaciones de divulgación cultural valencianas.

A lo largo de 2011, la química se mostró como protagonista de la cultura en la ciudad de Valencia, despertando el interés de los ciudadanos, que pudieron curiosear, aprender e informarse sobre diversos aspectos de esta ciencia y sus aplicaciones. La contribución de la Sección Territorial de



C. Ramírez de Arellano

Universidad de Valencia.

C-e: Carmen.ramirezdearellano@uv.es

Recibido: 23/04/2012. Aceptado: 16/05/2012.

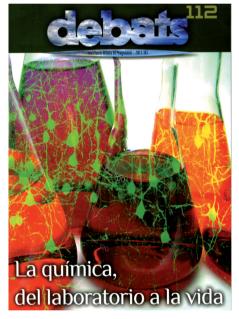


Figura 1. Portada del número 2011/03 de la revista Debats.

Valencia quedó reflejada en el programa *Valencia 2011-Año Internacional de la Química*, aprobado como parte de la programación internacional IYC 2011 y cuyas actividades se detallan a continuación.

#### La química: del laboratorio a la vida

Este es el título con el que la revista *Debats*, una publicación editada por la Diputación de Valencia y especializada en la divulgación cultural, dedicó a la química el número 2011/03, cuya portada aparece en la Figura 1. Con la coordinación de Miguel de la Guardia, vicepresidente del comité científico de la Bienal de la RSEQ, fue posible conseguir artículos y entrevistas de algunos de los protagonistas de este congreso, que tuvo lugar en Valencia entre el 24 y el 28 de julio de 2011.

El presidente del comité organizador, Gregorio Asensio, el presidente del comité científico, Avelino Corma, el entonces presidente de la RSEQ, Nazario Martín, y uno de nuestros conferenciantes plenarios, Ada E. Yonath, que aparecen en la Figura 2, contribuyeron con sus palabras a la sección 'La Química y sus protagonistas'.



Figura 2. Protagonistas de la sección 'Encontres' del número 2011/03 de la revista Debats.

Además, en la sección La Química en España y en la historia se recogieron contribuciones homenaje a Marie Curie, un trabajo sobre el impacto de la revolución Química en Valencia, y otro relativo a la situación de la Química española en el ámbito internacional. Artículos de divulgación sobre nanotecnología, reconocimiento molecular, ingeniería cristalina, epigenética, agricultura y alimentos, gastronomía molecular y química verde configuraron la sección 'las fronteras de una ciencia'. Por último en el apartado Química viva: aplicaciones y proyectos se recogieron estudios sobre el estado químico del parque natural del Turia o la recuperación de la bahía de Portman. Se puede encontrar información sobre este número de Debats en INTERNET.¹

#### Presenciando la química

Bajo este nombre se realizó, con la colaboración de la Facultad de Química, dentro de las actividades programadas para conmemorar el Año Internacional de la Química, un ciclo de seis conferencias y cuatro sesiones de cine-forum, entre febrero y abril de 2011. El ciclo se desarrolló como parte del programa de créditos de libre elección de la Universidad de Valencia y estuvo dirigido tanto a los estudiantes de Química como al público en general. Las sesiones de conferencias tuvieron lugar en la Biblioteca Eduardo Boscá del Campus de Burjassot de la Universidad de Valencia y contaron con la participación de José Elguero, Rosa Claramunt, Miguel de Renzi, Jaime Primo, Fernando Sapiña y Sonsoles Martín-

Santamaría que vinieron a hablarnos de la trilogía físicaquímica-biología, la mujer en la ciencia, el origen de la vida, la agricultura y la sostenibilidad, la química en la mesa y la química y la actividad biológica, respectivamente. Las sesiones de cine-forum se realizaron en el Colegio Mayor Luis Vives y contaron con la colaboración del Aula de Cinema de la Universidad de Valencia. En el ciclo se proyectaron las películas: Erin Brockovich (Steven Soderberg, 2000), comentada por Guillermo Ramis, que nos habló de la detección de sustancias contaminantes, La amenaza de Andrómeda (Robert Wise, 1971) con sofisticadas técnicas de análisis que determinan la composición de unos extraños invasores cristalinos, Miedo y asco en Las Vegas (Terry Gilliam, 1998), cuya carátula aparece en la Figura 3, presentada por Pilar Campins con una introducción sobre la detección de sustancias tóxicas v Sherlock Holmes (Guy Ritchie, 2010), que batió el record de participación, según comentaron los compañeros del Aula de Cinema en su página de Facebook.<sup>2</sup>



**Figura 3.** Carátula de la versión original de la película *Miedo y Asco en las Vegas*.

La media de asistencia alcanzó el centenar en la mayor parte de sus sesiones, todo un éxito. Los detalles de la programación se pueden consultar en la página de la Sección Territorial de Valencia de la RSEQ.<sup>3</sup>

#### Reacciona!

Actividad organizada en colaboración con la Ciudad de las Artes y las Ciencias, con un título que invitaba a los estudiantes de Bachillerato, Universidad y ciclos formativos de grado medio de Formación Profesional a concursar con material multimedia, que expusiera de forma didáctica, creativa y original algún proceso químico, en especial aquellos con una contribución más patente al bienestar de la sociedad o que resultasen formativos e ilustrativos (Figura 4). El concurso



Figura 4. Creatividad del concurso ¡Reacciona! Organizado en colaboración con la Ciudad de las Artes y las Ciencias.

contó con el patrocinio de los vicerrectorados de estudios de la Universidad Politécnica de Valencia y de la Universidad de Valencia que permitieron repartir hasta seis mil euros en premios entre las distintas categorías. La difusión del concurso se realizó a través de los decanatos de la Facultad de Química, la Facultad de Farmacia y la Escuela Técnica Superior de Ingeniería de la Universidad de Valencia.

La inscripción al concurso, de enero hasta febrero de 2011, contó con 32 proyectos de la Comunidad Valenciana en la categoría bachillerato y 44 proyectos en la categoría de universidades repartidos entre las comunidades autónomas de Andalucía, Aragón, Castilla-La Mancha, Cataluña, Madrid, Murcia y Valenciana.

El primer premio en la categoría Bachiller y ciclos formativos de Formación Profesional lo obtuvo el proyecto *Química para la vida* presentado por Lucía Matarredona, Alejandro Pinilla y Marina Quiles, bajo la coordinación del profesor Sergio Menargues del Colegio Sagrado Corazón HH. Maristas de Alicante. En la categoría universidad, el primer premio lo obtuvieron Jordi Mora y Pablo Gallegos de la Universidad Autónoma de Barcelona, con el proyecto *La química y la atmósfera. Problemas y soluciones*. Como finalistas quedaron los proyectos *Quimicortos, Síntesis del amoniaco y La química en la escena del crimen*, en la categoría universidad; y *Reaccions exotèrmiques y El so y la llum amb química, per favor!*, en la categoría bachillerato. La entrega de premios tuvo lugar en el Palacio de Congresos de Valencia durante la celebración de la Reunión Bienal de la RSEQ (Figura 5).

Se puede consultar la información detallada de la primera edición del concurso en direcciones de INTERNET, 4,5 en la que se han incluido enlaces para visualizar algunos de los videos seleccionados. La Sección Territorial tiene previsto realizar junto con la Ciudad de las Artes y Las Ciencias, una segunda edición del concurso.



Figura 5. Acto de entrega de premios del concurso ¡Reacciona! en el Palacio de Congresos de Valencia.

# Afinidades Electivas. Valencia y la Revolución Química

La Sección Territorial de Valencia colaboró en esta exposición organizada por el Instituto de Historia de la Medicina y de la Ciencia López Piñero (CSIC-Universidad de Valencia) y el Vicerrectorado de Cultura de la Universidad de Valencia. La exposición presentaba la Revolución Química de finales del siglo XVIII en Europa junto con los acontecimientos que condujeron a la constitución de la primera cátedra de química de la Universidad de Valencia, dirigida a la formación de médicos y artesanos. La exposición, comisariada por José Ramón Bertomeu, permaneció abierta al público en el Palacio Cerveró de Valencia de mayo a octubre de 2011 y en la Facultad de Farmacia, desde noviembre a diciembre de 2011.

Entre las actividades asociadas a la exposición se programó un ciclo de cine y la representación de la obra teatral *Oxígeno* (Carl Djerassi y Roald Hoffmann, 2001), que tuvo lugar durante el transcurso de la XXXIII Reunión Bienal.<sup>6</sup> La revista *Mètode*, editada por la Universidad de Valencia, dedicó su número 69 a los rostros de la Química, incluyendo un monográfico en torno a la realización de esta exposición, que se puede descargar (Figura 6).<sup>7</sup> Se puede encontrar información adicional en INTERNET.<sup>8</sup>



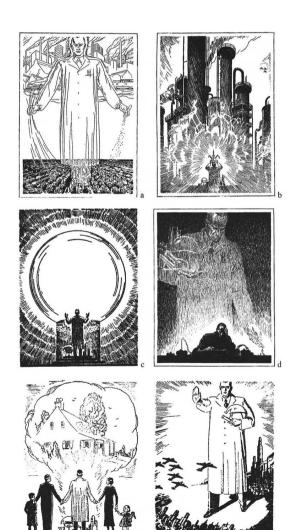
**Figura 6.** Portada y contraportada de la separata del número 69 de la revista *Mètode* dedicada a la exposición Afinidades Electivas.

#### La imagen de la Química. ¡Destápala!

Esta exposición, que puso el broche final a las celebraciones del Año Internacional de la Química por parte de la Sección Territorial de Valencia, se organizó conjuntamente con el Colegio Mayor Rector Peset y la Facultad de Química de la Universidad de Valencia. La muestra, expuesta en la Sala de la Muralla del Colegio Mayor Rector Peset desde noviembre de 2011 a febrero de 2012, recogió unas treinta imágenes procedentes del arte, la prensa, la publicidad o la literatura académica, agrupadas en cinco secciones que permitieron al espectador realizar un recorrido sobre la imagen pública de la química desde sus orígenes. Este trabajo expositivo, comisariado por Salvador Albiñana y Carmen Ramírez de Arellano, invitaba al público a hacer una reflexión sobre



**Figura 7.** Imagen de la exposición de Théodule Ribot [1823-1891], *Three witches seated around a cauldron.* Dibujo, Londres, British Museum. © Trustees of the British Museum.



**Figura 8.** Imagen de la exposición, compuesta a partir de seis imágenes aparecidas en *Man in a Chemical World: The Service of Chemical Industry* (A. C. Morrison, New York, Scribner's Sons, 1937).



**Figura 9.** Portada del catalogo de la exposición, compuesta a partir de la litografía *Peace through Chemistry* de Roy Lichtenstein, 1970, © The Estate of Roy Lichtenstein, VEGAP, Valencia, 2011.



**Figura 10.** Imagen de la noticia aparecida en el diario Levante el nueve de diciembre de 2011.

las connotaciones negativas que socialmente conlleva el uso del término química/químico. La sección *La imagen visual*, *perspectivas* mostraba cómo la imagen pública de la química se va forjando desde los tiempos de la alquimia, la revolución industrial o la segunda guerra mundial (Figura 7).

Las secciones *Medioambiente y energía*, *Salud*, *higiene y alimentos* y *Nuevos materiales* buscaban el contraste entre la imagen pública negativa y los grandes beneficios aportados por la química a la humanidad. Mientras que, la última sección, *Prensa y campañas de imagen* pone de manifiesto la preocupación que históricamente han mostrado los químicos por acercar esta ciencia a la sociedad (Figura 8).

Los carteles ganadores de los concursos *Carteles anuncia*dores del Año Internacional de la Química 2011 y La Química a la Nostra Vida organizados por la Facultad de Química, el Colegio Oficial de Químicos de la Comunidad Valenciana y la Conferencia Española de Decanos de Química, formaron parte de esta sección.

La exposición se cerró con la imagen de la litografía de Roy Lichtenstein que dio lugar a la portada del catálogo y que con el sugerente título *Peace Through Chemistry* resumía, de algún modo, el contenido de esta actividad (Figura 9). El catálogo, publicado por la Universidad de Valencia, contó con la colaboración de Bernardo Herradón y se puede adquirir a través del Colegio Mayor Rector Peset. 9

La exposición fue referenciada en diversos medios de comunicación, que incluyeron el artículo *Redescubriendo la Química* en el número 72 de la revista *Mètode*, un documental realizado por la cadena *MediaUni* de la Universidad de Valencia<sup>10</sup> (canal Mirada en la dirección mediauni.uv.es) o un reportaje en el diario Levante en diciembre de 2011 (Figura 10).

La exposición, que se trasladará en breve al Campus de Burjassot de la Universidad de Valencia, está elaborada para facilitar su transporte y abierta a aquellas entidades que puedan estar interesados en disponer de la misma. Se puede obtener más información a través del Colegio Mayor Rector Peset o en la página de la sección territorial.<sup>11</sup>

#### Agradecimientos

La Sección Territorial de Valencia agradece la participación y colaboración en las actividades programadas.

#### Bibliografía

- 1. http://bit.ly/LD99HG, visitada el 26/05/2012.
- 2. http://on.fb.me/KOTFyf, visitada el 26/05/2012.
- 3. http://bit.ly/JDUjTM, visitada el 26/05/2012.
- 4. www.cac.es/reacciona/, visitada el 26/05/2012.
- 5. http://bit.ly/obm8KD, visitada el 26/05/2012.
- 6. http://bit.ly/JkEQli, visitada el 26/05/2012.
- 7. http://bit.ly/JDVcvo, visitada el 26/05/2012.
- 8. http://bit.ly/JkDYx0, visitada el 26/05/2012.
- La imatge de la química. Destapa-la! 2011. ISBN: 978-84-370-8406-0.
- 10. http://mediauni.uv.es, visitada el 26/05/2012.
- 11. http://bit.ly/JkH8B4, visitada el 26/05/2012.



## Divulgación de la Química

# ¡Estáis hechos unos Elementos! Algo más que una historia teatralizada de la tabla periódica para la Noche de los Investigadores



#### A. Marchal

Departamento de Química Inorgánica y Orgánica. Facultad de Ciencias Experimentales, B3-458. Campus Las Lagunillas s/n, 23071 Universidad de Jaén.

C-e: amarchal@ujaen.es

Recibido: 29/02/2012. Aceptado: 15/03/2012.

Resumen: En el marco del "Año Internacional de la Química" celebrado el año pasado, se ha escrito y puesto en escena en Jaén, una historia de la tabla periódica de los elementos entretenida y amena como vehículo para divulgar la contribución de algunos investigadores al desarrollo de la ciencia, de la química en concreto.

Palabras clave: Año Internacional de la Química, tabla periódica, elemento químico, teatro, noche investigadores.

Abstract: In the context of the "International Year of Chemistry" celebrated last year, an entertaining play about the history of the periodic table of the elements has been written and put on stage in Jaén (España), as a vehicle for bring to light the contribution of some researchers to the development of science, chemistry in particular.

Keywords: International Year of Chemistry, periodic table, chemical element, performance, researchers night.

#### Introducción

La Noche de los Investigadores es un evento que reúne al público en general con los investigadores. <sup>1</sup> Tiene lugar anualmente el último viernes de septiembre en más de 300 ciudades de toda Europa simultáneamente siendo su principal objetivo dar a conocer el trabajo de los investigadores y la ciencia en un ambiente relajado y agradable. La Noche de los Investigadores ofrece la oportunidad de conocer mediante jornadas de puertas abiertas, los laboratorios e instalaciones donde los científicos llevan a cabo sus investigaciones así como los instrumentos y las tecnologías que éstos utilizan para llevarlas a cabo. Por otro lado, durante este evento también se llevan a cabo concursos y jornadas divulgativas en el centro de las ciudades con objeto de, mediante experimentos sencillos, llamar la atención de los pequeños hacia la ciencia y las carreras científicas.

En el año 2011, por primera vez, la Noche de los Investigadores (Figura 1) se celebró en Jaén, España. ¿Qué hicimos?

#### La historia de la tabla periódica llevada al teatro

Divulgar ciencia para hacerla más cercana a un público no especializado no es tarea fácil, por ello decidí escribir como vehículo de divulgación, una obra teatral divertida y amena en la que se pusiera de manifiesto la contribución de algunos investigadores al desarrollo de la ciencia, de la química en concreto.



**Figura 1.** Cartel editado para el día del estreno, 23 de septiembre de 2011.

150 Divulgación de la Química

Aún así, el texto no se hubiese escrito de no ser, por un lado, por el aval de experiencias previas que demuestran claramente que el teatro puede ser un valioso instrumento para enseñar y aprender química además de para entretener,<sup>2-4</sup> y por otro lado, por mi vinculación con los grupos de teatro de la universidad que abrigaban la posibilidad no ficticia sino real de ver algún día representado el texto sobre un escenario como, finalmente, así ha sido.

La elección del título de la obra de teatro *Estáis hechos unos elementos* no es casual, todo está hecho de elementos químicos. Somos Química. Además, el año 2011 fue declarado por la UNESCO "Año Internacional de la Química" por lo tanto, qué mejor forma de celebrarlo que recordando el descubrimiento de alguno de los elementos y la vida de algunas de las personas que participaron en los mismos.

La adaptación teatral del texto y el montaje escénico ha sido llevado a cabo por la actriz y directora de teatro Noelia Rosa Guiérrez<sup>6</sup> quien, a pesar de no tener ninguna vinculación con el mundo de la química, ha conseguido que los actores y las actrices de los grupos de Teatro In Vitro y Mamadou de la Universidad de Jaén, unidos por primera vez para la ocasión después de más de diez años de éxitos por separado sobre las tablas, se sintieran perfectamente identificados con todos los personajes que representaron, de diferentes nacionalidades y en contextos históricos diferentes.

La elección de los personajes a interpretar y los diálogos no fue tarea difícil al existir multitud de fuentes bibliográficas en las que inspirarse acerca de la vida y obra de los científicos que participaron en el desarrollo del sistema periódico.<sup>7-17</sup> Ahora bien, se consideró fundamental no centrarse en una serie de personajes destacados, conocidos por la mayoría de los estudiantes, sino que, ante la posibilidad de que algún día se representara el texto, consideramos oportuno aprovechar para poner de manifiesto que el descubrimiento de los elementos y las leyes periódicas no fue fruto del trabajo de unas pocas personas sino de un largo proceso histórico que nace con nuestros antepasados y llega hasta el descubrimiento de los elementos más recientes.

Teníamos claro por tanto que debíamos representar personajes de diferentes épocas pero ¿cómo relacionar a esos personajes en el tiempo?. Con un sueño. Un sueño profundo en el que se ve inmersa la protagonista de la historia después de haber sucumbido al estudio insustancial de la tabla periódica en vísperas de un examen (Figura 2).

Al inicio del sueño la niña protagonista aparece desconcertada en un lugar extraño. Varias personas con bata blanca se mueven de un sitio para otro haciendo gestos "raros" propios del trabajo en un laboratorio, escriben un artículo, observan un experimento, interpretan una gráfica. Los científicos ven a la niña y le preguntan si está preparada. La niña cree que se refiere al examen y como no está preparada corre a esconderse en su libro de texto. *Pronto lo estarás*, le dicen. Los científicos desaparecen y, al salir la niña de nuevo de su escondite, descubre una tabla periódica de los elementos presidiendo todo el escenario con la imagen de un señor barbudo. La niña lee en voz alta: *Dimitri Ivánovich Mendeléiev. Tobolsk* 1834, *San Petersburgo* 1907.

Al pronunciar estas palabras aparece un señor vestido de antiguo con aparente mal carácter, enorme barba, cabellos largos y descuidados. Busca a su joven esposa Ana. La niña

vuelve a esconderse asustada en su libro, pero cambia de actitud al ver el retrato del señor en una de las páginas. Es el mismo señor que aparece en la tabla. Si aparece en mi libro debe ser alguien importante, piensa. Intenta que el señor vea su imagen en la tabla pero, cuál es su sorpresa que, cuando éste la ve, efectivamente confirma que él es el de la imagen, pero que no tiene nada que ver con esa tabla tan colorida en donde aparecen además representados, no los sesenta elementos que él conocía, sino ciento dieciocho elementos químicos.<sup>18</sup>

La niña no entiende cuál es el problema, lo que sirve como pretexto a Mendeléiev para explicarle el origen de la tabla periódica, de algunos elementos y sus descubridores (Figura 3). Así, durante la trama irán apareciendo en escenarios distintos (un mercado medieval, un museo, una sala de conferencias) con imágenes y ambientación musical, ordenados cronológicamente y magistralmente enlazados, el monje dominico San Alberto Magno descubridor del arsénico (1250); el alquimista Hennig Brandt, descubridor del fósforo (1669); D. Antonio de Ulloa (Figura 4), ilustre científico y militar español, descubridor del elemento platino en Colombia (1735); 10 los hermanos riojanos Fausto y Juan Jose Delhuyar (Figura 5), descubridores del metal wolframio, (1783); <sup>11</sup> Marie-Anne Pierrette Paulze de Lavoisier (Figura 6), joven esposa y colaboradora del científico francés Antoine Laurent de Lavoisier, célebre por sus estudios sobre la oxidación de la materia, el fenómeno de la respiración animal, el análisis del aire y la ley de conservación de la materia (1794);<sup>12</sup> Sir Humphry Davy (Figura 7), químico británico fundador de la electroquímica y descubridor de varios elementos (1807); Robert Wilhelm Bunsen químico alemán descubridor de varios elementos por métodos espectroscópicos (1860); Julius Lothar von Meyer, químico alemán que coincidió con Dimitri Mendeléiev en el Congreso de Karlsruhe (1869)<sup>13</sup> y que, de forma independiente, se esforzó por poner en orden todos los elementos conocidos y facilitar así el estudio de sus propiedades, dando lugar a la tabla periódica de los Elementos que todos conocemos y estudiamos; Sir William Ramsay (Figura 8), químico escocés galardonado con el Premio Nobel de Química de 1904 por el descubrimiento de los gases nobles y determinar su situación en la tabla periódica de los elementos (1895); 14 y por último aparece, en un claro homenaje al centenario de la concesión del premio Nobel de Química que recibiría en solitario en 1911, 15 Marie Curie (Figura 9), descubridora junto a su esposo Pierre de dos elementos radiactivos, el radio y el polonio. 16

Al final de la historia, los científicos vuelven a aparecer para explicar cómo desde Marie Curie, se han llegado a descubrir muchos más elementos, algunos de ellos con aplicaciones tecnológicas sorprendentes. La niña protagonista mientras tanto ha vuelto a caer en un profundo sueño. Al día siguiente se despierta y encuentra sobre su almohada una carta. Lee para concluir: "Querida amiga, ¿sabías que en nuestro cuerpo existen 59 elementos químicos diferentes? Es cierto que no todos se encuentran en la misma proporción. Sin embargo todos juegan un papel fundamental en nuestra vida, en nuestra salud. Por eso no te quepa duda de que somos uno de los ejemplos vivos más sublimes de la tabla periódica. Ah, por cierto, despierta. Ahora sí estas preparada. Con cariño, tu amigo Dimitri".

Divulgación de la Química 151



Figura 2. La protagonista de la historia estudia los elementos químicos antes de dormirse.



Figura 3. Mendeléiev intenta explicar el origen de la tabla periódica a la niña protagonista de la trama.



**Figura 4.** El investigador sevillano Antonio de Ulloa cuenta sus aventuras por América meridional y el descubrimiento del metal platino.



**Figura 5.** Los hermanos Delhuyar, firman el trabajo donde describen el aislamiento de un nuevo metal, el wolframio, a partir del mineral wolframita.



**Figura 6.** En un museo, Marie Anne Pierrette Paulze de Lavoisier se dirige al público desde un cuadro y cuenta los trabajos llevados a cabo junto a su marido Antoine.



**Figura 7.** Humphry Davy explica el origen de la electroquímica en una de sus multitudinarias conferencias en el Memory Hall de la *Royal Institution* de Londres ante la atenta mirada de dos admiradoras.



**Figura 8.** Sir William Ramsay explica el descubrimiento de los primeros gases nobles en presencia de Mendeléiev y Lothar von Meyer.



**Figura 9.** Ève Curie escribe la biografía de su madre. Marie recuerda cómo conoció a su marido Pierre, se inició en la investigación con él y descubrió los elementos polonio y radio. <sup>19</sup>

Para acentuar el valor didáctico de la obra se han elaborado una serie de cuestiones que, junto con otras tantas que elaboren los profesores, pensamos pueden ayudar a trabajar en clase, antes de la representación, durante y al final de la misma el tema de la tabla periódica. Asimismo, desde la Unidad de Cultura Científica de la Universidad de Jaén se va a editar el texto de la obra junto con la grabación de la primera representación con objeto de llevar a las aulas la ciencia y sus personajes y posibilitar que la obra, si no en su totalidad, sí en parte sea representada y adaptada a las características del alumnado de todos los centros que la soliciten. Algunas de las cuestiones que se podrían plantear serían las siguientes:

- 1. ¿Quién es Ana, la mujer que busca Mendeléiev al inicio de la representación?
- Según la historia, ¿visitó Mendeléiev España en alguna ocasión?
- Nombra algún elemento químico presente en las espadas que empleaban los guerreros en la antigüedad.
- 4. Nombra algún elemento químico presente en las joyas que llevaban las princesas en la antigüedad.
- 5. ¿A qué orden religiosa pertenecía San Alberto Magno?
- 6. ¿Qué elemento descubrió San Alberto Magno?
- 7. ¿En qué ciudad andaluza nació Antonio de Ulloa, descubridor del platino?
- 8. ¿Cómo se llamaban los dos hermanos Delhuyar, descubridores del wolframio?
- 9. ¿Cuál es el símbolo químico del wolframio?
- 10. ¿Cómo murió el marido de la mujer que habla desde el cuadro, Marie de Lavoisier?
- 11. ¿Qué reacción química estudiaron juntos?
- ¿Cuántos elementos descubrió el científico inglés Davy? Nómbralos.
- 13. ¿Qué utensilio de laboratorio inventó el profesor Bunsen?
- 14. ¿En qué universidad alemana se celebró un famoso congreso donde coincidieron Mendeléiev y Meyer?
- Nombra alguno de los elementos que descubrió el científico escocés Ramsay.
- 16. ¿Qué dos elementos descubrió Marie Curie junto a su esposo Pierre?
- 17. ¿Cómo se llamaban las dos hijas de Marie Curie que aparecen en la representación?
- 18. ¿Quién de ellas ganó también un premio Nobel junto a su esposo?
- Indique tres elementos cuyo nombre derive de un país o conteniente.
- 20. ¿Qué elemento ha sido el último en recibir el nombre por la IUPAC?

#### **Conclusiones**

Desde el día del estreno en la Noche de los investigadores, la obra de teatro *Estáis hechos unos elementos* ha sido representada en el principal teatro de la ciudad de Jaén –España "Teatro infanta Leonor" y en el Aula Magna de la Universidad de Jaén durante la XI Semana de la Ciencia con numeroso público y excelentes críticas.

Ahora, después del éxito alcanzado con esta iniciativa, esperamos que docentes y estudiantes se animen a llevar la ciencia y sus personajes a las aulas, desde el más célebre al más desconocido, a través del teatro como hemos intentado hacer nosotros. A este respecto esperamos que contribuya la edición del texto y una de las representaciones. ¡Qué mejor forma de motivar por la lectura y el estudio, desarrollar la expresión oral, vencer timideces, eliminar tensiones e inhibiciones, descubrir la importancia del trabajo en equipo y desarrollar la imaginación y la capacidad creadora, que haciendo que nuestros propios estudiantes investiguen sobre la vida y obra de tantos ilustres científicos que ha dado la historia, aprendan de sus errores y aciertos y lo pongan en escena!

#### Agradecimientos

El autor de este artículo desea expresar su agradecimiento a la Unidad de Cultura Científica de la Universidad de Jaén dependiente del Vicerrectorado de Planificación, Calidad, Responsabilidad Social y Comunicación y a la Fundación Española para la Ciencia y la Innovación por apoyar el proyecto económicamente, a la actriz Noelia Rosa Gutiérrez por la adaptación teatral del texto y a los actores y actrices de los grupos de teatro In Vitro y Mamadou de la Universidad de Jaén por el tiempo e ilusión que han derrochado en los ensavos y en cada una de las representaciones.

#### **Bibliografía**

- Página oficial de la Noche de los Investigadores. http:// ec.europa.eu/research/researchersnight/, visitada el 29/02/2012.
- H. W. Kerby, J. Cantor, M. Weiland, C. Babiarz, A. N. Kerby, J. Chem. Educ. 2010, 87, 1024–1030.
- J. Gómez Magenti, C. Sánchez Sánchez, M. Giménez Toledo, V Jornadas de Innovación Docente en Química, Granada, 2010.
- C. Djerassi, R. Hoffmann, Oxygen. A play in 2 acts, Wiley-VCH, Weinheim, 2001.
- Página oficial del Año Internacional de la Química. http://www. chemistry2011.org/, visitada el 29/02/2012.
- Blog personal de Noelia Rosa, http://noeliarosa.blogspot.com/, visitada el 29/02/2012.
- I. Asimov, La búsqueda de los elementos, Plaza & Janés, Madrid, 1986.
- 8. H. W. Brock, Historia de la Química, Alianza, Madrid, 1988.
- S. Esteban Santos, La Historia del Sistema Periódico, UNED, Madrid, 2009.
- J. Pimentel Viajeros científicos, tres grandes expediciones al nuevo mundo, Nivola, Madrid, 2001.
- P. Román Polo, Los hermanos Delhuyar, la Bascongada y el Wolframio, Real Sociedad Bascongada de los Amigos del País, Bizkaia, 2000.

- I. Pellón González, Un químico ilustrado. Lavoisier, Nivola, Madrid, 2002.
- 13. P. Román Polo, An. Quim. 2010, 106 (3), 231-239.
- Sir William Ramsay, the Nobel Prize in Chemistry 1904, http://www.nobelprize.org/nobel\_prizes/chemistry/laureates/1904/, visitada el 29/02/2012.
- 15. Marie Curie, the Nobel Prize in Chemistry 1911, http://www.nobelprize.org/nobel\_prizes/chemistry/laureates/1911/, visitada el 29/02/2012.
- J. M. Sánchez Ron, Marie Curie y su tiempo, Ed. Crítica, Madrid. 2000.

- P. Román Polo, Mendeléiev: El profeta del orden químico, Nivola, Madrid, 2002.
- 18. La tabla periódica a la que se refiere Mendeléiev es la tabla cerámica mural que da la bienvenida a todo aquel que se acerca a la Facultad de Ciencias Experimentales de la Universidad de Jaén. Fue inaugurada el 22 de noviembre de 2007 con motivo de la celebración del Año Internacional de la Ciencia y en homenaje al científico ruso en el centenario de su fallecimiento. Ver: A. Marchal, *J. Chem. Educ.* 2008, 85, 1489.
- E. Curie, La vida heroica de Maria Curie descubridora del radio (contada por su hija), 30<sup>a</sup> ed., Espasa-Calpe, S. A., Madrid, 1986.



## Alrededor de la Química

## La química en la web

El material disponible de carácter divulgativo y/o educativo y con recursos diversos (experimentos, problemas, ejercicios, unidades didácticas, etc.) es abundante en la web. Esta sección se dedicará a recomendar sitios de interés e iniciativas de distintas índoles (carnavales de química, artículos de carácter divulgativo en diversas revistas científicas, sociedades científicas, posts en blogs, etc.). En esta primera entrega, se comentan blogs interesantes, los carnavales de química, redes sociales y algunos artículos publicados recientemente en revistas científicas.

#### Sitios web recomendados

#### Educación química

(http://educacionquimica.wordpress.com/). Artículos de interés didáctico. Enlaces a sitios web con material útil para enseñanza en educación secundaria.

#### El blog del búho

(http://elblogdebuhogris.blogspot.com.es/). El subtítulo del blog es *un alegato contra la quimifobia*. Desde este sitio web, su administrador escribe contra todas las falsas creencias sobre el uso de sustancias químicas. Los artículos están escritos con un estilo directo y ameno.

#### El cuaderno de Calpurnia Tate

(http://elcuadernodecalpurniatate.blogspot.com.es/). Blog muy reciente, gestionado por un estudiante de licenciatura en Química (UCM) con una gran capacidad para explicar conceptos básicos de química.

#### Ese punto azul pálido

(http://www.esepuntoazulpalido.com/). El blog publica *post* científicos en todas las áreas, pero la química es uno de los temas preferidos de su administrador. Frecuentemente los artículos invitan a la reflexión. Destacan especialmente los *posts* recomendando lecturas científicas y de historia de la ciencia.

#### **Experientia Docet**

(http://www.experientiadocet.com/). Trata sobre ciencia en general, aunque los artículos sobre química son frecuentes. Muchos de los *posts* son comentarios en profundidad sobre avances científicos relevantes publicados recientemente.

#### FisQuisWeb

(http://web.educastur.princast.es/proyectos/fisquiweb/). Administrada por un profesor de educación secundaria, aloja material útil en la docencia de la física y la química.

#### Los avances de la química

(http://www.losavancesdelaquimica.com/). Artículos sobre los avances de la química y su impacto en la sociedad, biografías de químicos e historia de la química. Se incluyen copias de numerosas conferencias sobre divulgación de la

química, enlaces a sitios web de interés, recomendaciones de libros, material audiovisual, etc.

#### Moléculas a reacción

(http://isqch.wordpress.com/). Blog creado muy recientemente y gestionado por el Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH-UZ-CSIC). Los pocos *posts* publicados hasta el momento tienen un alto valor científico.

#### Química y sociedad

(http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/). *Posts* sobre los avances de la química y su impacto en la sociedad, avances científicos generales y política científica. Recoge anuncios de actividades científicas diversas y enlaces a numerosos sitios científicos de interés.

#### Scientia

(http://scientia1.wordpress.com/). Publica artículos sobre temas muy diversos, frecuentemente sobre la química y bioquímica de los alimentos y cómo los procesos de reconocimiento molecular (encapsulación molecular) afectan al aroma. Los *post* publicados tienen alta calidad científica con un toque de humor e ironía.

#### Carnavales de química

El carnaval de química es una iniciativa en la web en la que se publican posts relacionados con la química. Cada edición es gestionada por un bloguero distinto y tiene una duración aproximada de un mes. Las últimas tres ediciones se han alojado en los siguientes sitios:

#### XIII Carnaval de química

(http://bit.ly/Hyk8y5). Alojado en el blog *Curiosidades de un químico soñador*. Con 20 entradas participantes de temas diversos: historia de la química, alimentación, microbiología, etc.

#### XIV Carnaval de química

(http://bit.ly/ItlLRp). Alojado en el blog *Educación quí*mica. Con 29 entradas de temática variada: deporte, biomedicina, historia de la ciencia, materiales con aplicaciones tecnológicas, aspectos sociales de la ciencia, etc.

#### XV Carnaval de química

Con 25 entradas participantes con artículos de interés educativos y temas variados como químicos famosos, astroquímica y biomedicina, entre otros.



Logo del XV Carnaval de Química, creado por Luis Miguel Moreno Martínez (UCM).

La química en la web

#### **Redes sociales**

#### **Feelsynapsis**

Es una red social en español en la que participan científicos de todas las áreas. En este sitio web se publican artículos, anuncios de diversa índole y ofertas de trabajo. Feelsynapsis convoca un concurso de microrrelatos científicos (http://bit.ly/m7AhBg) y edita la revista *Journal of Feelsynapsis* (JoF, http://feelsynapsis.com/jof/index.html), posiblemente la revista española de divulgación científica de más calidad. Se han publicado 4 números, que se pueden descargar de la web. La descarga es gratuita.

#### Grupo de la RSEQ de Facebook

(http://on.fb.me/zORV36). Grupo abierto en el que se cuelga información de interés, tales como enlaces a artículos científicos, noticias de política científica, anuncios de becas y contratos de trabajo, congresos, etc. Para acceder a cualquier cuenta de Facebook, es necesario crear el perfil en esta red social. Cualquier miembro del grupo puede colgar la información que considere pertinente relacionada con la química y la ciencia.

#### Grupo de Química de Facebook

(http://on.fb.me/ArIUwb). Grupo de discusión y exposición sobre los avances de la química. Principalmente, pero no exclusivamente, se mencionan artículos publicados recientemente en revistas científicas.

#### Página Todo es química-2012 de Facebook

(http://www.facebook.com/todoesquimica2012) Se enlazan y comentan artículos de divulgación, historia de la química y biografía de químicos.

#### Twitter de la RSEQ

(https://twitter.com/#!/rseq2012). En 140 caracteres se informa de novedades en química y en la RSEQ.

#### Artículos de interés en revistas científicas

#### What, another Nobel Prize in chemistry to a nonchemist?

R. Hoffmann, *Angew. Chem. Int Ed.* **2012**, *51*, 1734–1735. http://bit.ly/w5QWQh. Interesantes reflexiones al hilo de la concesión del último Premio Nobel de Química. Aunque apareció en la web en febrero de 2012, merece la pena destacarlo.

## Gilbert Stork: in his own words and in the musings of his friends

J. I. Seeman, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, *51*, 3012–3023. http://bit.ly/wpsHkO. Artículo homenaje a uno de los más grandes químicos orgánicos de la historia. Es un documento de inmenso valor histórico.

#### Chemistry's web of data expands

R. Van Noorden, *Nature* **2012**, *483*, 524. http://bit.ly/ HgRwLy. Información sobre las bases de datos (y su evolución histórica) disponibles para químicos.

# XXXIV REUNIÓN BIENAL DE

# QUÍMICA ORGÁNICA



11 al 13 de julio de 2012 DONOSTIA-SAN SEBASTIÁN

www.ehu.es/bienalQO/

## Alrededor de la Química

## Química y Sociedad

## La responsabilidad social de la ciencia y tecnología



#### Miguel Valcárcel

Departamento de Química Analítica. Universidad de Córdoba. Edificio Marie Curie Anexo. Campus de Rabanales. 14071. Córdoba.

C-e: qa1vacam@uco.es

Recibido: 11/04/2012. Aceptado: 04/05/2012.



#### Rafael Lucena

Departamento de Química Analítica. Universidad de Córdoba. Edifício Marie Curie Anexo. Campus de Rabanales. 14071. Córdoba.

C-e: qa1vacam@uco.es

Recibido: 11/04/2012. Aceptado: 04/05/2012.

Resumen: El impacto mutuo de la Ciencia y Tecnología (CyT) y la sociedad/medio ambiente es el tema tratado genéricamente en este artículo. Se considerará la definición de la *Responsabilidad Social de la Ciencia y Tecnología* tomando como referencia el concepto ampliamente desarrollado en el ámbito empresarial. Además se describirán las connotaciones externas e internas así como sus interrelaciones, lo que proporcionará al lector una visión genérica de la temática.

Palabras clave: Responsabilidad Social de la Ciencia y Tecnología.

Abstract: The mutual impact of Science and Technology (S&T) and society/environment is the topic dealt with in this article. The definition of *Social Responsibility of Science y Technology* (SR of S&T) can be approached using the concept widely used in modern enterprises. The internal and external connotations of the SR of S&T will provide to readers a global vision of the topic.

Keywords: Social Responsibility of Science and Technology.

La Responsabilidad Social (RS) nace como reacción a las consecuencias negativas colaterales de los espectaculares logros humanos de los últimos siglos y que han experimentado un crecimiento exponencial en las últimas décadas. Algunos de los avances científicos y tecnológicos han alterado el balance social y medioambiental, y propiciado pobreza, desigualdad de oportunidades, emigración, falta de respeto a los derechos humanos, cambio climático, degradación de la biodiversidad, deforestación, etc. Ello ha propiciado, en general, un cambio de actitud y estrategia de la humanidad que ha desembocado en un interés creciente por la RS.

#### Definición de la RS

La RS puede definirse de forma simplificada como la combinación de una serie de palabras clave tales como "responsabilidad", "partes interesadas", "calidad de vida" (bienestar social) y "sostenibilidad", entre otras. Se han desarrollado más de cincuenta definiciones de RS, que hacen énfasis en diferentes aspectos. He aquí solo dos significativas:

"La RS de las organizaciones/actividades humanas implica la integración plena en sus actuaciones de preocupaciones sociales y medioambientales que propicien tanto el desarrollo de buenas prácticas como el establecimiento de nuevas relaciones internas y externas entre las partes interesadas". <sup>1</sup>

La nueva Guía ISO 26000:2010 define a la RS como "la responsabilidad de una organización/actividad humana ante el impacto que sus acciones y decisiones ocasionan en la sociedad en general y en el medio ambiente en particular, a través de un comportamiento ético y transparente que: a) contribuya al bienestar social y al desarrollo sostenible; b) tome en consideración las expectativas de todas las partes interesadas (internas, externas y mixtas); c) cumpla con la legislación vigente y coherente con la normativa internacional de comportamiento; y d) esté integrado en toda la organización y se lleve a la práctica en todas sus relaciones internas y externas".<sup>2</sup>

En definitiva, un planteamiento correcto de la Responsabilidad Social en una organización/actividad debe implicar un compromiso social y medioambiental explícito, que se materialice en una estrategia que conduzca a un cambio Ouímica v Sociedad 157

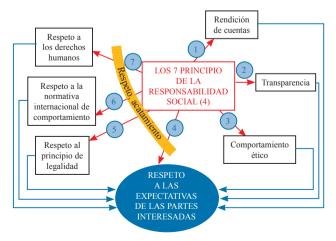
importante en su gestión y en sus alianzas para que las preocupaciones sociales y medioambientales estén presentes en todas sus actividades, lo que supone la ampliación de los grupos de interés clásicos para lograr una organización responsable y sostenible.

El concepto de RS nació y se desarrolló en primer lugar en el ámbito empresarial, de ahí la denominación inicial de "Responsabilidad Social Corporativa" (RSC) o "Responsabilidad Social de la Empresa" (RSE). <sup>1,3,4</sup> En los últimos años el concepto de RS se ha ido extendiendo y aplicando a otras facetas del comportamiento humano tanto individual como colectivo. Así, ya es frecuente encontrar referencias explícitas a la RS de la Ciencia y Tecnología, <sup>5</sup> entre otras macroáreas y áreas más específicas como la química y, dentro de ésta, la química analítica. <sup>7</sup>

El desarrollo previo y consolidación de la RS en el ámbito empresarial ha propiciado la disponibilidad de documentos internacionales ampliamente reconocidos y aceptados, siendo cuatro los más relevantes:

- El "Pacto global" de la ONU con 10 principios básicos de RS.<sup>8</sup>
- Las "Líneas Directrices de la OCDE sobre RS".9
- Los "Principios de la Organización Internacional del Trabajo sobre la RS".<sup>10</sup>
- La Guía ISO 26000:2010 sobre RS,<sup>2</sup> que contiene los principios y orientaciones genéricas sobre la misma para su implementación en una actividad/organización humana y los requisitos que deben satisfacerse.<sup>11</sup>

La Guía ISO 26000:2010 formula siete principios básicos de la RS, que se muestran esquemáticamente en la Figura 1 y que son representativos de las connotaciones que comporta. Tres de ellos son de carácter genérico (rendición de cuentas, transparencia y comportamiento ético) y los otros cuatro implican consideración/respeto a referencias tales como: los derechos humanos, la norma internacional del comportamiento y la legalidad vigente, así como a las expectativas de las partes interesadas, siendo la satisfacción de estas últimas la diana de la RS, de tal forma que los demás principios deben orientarse a las mismas.



**Figura 1.** Los principios de la RS en la Guía ISO 26000:2010 y la importancia de la satisfacción de las expectativas de las partes interesadas.<sup>2</sup>

#### La RS de la ciencia y tecnología

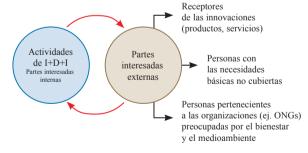
Tomando como punto de partida la aproximación genérica a la RS, su definición en el contexto de la Ciencia y Tecnología puede tener dos aproximaciones complementarias:

- "La RS de la CyT es la reflexión/concienciación del impacto de las actividades y resultados de I+D+i en la calidad de vida de los ciudadanos y el medio ambiente";
- "LA RS de la CyT está directamente relacionada con la honestidad y las connotaciones éticas de los investigadores y responsables de I+D+i así como de la sociedad receptora de sus resultados".

De manera más amplia, Larsen et al.<sup>5</sup> han definido la RS de la CyT como: "La concienciación de las personas y/o colectivos relacionados con la CyT para situar y definir las actividades de I+D+i en un contexto adecuado y apto para contribuir tanto a la mejora continua de la sociedad y el medio ambiente como a superar los denominados *Retos de la Humanidad* en salud, sanidad universalmente asequible, cambio climático, suministro universal de agua y alimentos, envejecimiento de la sociedad, etc. en coherencia con la *Declaración de Lund* de julio de 2009.<sup>12</sup>

Estas aproximaciones genéricas enmarcan la RS en áreas específicas de la CyT tales como la química, la biotecnología, la energía nuclear, la proteómica, la nanotecnología, etc. Todas ellas tienen connotaciones propias diferenciales cuya descripción rebasa los propósitos de este artículo con vocación de marco.

Es muy importante resaltar, tal como se plasma en la Figura 2, que un enfoque integral de la RS de la CyT implica una relación biunívoca entre las actividades, organizaciones y personas relacionadas con la I+D+i (partes interesadas "internas") con las denominadas partes interesadas ("externas"), tales como beneficiarios de los productos de la innovación, personas con las necesidades no cubiertas y ONGs preocupadas por la calidad de vida y el medio ambiente. Ambos colectivos tienen que tener un doble rol, tanto activo como pasivo. A este planteamiento se le denomina con frecuencia una doble relación *bottom-up* y *top-down*.<sup>5</sup>

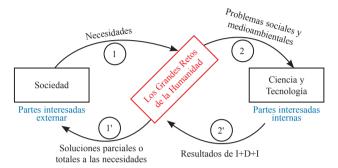


**Figura 2.** Relación biunívoca entre las actividades de I+D+I y las denominadas partes interesadas.

Los denominados *Grandes Retos de la Humanidad* centrados en la salud, energía, medio ambiente, alimentación, etc. en general y en particular en el cambio climático, el envejecimiento de la población, la universalización de la sanidad, la energía, el agua y los alimentos entre otros, han sido mencionados en la Declaración de Lund sobre las políticas europeas de investigación<sup>12</sup> e incluidos en las definiciones de RS de la CyT (ej. referencia 5). Tal como puede observarse en la Figura 3, los *Grandes Retos de la Humanidad* pueden conside-

158 Oulmica v Sociedad

rarse como el "puente de unión" entre la sociedad, que plantea las necesidades y recibe la satisfacción de las mismas, y la Ciencia y Tecnología, que recibe los problemas candentes para ofrecer soluciones a través de los resultados de I+D+i. Estos *Grandes Retos* pueden pues, considerarse como objetivos estratégicos de la CyT, como líneas maestras de I+D+i y como puntos de encuentro entre la sociedad y la CyT (Figura 3).



**Figura 3.** Los *Grandes Retos de la Humanidad* como nexo de unión entre la Sociedad y la CyT.

La plena incorporación de la Responsabilidad Social en ámbitos científicos y tecnológicos tiene como referencias los requisitos<sup>11</sup> que deben cumplir las organizaciones/actividades al implantar la Guía ISO 26000:2010. Estos requisitos están referidos en el ámbito empresarial a empleados, clientes, proveedores, competidores, alianzas o colaboraciones, administración, comunidad y sociedad, medio ambiente, inversores, accionistas y responsables. Una adaptación rigurosa y flexible de los mismos al ámbito de la CyT es imprescindible para desarrollar una plataforma fiable para la RS de la CyT.

Para desarrollar el concepto de RS de la CyT deben distinguirse dos enfoques complementarios según las "partes interesadas" involucradas: el interno y el externo. A continuación se comentan sucintamente.

#### **Connotaciones internas**

Las connotaciones internas de la RS de la CyT son las que corresponden a la comunidad científica, a las agencias de I+D+i y a los gobiernos nacionales o transnacionales, tal como se materializa en la Figura 4. Son los más directamente relacionados con la misma. Estos colectivos tienen una amplia variedad de líneas de actuación, la mayoría de ellas complementarias, que se comentan a continuación.

Las líneas de actuación de la CyT deben ser permeables y sensibles a las necesidades de los ciudadanos plasmadas en los *Grandes Retos de la Humanidad*. Ello implica un cambio del orden de prioridades desde la publicación de artículos en revistas de alto índice de impacto hasta la resolución de problemas de nuestro tiempo y del futuro, de tal forma que las prioridades en las actividades de I+D+i deben enmarcarse en estos *Grandes Retos*. La identificación de los dos niveles (*Grandes Retos* y líneas generales de I+D+i) debe ser fruto de la participación de todas las partes interesadas, con especial énfasis en el diálogo fructífero entre las externas y las internas.

Una directriz de actuación clave es la selección adecuada de los programas/proyectos de I+D+i para que se orienten adecuadamente y se optimicen los recursos. Ello implica soslayar las investigaciones repetitivas sin un potencial valor añadido y potenciar los proyectos con riesgo "calculado", favoreciendo en todo caso la competitividad entre los investigadores. En este contexto, es importante buscar la eficiencia en las inversiones en I+D+i favoreciendo la utilización de todo tipo de recursos y exigiendo una rendición de cuentas acorde con los principios de la Guía ISO 26000:2010, tal como se expresa en la Figura 1.

Una asignatura pendiente relacionada con la RS de la CyT es la modernización de la evaluación de las actividades de I+D+i mediante tres enfoques complementarios: la implementación de la misma ex-ante, durante y ex-post. Las dos últimas alternativas no son consideradas sistemáticamente en España, pese a su importancia estratégica y su coherencia con la rendición de cuentas. Por otra parte, los expertos<sup>5</sup> enfatizan en la necesidad de una evaluación sistemática final del potencial impacto de los resultados con un enfoque profesional.

Una línea directriz fundamental de la RS de la CyT que proponen los expertos<sup>5</sup> es abordar el I+D+i utilizando tecnologías "rompedoras" como la biotecnología, nuevos materiales, nanotecnología, TICs, etc. para hacer más competitivos y transferibles los resultados.

Un enfoque transversal de las connotaciones internas de la RS de la CyT es fomentar la educación científico-técnica de calidad desde las primeras etapas de la enseñanza de los jóvenes. El impacto de la ciencia en la humanidad debe ser una materia básica común en los primeros niveles de la enseñanza. En España, la materia "Ciencias para un mundo contemporáneo" es actualmente obligatoria en Bachillerato. La FECyT ha publicado un libro que contiene los objetivos, contenidos y evaluación de esta materia, así como diversas unidades didácticas. 13 Por otra parte, es esencial la selección adecuada de científicos y tecnólogos entre los jóvenes, siendo la formación el caldo de cultivo más eficiente para escoger a los mejores. Hay que buscar personas con conocimientos generales y científicos que tengan competencias técnicas para la I+D+i, así como competencias personales (liderazgo, inconformismo, actitud para trabajo en equipo, sentido crítico, constancia, etc).

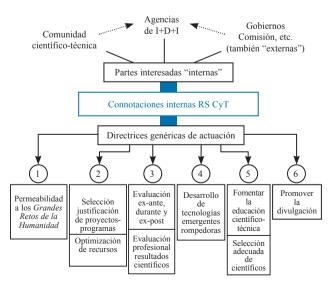


Figura 4. Connotaciones internas de la RS de la CyT.

Ouimica y Sociedad 159

#### **Connotaciones externas**

Las connotaciones externas de la RS de la CyT, expuestas en la Figura 5, son complementarias a las internas y se refieren a las partes interesadas externas, tales como los ciudadanos, empresas, ONGs, gobiernos, etc. Su papel no es secundario (pasivo), como podría inferirse de todo lo expuesto anteriormente (ver Figuras 2 y 3), sino que tienen un papel activo. Las directrices de actuación más significativas se comentan a continuación.

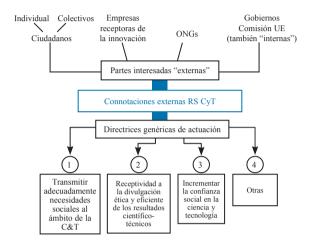


Figura 5. Connotaciones externas de la RS de la CyT.

En primer lugar, las partes interesadas externas deben transmitir a la CyT las necesidades sociales con una priorización de las mismas si fuese necesario. Es necesario el establecimiento de vías eficientes y fiables entre ambos tipos de partes interesadas, así como deben desarrollarse "filtros" para asegurar la calidad, la coherencia y la representatividad de los problemas (retos) planteados a la CyT y descartar los planteamientos poco fundamentados, coyunturales o demagógicos. La promoción de observatorios mixtos Ciencia-Sociedad para captar y priorizar las necesidades y evaluar los impactos es una opción recomendable, siempre que se plantee con eficiencia y se soslayen intereses políticos, económicos o de otra índole.

En segundo lugar, debe promocionarse la receptividad a la divulgación de los resultados de la CyT evitando el tradicional aislamiento social de científicos y tecnólogos. *Muchas veces se olvida que éstos son también ciudadanos*. No cabe duda que la divulgación veraz, ética, contextualizada y eficiente de los resultados científico-técnicos es un cuello de botella para la RS de la CyT. Esta divulgación es un arma de doble filo. Por una parte, tiene como facetas positivas interesar a los ciudadanos de los beneficios de la CyT a través de la transmisión de los logros y fracasos, así como la rendición de cuentas de las inversiones públicas en I+D+i. Por otra parte, si no se plantea adecuadamente, la divulgación puede provocar alarmas injustificadas, falsas expectativas y fomentar extrapolaciones poco fundamentadas.

Como consecuencia de las dos directrices anteriores, una orientación fundamental en este contexto es incrementar o restaurar la confianza social en la CyT, que debe basarse en la demostración de la eficiencia de la CyT en la resolución de problemas de nuestro tiempo y en una adecuada divulgación científico-técnica. Hay que hacer partícipes a los ciudadanos de los procesos de I+D+i y evitar la brecha actualmente existente entre los científicos y los ciudadanos.

#### **Epílogo**

La RS no es un concepto nuevo, ya que es inherente a cualquier actividad humana que se plantee con honradez y ética. Nació en el ámbito empresarial (RSC), pero no hay razón alguna para que no pueda aplicarse a cualquier actividad humana como las relacionadas con la CyT, que puede aprovecharse del amplio soporte documental de la RSC.

En resumen, la RS de la CyT es una temática de gran interés y actualidad, que ya es reconocida explícitamente en revistas científicas de prestigio. Supone una ruta o marco para que la CyT contribuya a resolver los Grandes Retos de la Humanidad, así como evitar el tradicional aislamiento de los científicos. Debe implicar a todas las partes interesadas tanto internas (científicos, agencias de I+D+i) como externas (ciudadanos y organizaciones como ONGs), así como las mixtas (ej.: gobiernos), que además deben relacionarse entre sí. Un planteamiento correcto de la RS de la CyT debe suponer una reorientación de la CyT, así como una comunicación biunívoca y fluida entre la Sociedad y la CyT, lo que implica una educación adecuada a la ciudadanía. En definitiva, la RS de la CyT supone una apuesta fundamentada de la CyT por el bienestar social y por la protección medioambiental. En este contexto es fundamental la educación en los principios y buenas prácticas de la RS del personal investigador en formación, ya que serán los futuros responsables del enfoque adecuado de la CyT, tal como reconocen explícitamente Larsen et al.<sup>5</sup>

#### Bibliografía

- M. de la Cuesta. La Responsabilidad Social Corporativa o de la Empresa en Jornadas de Economía Alternativa y Solidaria. 2005. http://bit.ly/LcqzYq (último acceso, 22 de mayo de 2012).
- Guía ISO 26000: 2010 Guía de Responsabilidad Social. Ediciones AENOR, Madrid, 2010.
- A. Olcese, La responsabilidad social de las empresas (RSE).
   Real Academia de Ciencias Económicas y Financieras.
   Madrid, 2007.
- Ética. Sistema de gestión de la responsabilidad social de las empresas. Ediciones AENOR, Madrid, 2008.
- P. K. Larsen, P. Thostrup, F. Besenbacher, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, 50, 10738–10740.
- International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC), The Social Responsibility of Chemists: Responsible Stewardship, IUPAC Project 2006-043-3-050, IUPAC, Research Triangle Park, NC, USA, 2006.
- 7. M. Valcárcel, R. Lucena, Trends Anal. Chem. 2012, 31, 1-7.
- United Nations Global Compact: www.unglobalcompact.org (último acceso, 22 de mayo de 2012). Ver también Red Española del Pacto Mundial: www.pactomundial.org/ (último acceso, 22 de mayo de 2012).
- Líneas directrices de la OCDE: www.oecd.org (último acceso, 22 de mayo de 2012).
- Principios de la OIT: www.ilo.org (último acceso, 22 de mayo de 2012).
- 11. RS10. Sistema de gestión de la responsabilidad social. Requisitos. Ediciones AENOR. Madrid, 2011.
- Lund Declaration. Europe must focus on the Grand Challenges of our time. July 2009. bit.ly/VnsC3 (último acceso, 22 de mayo de 2012).
- 13. Ciencias para el Mundo contemporáneo. Aproximaciones didácticas. FECyT. Madrid, 2008.

### Alrededor de la Química

#### Géstión de la Ciencia

# La atracción de talento como eje de la gestión de la I+D: El caso de la Fundación Ikerbasque



Fernando P. Cossío

Presidente del Comité Ejecutivo. Ikerbasque. Alda. Urquijo, 36-5. E.48011 Bilbao.

C-e: fp.cossio@ehu.es www.ikerbasque.net

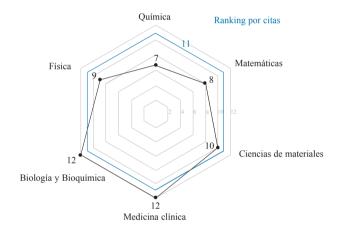
Recibido: 16/05/2012. Aceptado: 21/05/2012.

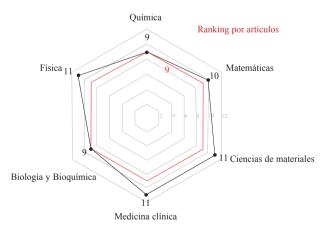
#### Introducción

La gestión de la ciencia siempre ha sido un tema controvertido, lo que no es de extrañar ya que la investigación científica está sujeta a incertidumbres en cuanto a los métodos de asignación de los recursos y a la evaluación de los resultados. A ello hay que añadir que la  $I\!+\!D$ , sobre todo la centrada en torno a las ciencias experimentales, es intrínsecamente frágil. Entre otras razones, una muy importante es que para crear un grupo de investigación consolidado y de relevancia internacional se requieren unos diez años; sin embargo, para destruirlo bastan de tres a cinco años, el tiempo necesario para dejarlo morir de inanición al agotar todas sus fuentes de financiación basales y competitivas.

Por otra parte, existe hoy en día un consenso acerca de que el desarrollo económico de un país, además de depender de su capacidad transformadora de bienes y materias primas (la riqueza de las naciones) está fuertemente vinculado a su esfuerzo, tanto público como privado, de financiación de la I+D (la riqueza de las nociones). Aunque es muy difícil, si no imposible, decidir de antemano qué áreas de investigación van a contribuir a hacer más próspero y competitivo un país, existe una correlación empírica entre el esfuerzo en I+D y la renta per cápita.  $^2$ 

Este proceso de transformación del conocimiento en retornos al tejido socioeconómico para hacerlo más competitivo no es en modo alguno automático, contra lo que frecuentemente se afirma. Sin embargo, es claro que, si bien los mecanismos no son todavía bien comprendidos y pueden variar según los casos, el esfuerzo en I+D se traduce a medio plazo en un aumento del producto interior bruto de un país.<sup>2</sup> Por tanto, cabe concluir que los países más ricos no invierten en I+D por ser más ricos, sino que son más ricos por haber invertido en I+D. De ello se sigue que, para cualquier gobierno o administración, recortar el gasto en I+D no es una medida de austeridad, sino de empobrecimiento. Un ejemplo de todo ello se aprecia en los datos de crecimiento del esfuerzo en I+D para 2012 en países como EEUU, Francia y Alemania, donde se han establecido subidas del orden del 3-6% con respecto a 2011. En comparación, España ha previsto para 2012 un descenso en gasto de





**Figura 1.** Posición de España en el ranking de citas y de publicaciones según la base *Web of Knowledge* durante los años 2000-2010 (véase ref. 6) para seis áreas de investigación representativas. Los valores promedio están marcados en azul y rojo, respectivamente.

I+D del 25,6% con respecto a 2011, que asciende al 33,9% si se toma como referencia el año 2009.<sup>3</sup> No es de extrañar que esta drástica reducción haya sido calificada de suicida.<sup>4</sup>

Durante las tres últimas décadas, desde las administraciones públicas (y no tanto desde la iniciativa privada) se ha realizado un notable esfuerzo en I+D+i. Con sus luces y sus sombras, es claro que el resultado neto ha sido francamente positivo. España se ha situado en la comunidad científica con una consistencia que no había tenido antes. Se logró así, continuando esfuerzos previos muy meritorios, romper la irrelevancia internacional (con las excepciones de figuras singulares conocidas por todos) que la ciencia española arrastraba desde el siglo XVIII, reflejada por Ramón y Cajal<sup>5</sup> en 1923 mediante una frase terrible: "Cerramos las fronteras para que no se infiltrase el espíritu de Europa, y Europa se vengó alzando sobre los Pirineos una barrera moral mucho más alta: la muralla del desprecio". Como puede observarse en la Figura 1, al concluir la primera década del siglo XXI, la ciencia española no es despreciada ni despreciable: las contribuciones de nuestro país publicadas en revistas internacionales indexadas nos sitúan en el puesto nº 9 en cuanto al número de artículos y en el puesto nº 11 si se tiene en cuenta el número de citas (Datos de la base Web of Knowledge, Figura 1). El profesor Luis Oro<sup>6</sup> ha señalado acertadamente que la mejora en impacto es algo más lenta que la observada en producción, pero así y todo hay que decir que algunas áreas de la ciencia española son más influyentes de lo que correspondería a su producción. Entre estas áreas hay que destacar la química, la física, las matemáticas y la ciencia de materiales (Figura 1). Tampoco podemos por menos que hacer notar que la química es, según estos datos bibliométricos, la primera ciencia española en cuanto a impacto internacional, algo que no suele decirse ni tenerse en cuenta a la hora de promover, por ejemplo, centros de investigación de alto nivel. Sin embargo, el profesor Nazario Martín<sup>7</sup> señala en su reciente análisis sobre los logros y retos de la química española que, si bien España ocupa el séptimo lugar en número de citas en química, desciende al puesto vigésimo si se consideran las patentes en este campo. Asimismo, la presencia de la investigación española en la gama alta de la I+D es todavía manifiestamente mejorable. Por tanto, como señala el profesor Martín, aunque se ha logrado mucho, queda aún mucho por hacer.<sup>7</sup> Para ello, además de un apoyo sostenido y suficiente de la actividad investigadora, otras formas de gestionar la I+Dpodrían ser útiles.

# Algunos aspectos generales de la gestión de la I+D+i

La descripción de todos los procesos involucrados en la generación de conocimiento se ha ido haciendo progresivamente más compleja, algo que no siempre ha contribuido a clarificar las cosas. Así, los acrónimos comúnmente utilizados se han ido haciendo más complejos, pasando de la mera I a la I+D y a la I+D+i (investigación, desarrollo e innovación). Quizá una definición práctica de la relación entre estos conceptos pase por considerar dos ámbitos como son el conocimiento y los recursos económicos (Figura 2). La investigación (I) consistiría en la transformación de dichos recursos en conocimiento científico, en su sentido más amplio. El desarrollo y la innovación (D+i), por el contrario, consistiría en la transformación de dicho conocimiento en beneficios económicos, a través de una inversión adicional, completando



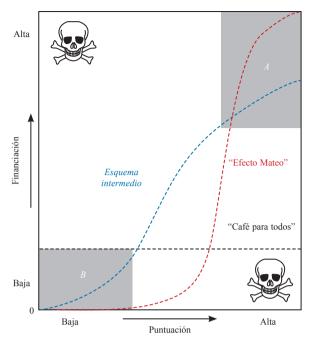
**Figura 2.** Una representación esquemática del *círculo virtuoso* de la I+D+i.

así un círculo *virtuoso* de la I+D+i.<sup>8</sup> El beneficio esperable en el retorno económico se ha estimado en torno a un factor de dos para la industria química. Es decir: por cada euro/dólar invertido en I+D+i, la sociedad en su conjunto recupera alrededor de dos al cabo de siete años.<sup>9</sup> Por consiguiente, una inversión consistente por parte de los poderes públicos y de la iniciativa privada a lo largo de toda la cadena de valor permitiría explicar el beneficio obtenido por las sociedades que son capaces de completar de forma eficiente este *círculo virtuoso*.

Sin embargo, la gestión de este ciclo es bastante complicada y no está exenta de riesgos porque a priori no es obvio qué parte del conocimiento nuevo generado por la investigación se traducirá en retornos al tejido económico. Así, si imaginamos el nuevo conocimiento como un iceberg, la parte sumergida (la de mayor volumen) correspondería a la investigación básica y la parte emergida correspondería al desarrollo tecnológico visible, fácilmente percibido por la sociedad (y por sus representantes) como beneficioso (Figura 3). Por tanto, no es extraño que muchos responsables políticos tengan la tentación de promover la investigación aplicada y tecnológica en detrimento de la investigación básica, 10 pensando instintivamente que así se aumenta la eficiencia del ciclo. dando lugar a un modelo similar a la mushroom rock (Kansas, EEUU) representada en la Figura 3. Este modelo, aunque tentador (y más en tiempos de crisis) no suele funcionar. 11 Por tanto, se hace necesaria una gestión de la I+D+i basada en (a) un desarrollo de la investigación regido por el nivel científico de las propuestas, y (b) una inversión público-privada a lo largo de todo el ciclo de la I+D+i, con el fin de obtener



**Figura 3.** Dos modos alternativos de distribuir el esfuerzo en I+D, según el énfasis en la ciencia básica o en las aplicaciones tecnológicas.



**Figura 4.** Esquemas de financiación de programas de I+D. Distribución más o menos exigente de recursos según los méritos acreditados por los investigadores o grupos de investigación solicitantes.

retornos a medio plazo. Esta inversión debe ser consistente a lo largo del tiempo y por tanto no debe sufrir cambios bruscos o cortes que interrumpan el ciclo descrito en la Figura 2.

A la hora de financiar las diferentes propuestas, caben diferentes modelos.<sup>12</sup> Uno sería el conocido (y denostado) "café para todos" según el cual la financiación a los diversos agentes sería la misma, independientemente de los méritos aportados o de la puntuación obtenida (Figura 4). Otro modelo extremo sería el basado en el llamado "efecto Mateo", 13 según el cual unos pocos investigadores o grupos serán los beneficiarios, dejando al resto fuera del programa. Naturalmente, entre estos dos modelos extremos caben multitud de esquemas intermedios que permitirían a más grupos de investigación acceder a fuentes de financiación de I+D, si bien con presupuestos más limitados. El modelo "café para todos" puede desmotivar a los investigadores que consideren que sus logros no son tenidos en cuenta, pero el "efecto Mateo", aplicado sin matices a toda una comunidad científica, puede desertificar un sistema de I+D al dejar fuera del mismo a agentes que, sin ser de un nivel excepcional, son también necesarios y contribuyen al volumen investigador de una colectividad. Por tanto, a unas clases científicas "rica" y "pobre" marcadas como A y B respectivamente en la Figura 4, hay que añadir una clase científica "media" que no hay que descuidar y que suele ser la primera víctima de los recortes en I+D, seguida de la "rica", que frecuentemente requiere de muchos recursos para mantener su nivel de actividad, tanto en cantidad como en calidad. En todo caso, es imprescindible evitar sobrefinanciar a grupos, personas o proyectos con baja calidad científica, así como reducir significativamente la financiación de aquéllos que hayan demostrado un elevado nivel investigador. Estas dos áreas a evitar se señalan también en la Figura 4. Por último, hay que señalar que las personas (más que los proyectos) son los elementos más importantes de un esquema de I+D+i. Si se tiene en cuenta que, al menos por el momento, las universidades públicas son, desde un punto de vista cuantitativo, los principales agentes de investigación de nuestro país, existe el problema de que estos centros tienen unos sistemas se selección y promoción muy rígidos que no siempre favorecen el desarrollo de una carrera investigadora de alto nivel e independencia. <sup>14</sup> Citando de nuevo a Nazario Martín, el sistema de contratación de jóvenes profesores en las universidades debería ser revisado en profundidad, si se desea promover la excelencia. <sup>7</sup> Una posibilidad consiste en el desarrollo de entidades más flexibles, capaces de adaptarse más fácilmente al nuevo marco de juego basado en la internacionalización y la evaluación constante.

En este contexto, el Gobierno Vasco ha promovido la creación de Ikerbasque, la Fundación vasca para el avance de la ciencia, con fin de impulsar la investigación científica. Como veremos más adelante, los ejes en que se orienta la actividad de esta Fundación se alinean en torno al modelo *iceberg* (promoción de la investigación básica procurando no perder oportunidades para que los resultados de ésta puedan hacerse visibles o transferibles), a la financiación de personas más que de proyectos y al carácter selectivo "fuerte" (efecto Mateo). Su actividad es, por tanto, complementaria al resto del sistema vasco de ciencia y tecnología, buscando contribuir a optimizar sus fortalezas.

#### La Fundación Ikerbasque

La política de Ciencia, Tecnología e Innovación promovida por el Gobierno Vasco tiene un recorrido que se remonta a cerca de tres décadas, habiéndose caracterizado por su continuidad a lo largo del tiempo, tanto en lo que se refiere a sus obietivos como a sus actuaciones más señaladas. En el ámbito científico. Euskadi cuenta con un sistema de ciencia que ha crecido en capacidades de una manera importante en los últimos años. Con su núcleo principal en la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, el sistema de ciencia del País Vasco presenta sus mayores capacidades en varias disciplinas asociadas a las ciencias experimentales (física, química, ciencias de materiales y medicina, principalmente) aunque en los últimos años se aprecia una diversificación hacia áreas científicas de carácter transversal e interdisciplinar (biomedicina, TICs) y una mayor presencia de las ciencias sociales y humanidades. Cuenta además con un buen conjunto de escuelas de ingeniería y una nutrida oferta de escuelas de negocio. En términos generales los mayores retos del sistema científico vasco pasan por incrementar su productividad científico-tecnológica -fundamentalmente en investigación básica y en patentes internacionales-, su proyección internacional y su conectividad con el resto de agentes tecnológicos y empresariales.

Uno de los objetivos fundamentales para aumentar y mejorar la productividad científica en el País Vasco es el crecimiento y la consolidación de la comunidad científica. Estimaciones realizadas a partir de datos estadísticos permiten concluir que el sistema vasco de ciencia podría absorber hasta unos 200 investigadores senior en sus diferentes áreas simplemente para ponerse al nivel de la Europa de la zona euro. En este contexto, tomando como referencia las economías europeas más avanzadas, Euskadi se puso como objetivo reducir el dife-

rencial de investigadores por cada mil habitantes, respecto a la media europea. Para ello, el Gobierno Vasco y las diferentes instituciones que componen el sistema vasco de ciencia han puesto en marcha instrumentos para la captación, retención y desarrollo del talento científico, en línea con la estrategia *Triple R* europea, consistente en "reclutar, retener y repatriar".

En este contexto, y con el objetivo de reforzar la componente de Ciencia del Sistema Vasco de Innovación, el Departamento de Educación, Universidades e Investigación del Gobierno Vasco creó en diciembre de 2006 Ikerbasque, la Fundación Vasca para la investigación científica. El nombre de la Fundación combina la raíz *Iker(tu)* (en euskera: Investigar) con el término inglés *Basque*, lo que pretende reflejar el carácter internacional, no endogámico, de esta iniciativa. Así pues, Ikerbasque persigue el refuerzo de las capacidades de los sistemas locales de ciencia a través de la incorporación de científicos a la comunidad científica vasca y el impulso de nuevos centros de investigación básica de excelencia (*BERC, Basque Excellence Research Centres*).

Uno de los factores clave para el éxito de un programa de atracción de talento investigador es la evaluación. Ésta debe ser meticulosamente diseñada y contar con profesionales altamente cualificados y con experiencia en el ámbito científico internacional, que puedan valorar los perfiles y proyectos de investigación propuestos. Hay que destacar que, si bien muchos de los indicadores bibliométricos de cantidad y calidad en la producción investigadora están bien establecidos y son ampliamente aceptados por la comunidad científica internacional, existen muchos factores imponderables que requieren una evaluación pormenorizada de las diferentes situaciones individuales que pueden presentarse. Por consiguiente, no es posible establecer procedimientos automatizados y se hace necesaria una evaluación cuidadosa bajo la supervisión y coordinación de un panel de expertos. En consecuencia, Ikerbasque cuenta con un sistema de evaluación en dos niveles. En primer lugar, contamos con un Comité Científico Asesor, formado por investigadores del más alto nivel internacional y con experiencia en la evaluación y gestión de la I+D. Ninguno de ellos desempeña su actividad investigadora en el País Vasco. En segundo lugar, Ikerbasque cuenta con un conjunto de evaluadores que actúan según los procedimientos habituales del peer review. Dicho conjunto de evaluadores constituye una base de datos internacional elaborada de acuerdo con las prescripciones de la Unión Europea, y está formada por científicos adscritos a todas las áreas de investigación. Este conjunto de evaluadores es coordinado por el Comité Científico Asesor.

En el caso de la convocatoria *Ikerbasque Research Professor*, nuestra Fundación ofrece un contrato indefinido para científicos de alto nivel internacional capaces de desarrollar líneas de investigación independientes. Los criterios de evaluación se basan en tres ejes principales: (i) qué ha hecho hasta ahora el candidato (básicamente, su *curriculum vitae*), (ii) qué se propone hacer en el caso de ser aceptado (es decir, en líneas muy generales, su proyecto investigador para los tres próximos años) y (iii) qué oportunidad estratégica supondría su incorporación al sistema científico del País Vasco.

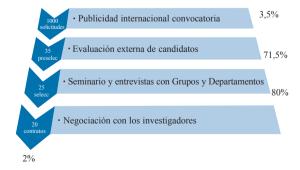
Todas las solicitudes que cumplen con los requisitos mínimos de cada convocatoria y superan una criba preliminar efectuada por el Comité Científico Asesor, se envían a un mínimo

de dos evaluadores externos. Si esas dos evaluaciones fueran muy dispares entre sí, los miembros del Comité Científico Asesor deciden si es necesario contactar un tercer evaluador. Una vez evaluadas doblemente todas las solicitudes, los asesores emiten su evaluación particular, que toma en cuenta todas las evaluaciones particulares e individuales, y en una reunión plenaria se determinan los criterios comunes de valoración de las solicitudes para cada convocatoria. Como resultado de todo ello, el Comité define una lista de candidatos a la incorporación a alguna de las instituciones de investigación del País Vasco. Tras la evaluación, los candidatos seleccionados son invitados a dar un seminario en su(s) centro(s) de adscripción potencial(es), y a conocer de cerca el entorno, en el caso de que no lo conocieran antes. Esta fase es fundamental para refinar la lista de candidatos que serían más adecuados a las capacidades de nuestro sistema. Los candidatos que tras la visita cuentan con una opinión favorable de la institución de acogida, y mantienen el interés por venir a Euskadi, negocian con Ikerbasque sus condiciones particulares de incorporación.

La evaluación tiene en cuenta las recomendaciones internacionales para la correcta y ética evaluación de investigadores, y en ese sentido, Ikerbasque ha suscrito la Carta Europea del Investigador y el Código Ético y de Conducta de las instituciones que contratan investigadores, y por ello ha sido reconocida con el sello HR Excellence in Research que concede la Unión Europea. Hay que señalar que el proceso en su conjunto es tremendamente exigente, con una tasa de éxito en la convocatoria sénior de tan sólo el 2%. Todo este proceso se representa de forma esquemática en la Figura 5, junto con las tasas de éxito promedio de cada una de las etapas. Por todo ello, la convocatoria de Investigadores sénior (Ikerbasque Research Professor) se inscribiría en la estrategia marcada en rojo en la Figura 4, en la que unos pocos investigadores reciben todos los recursos. Asimismo, este programa se inscribe en la línea de financiar personas más que proyectos, si bien el proceso de selección tiene en cuenta estos proyectos de forma indirecta (criterio de evaluación ii, véase más arriba).

Además de esta convocatoria de Ikerbasque, se organiza anualmente otra (denominada *Visiting Fellowships*), con contratos de entre 6 y 12 meses, ligados al desarrollo de proyectos o partes específicas de proyectos con grupos de investigación de nuestra comunidad.

Hay que destacar que, en el caso de los *Ikerbasque Research Professors* adscritos a la universidad pública (Universidad del País Vasco-*Euskal Herriko Unibertsitatea*,



**Figura 5.** Proceso de selección y evaluación de la convocatoria *Research Professor* de Ikerbasque. Los porcentajes aproximados de éxito en cada etapa se indican al lado de la misma.

UPV/EHU), las rigideces del sistema público de contratación hicieron difícil el encaje de estos investigadores en el claustro de profesores de dicha institución. Tras un complejo análisis por parte de los Servicios Jurídicos de la UPV/EHU, se llegó a establecer para estos investigadores la figura de Profesor Visitante con dedicación exclusiva en materia de investigación, lo que permitía el acceso de éstos a las infraestructuras de investigación universitarias, a la docencia de posgrado y a la dirección de tesis doctorales y proyectos de investigación. También se estableció la figura de colaborador honorífico de la Universidad para investigadores Ikerbasque en centros de investigación, como por ejemplo los BERCs. Esta solución está lejos de ser la óptima, pero ha sido la única que ha podido establecerse para compatibilizar el exigente -e independiente- proceso de selección de Ikerbasque con el acceso al claustro de profesores de una Universidad pública. Imaginamos que este problema es común a la Universidad pública española.

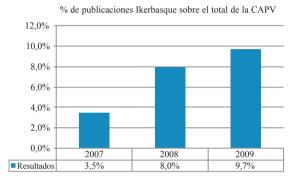
En 2012 se ha puesto en marcha una convocatoria denominada Research Fellows, para investigadores postdoctorales, que todavía no han alcanzado la etapa de maduración suficiente como para ser líderes de grupos de investigación. Esta convocatoria es del tipo tenure-track (aunque no lo sería estrictamente, como se interpreta en ambientes anglosajones), según la cual los investigadores seleccionados son contratados por un periodo de 5 años, para incorporarse a grupos de investigación establecidos en cualquiera de los agentes del sistema vasco de ciencia. En su cuarto año, los interesados se podrán presentar a la convocatoria Research Professors, para consolidar su puesto, de manera que hacia el final de su quinto año ya conocerán si tendrán continuidad y estabilidad en nuestro sistema, o deben buscar otras oportunidades. Así, se espera que un porcentaje apreciable de los Research Fellows serán capaces de dar un salto cualitativo y cuantitativo a su carrera, y alcanzar así el nivel exigido en la convocatoria para investigadores sénior.

Una de las debilidades del sistema vasco de I+D es su estancamiento en lo que se refiere a la participación de las mujeres, que se mantiene invariable en torno al 33% (el de Ikerbasque es aún más bajo, en torno al 12%). Esperamos que mediante este último programa junior seremos capaces de mejorar este indicador.

Por el momento, el 15% de los investigadores Ikerbasque es de origen español (aunque la mayoría de ellos han desarrollado su carrera investigadora en el extranjero), el 58% proviene de otros países europeos y el 27% proviene del resto del mundo, fundamentalmente Norteamérica, y América Latina. Las ciencias experimentales y las matemáticas suponen algo más de la mitad (55%) de los 190 investigadores captados por la fundación (programas Research Professor y Visiting Fellow), y el resto se reparte entre ciencias médicas (9%), ciencias sociales (18%), tecnología (12%) y humanidades (6%). Es interesante destacar que esta distribución por áreas refleja también aquellos campos científicos en los que la Comunidad del País Vasco es más productiva en términos de investigación básica, lo que hace que sean más atractivas para investigadores de fuera del sistema. Tenemos pues, nuevamente, un esquema de selección que promociona las áreas de investigación más potentes, produciendo un "efecto Mateo" en la distribución temática de nuestra I+D.

#### Algunos resultados

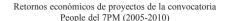
El efecto de la contratación de investigadores sénior ha tenido un impacto directo y bastante inmediato en el aumento de la producción científica con visibilidad internacional de Euskadi. Ikerbasque, en su Plan Estratégico para el periodo 2010-2013 propuso convertirse en la principal entidad generadora de ciencia en Euskadi, en relación a su número de investigadores, y los datos auguran que dicho objetivo será alcanzado. Así, pese a constituir un porcentaje muy pequeño de la población investigadora del País Vasco, Ikerbasque representa ya casi el 10% del total de la producción investigadora vasca indexada en bases de datos internacionales (Figura 6).

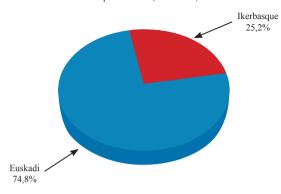


**Figura 6.** Porcentaje de publicaciones de investigadores Ikerbasque sobre el total de la producción investigadora de la Comunidad Autónoma del País Vasco.

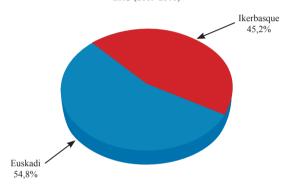
Además de lograr objetivos científicos, la capacidad de los investigadores de este perfil de ser competitivos en las convocatorias nacionales e internacionales para el desarrollo de provectos de investigación ha contribuido a aumentar los retornos de Euskadi en todo tipo de convocatorias. Esto tiene como consecuencia un impacto económico directo sobre el tejido industrial y social del País Vasco. Dado el origen competitivo de estos fondos, la ausencia de propuestas solventes presentadas por investigadores Ikerbasque hubiera resultado en la asignación de dichos fondos a otras comunidades autónomas o a otras regiones europeas. Asimismo, la presencia de Ikerbasque en los programas europeos más competitivos es ya significativa, si tenemos en cuenta el corto tiempo de vida de Ikerbasque y el tiempo medio que lleva a los investigadores establecerse de manera efectiva en sus nuevos puestos (Figura 7). Así, cabe concluir que la participación de los investigadores Ikerbasque en convocatorias de I+D competitivas y externas supone un retorno económico inmediato para la Comunidad Autónoma del País Vasco. Asimismo, hay que señalar que Ikerbasque ha obtenido financiación europea del Programa Cofund por valor de otros 7 millones de euros.

Nuestros estudios indican que, si se tiene en cuenta la financiación total obtenida de fuentes competitivas por los investigadores Ikerbasque, cada euro puesto en juego por el Departamento de Investigación, Universidades e Investigación del Gobierno Vasco a través de Ikerbasque resulta en el retorno de dos euros al tejido económico productivo. Por tanto, cabe concluir que, pese a que en principio Ikerbasque tiene como





Retornos económicos de Grants de las convocatorias ERC (2009-2010)



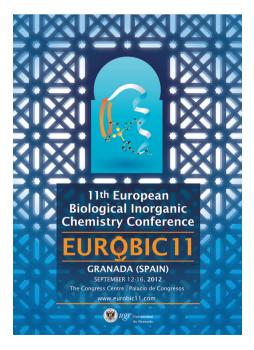
**Figura 7.** Retornos económicos obtenidos por investigadores Ikerbasque de programas europeos.

principal objetivo la promoción de la investigación básica, cuyos retornos económicos inmediatos no son en principio esperables, el desempeño de su actividad es sostenible económicamente a corto plazo.

Personalmente, pienso que este modelo, ya ensayado en varias comunidades autónomas, con sus lógicas peculiaridades podría ser extendido o incorporado a la política nacional de I+D+i, mediante una adecuada coordinación en un marco institucional estable y con una financiación sostenida.

#### Bibliografía

- B. Bueno de Mesquita, J. D. Morrow, *International Security* 1999, 24, 56–73.
- 2. J. S. Katz, Research Policy 2006, 35, 893-909.
- 3. A. Rivera, El gasto en *I+D* sube en EEUU, Francia y Alemania y cae un 25% en España. *El País*, 10/05/2012, http://bit.ly/JBUeNM (último acceso: 23/05/2012).
- 4. A. Moro-Martín, Nature 2012, 482, 277.
- S. Ramón y Cajal, Los tónicos de la voluntad. Reglas y consejos sobre investigación científica. Gadir, Madrid, 2005.
- 6. L. A. Oro, Arbor 2011, 169-172.
- 7. N. Martín, Angew. Chem. Int. Ed. 2012, 51, 3280-3281.
- F. P. Cossío, C. M. Romeo-Casabona, P. L. Arias, La transferencia de los resultados de la ciencia. Gestión de la propiedad industrial en universidades y organismos públicos de investigación. En: La gestión y organización de la ciencia (Eds.: A. M. Romero, A. I. Caro), Tirant lo Blanch, Valencia, 2012, pp. 293–310.
- 9. J. Long, Chemical & Engineering News 2001, 79 (24), 5. Véase también: P. H. Hsich, C. S. Mishra, D. H. Gobeli, D. H., IEEE Transactions on Engineering Management 2003, 50, 141–150.
- J. C. Rodriguez-Ibarra, Arrimar el hombro. El País, 26/10/2009, http://bit.ly/LEHgSi (último acceso: 23/05/12).
- 11. A. Zewail, Nature 2010, 468, 347.
- 12. J. P. A. Ioannidis, Nature 2011, 477, 529-531.
- 13. La denominación se basa en este evangelista, que en la parábola de los talentos escribió: *Porque a todo el que tiene se le dará y le sobrará*; *pero al que no tiene, aun lo que tiene se le quitará* (*Mt.* 25, 29).
- 14. E. Lamo de Espinosa, *Claves de Razón Práctica* **2012**, *221*, 32–39



#### El profesor Nazario Martín, Premio de Investigación Jaime I



Prof. Nazario Martín

Nazario Martín, catedrático de Química Orgánica de la Universidad Complutense, ha sido galardonado con el Premio Rey Jaime I de Investigación Básica 2012. El fallo del jurado, presidido por Santiago Grisolía, se hizo público en el Palau de la Generalitat de Valencia el martes 5 de junio. El galardón reconoce la labor de investigación del profesor Nazario Martín en la química de las nanoestructuras de carbono, como los fullerenos y los nanotubos de carbono. Un total de 22 Premios Nobel participan como jurados en los Premios Rey Jaime I, además de 90 personalidades del ámbito de la medicina, la investigación, la economía, el medio ambiente, las nuevas tecnologías y la iniciativa empresarial.

#### Premios de la RSEQ 2012

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

#### Premio a la Investigación y Medalla de la RSEQ 2012 Patrocinado por FEIQUE

Prof. Nazario Martín Catedrático de Química Orgánica en la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid y Director Adjunto de IMDEA-Nanociencia.

Nazario Martín León se graduó en la Universidad Complutense de Madrid (UCM) donde obtuvo el grado de Doctor en 1984 bajo la dirección del Prof. C. Seoane. Realizó su estancia postdoctoral con el Prof. Michael Hanack en Tübingen (Alemania) en 1987-1988, trabajando en compuestos orgánicos eléctricamente conductores. En 1994, fue Profesor visitante en el Instituto de Polímeros y Sólidos Orgánicos (IPOS) de la Universidad de California en Santa Barbara (UCSB), trabajando con el Prof. Fred Wudl en fullerenos. Actualmente, es Catedrático de Química Orgánica en la UCM y Director Adjunto del nuevo Instituto IMDEA-Nanociencia de la Comunidad de Madrid. El Profesor Martín ha sido profesor visitante en las universidades de California en Los Angeles (UCLA) y en las universidades de Angers y Estrasburgo (Francia).

La investigación del Prof. Martín abarca diferentes tópicos con especial énfasis en la química de nanoestructuras de carbono tales como fullerenos, nanotubos de carbono y grafenos, sistemas  $\eta$ -conjugados como cables molecula-

res, y moléculas electroactivas en el contexto de procesos de transferencia electrónica, aplicaciones fotovoltaicas y nanociencia. Nazario Martín ha dirigido 23 tesis doctorales, publicado más de 420 artículos en revistas científicas. co-editado 6 libros y editado siete números especiales en revistas de prestigio internacional. Ha sido Editor General de Anales de Química (2000-2005) y miembro del comité asesor internacional de The Journal of Materials Chemistry (2000-2006) y del comité editorial de Chemical Communications (2006-2011). Actualmente, es el Editor regional para Europa de Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. Desde enero de 2008 es miembro del comité asesor internacional de las revistas The Journal of Organic Chemistry y ChemSusChem. Recientemente ha sido nombrado miembro del comité asesor de ChemPlusChem y de Chemical Society Reviews. Es Fellow of the Royal Society of Chemistry (UK), miembro de la Real Academia de Doctores de España, y en 2007 recibió el Premio Dupont de la Ciencia. Ha escrito numerosos artículos de opinión en diarios de ámbito nacional y en revistas nacionales e internacionales (Angewandte, Chemistry World). Nazario Martín ha sido Presidente de la Real Sociedad Española de Ouímica de enero de 2006 a enero de 2012.

#### Premios de Áreas

# **Ingeniería Química**Patrocinado por CEPSA



Prof. Ángel Irabien

Catedrático de Ingeniería Química en la Universidad de Cantabria.

Ángel Irabien se licenció en Ciencias Químicas en la Universidad del País Vasco (UPV-EHU), donde alcanzó el grado de Doctor en 1982 bajo la dirección del profesor Arturo Romero. Tras realizar una estancia predoctoral, disfrutando de una beca

de la DAAD en la Friedrich-Alexander Universität (Erlangen-Nürnberg, Alemania) bajo la supervisión del Profesor Hanns Hofmann, comenzó su actividad docente en la Facultad de Ciencias de la UPV-EHU. Realizó su estancia postdoctoral en el Kings College de la Universidad de Londres con una beca Fleming (British Council-MEC). Desde 1991 es Catedrático de la ETSIIyT de la Universidad de Cantabria, donde ha puesto en marcha diferentes programas de estudio en el ámbito de la Ingeniería Química. Es miembro del *Executive Board* de la Federación Europea de Ingeniería Química (EFCE), Presidente de la Sección *Environmental Protection and Sustainability* de la misma y Editor en Jefe de la revista *Low Carbon Economy*.

Ha publicado más de 170 documentos científico-tecnicos, tres patentes en colaboración con industrias y ha supervisado 25 tesis doctorales. En los últimos años, ha desarrollado diversas actividades de gestión académica en la UC. Ha ocupado también el cargo de Director General de Medio Ambiente del Gobierno de Cantabria en el período 2003-2005.

#### **Ouímica Física**

#### Patrocinado por Bruker Española



Prof. Josep Maria Poblet

Catedrático de Química Física en la Universidad Rovira i Virgili de Tarragona.

Josep Maria Poblet nació en Valls (Tarragona) en 1956. Se licenció en Química por la Universidad de Barcelona en 1979 y se doctoró por la misma universidad en 1983 bajo la dirección del Profesor Enric Canadell. Tras una estancia postdoc-

toral en el Laboratorio de Química Cuántica de la Universidad Louis Pasteur de Estrasburgo bajo la supervisión del Profesor Marc Bénard, en 1986 obtuvo una plaza de Profesor Titular de Química Física en la Universidad Rovira i Virgili de Tarragona, de la que es Catedrático de Química Física desde 2001, director del grupo consolidado Química Cuántica (www.quimica.urv.es/~w3qf/) desde 2009, y director del Departamento de Química Física e Inorgánica desde 2011.

Ha sido profesor o investigador visitante de la Universidades de Emory (Atlanta), Estrasburgo, e International Jacobs University de Bremen.

Su investigación actual se centra en la utilización de los métodos de la química teórica al estudio estructural y electrónico de nanosistemas con presencia de metales de transición, con particular atención a las propiedades de óxidos moleculares de metales de transición, también conocidos como polioxometalatos. Ha sido coordinador de un COST working group entre 2004-2006 dedicado al estudio de estos sistemas. Recientemente, también se ha interesado por las propiedades estructurales, reactivas y topológicas de fulerenos, metalofulerenos y otras nanoformas de carbono, para los que ha establecido reglas generales de comportamiento. Es autor de más de 160 artículos científicos y ha supervisado diez tesis doctorales. Mantiene colaboraciones estables con diversos grupos de investigación de todo el mundo. Cabe destacar su relación con numerosos grupos experimentales a lo largo de su trayectoria científica.

#### **Química Inorgánica** Patrocinado por Bruker Española



Prof. Eduardo Peris

Catedrático de Química Inorgánica en la Universitat Jaume I de Castellón.

Eduardo Peris obtuvo su tesis Doctoral en la Universitat de Valencia, bajo la dirección del profesor Pascual Lahuerta en 1991. Desde 1992 a 1995 realizó estancias postdoctorales con los profesores Vernon Gibson (Durham University), Brian Mann (University of

Sheffield), Cornelius Elsevier (University of Amsterdam) y Robert H. Crabtree (University of Yale). La investigación desarrollada en este periodo último permitió caracterizar un nuevo tipo de interacción de enlace de hidrógeno ente ácidos próticos e hidruros de metales de transición, actualmente conocida como 'enlace de

dihidrógeno'. Estos resultados han sido recogidos en varios libros de Química Inorgánica General y de Química Organometálica. A finales de 1995 se incorporó a la Universitat Jaume I, donde puso en marcha el laboratorio de Química Organometálica y Catálisis Homogénea. El Prof. Peris desarrolla tres líneas de investigación sobre Estudio de propiedades electrónicas y ópticas de compuestos organometálicos con sistemas conjugados, Síntesis de metalodendrímeos conjugados de ferroceno, y Preparación de nuevos compuestos con ligandos de tipo Carbeno-N-Heterocíclico y estudio de sus propiedades catalíticas. Dentro esta última línea, actualmente desarrolla procesos para la obtención de compuestos de naturaleza heterometálica para el diseño de reacciones catalíticas de tipo tándem. Eduardo Peris ha dirigido ocho tesis doctorales y es autor de más de 120 artículos. Ha sido miembro del comité asesor internacional de Organometallics durante el período 2007-2009.

# **Química Orgánica**Patrocinado por Janssen Cilag España



Prof. Pablo Ballester

Profesor de Investigación ICREA en el Institut Català d'Investigació Química (ICIQ).

Pablo Ballester nació en Palma de Mallorca en 1959. Se graduó en Ciencias Químicas por la Universitat de les Illes Balears (UIB) y presentó su doctorado en 1986 en la misma Universidad bajo la dirección del Profesor Ramón Mestres Quadreny. Tras realizar una

estancia postdoctoral con el Profesor Julius Rebek Jr. en la University of Pittsburgh, EEUU, regresó a la UIB como becario posdoctoral de reincorporación trabajando en el grupo dirigido por el Profesor José M. Saá. A finales de 1988 retornó a EEUU para reincorporarse de nuevo al grupo del Profesor Rebek con el que se trasladó al *Massachusetts Institute of Technology* en 1989. Obtuvo una plaza de Profesor Titular de Universidad de

la UIB en 1991, donde trabajó en catálisis asimétrica y en química supramolecular y desempeñó diversos cargos de gestión académica. Ha sido científico visitante en la compañía Cubist Pharmaceuticals, Inc (Cambridge, MA, EEUU) y en el Scripps Research Institute (La Jolla, CA, EEUU) siendo nombrado Profesor de Investigación Asociado. A finales de 2004 consiguió una plaza de Profesor de Investigación ICREA (Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats) y se trasladó al Institut Català d'Investigació Química (ICIQ) como responsable de grupo.

Desde 1994, el Prof. Ballester ha desarrollado su actividad como investigador en las áreas de Química Supramolecular y Química Orgánica Física y ha publicado más de ciento cincuenta publicaciones científicas. Ha escrito seis capítulos de libros y dirigido cuatro tesis doctorales. En la actualidad, sus proyectos de investigación se centran en el estudio de cápsulas moleculares con interiores polares, síntesis de arquitecturas supramoleculares mediante enlaces mecánicos, caracterización termodinámica de procesos de auto-ensamblaje molecular y desarrollo de nuevas metodologías de catálisis supramolecular.

#### **Química Analítica** Patrocinado por la RSEQ



Prof. José Manuel Pingarrón

Catedrático de Química Analítica en la Universidad Complutense de Madrid.

José Manuel Pingarrón obtuvo el grado de Doctor por la Universidad Complutense de Madrid en 1981. Entre los años 1982 y 1983 realizó su estancia postdoctoral en la École Nationale Supérieure de Chimie de Paris bajo la supervisión de los Prof. Bernard

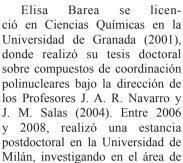
Trémillon and Jacques Devynck, trabajando en baterías recargables de litio. En 1997 fue Profesor visitante en el Departamento de Química de la Universidad de Cornell, New Cork, con el Prof. Héctor Abruña. Desde 1994, es Catedrático de Química Analítica en la Universidad Complutense de Madrid. El Prof. Pingarrón ha sido Director del Departamento de Química Analítica de la Facultad de Ciencias Químicas de dicha Universidad en el periodo de 1998 a 2006, así como Presidente de la Sociedad Española de Química Analítica desde 1998 a 2001. Ha reci-

bido la Medalla de la Facultad de Ciencias Químicas y la Medalla de la Universidad Complutense de Madrid.

Su labor investigadora se centra en la electroquímica analítica, las interfases electroquímicas nanoestructuradas y los sensores y biosensores electroquímicos y piezoeléctricos, teniendo como objetivo promover sinergias de conocimientos y aplicaciones de disciplinas como química analítica, ciencia de superficies, nanociencia, biología molecular y química clínica. Es autor de más de 250 publicaciones y ha dirigido 20 tesis doctorales. Es Editor Asociado de la revista Electroanalysis y pertenece al comité editorial de Journal of Electroanalytical Chemistry, Talanta, Analyst y Chemical Sensors. El Prof. Pingarrón ha sido miembro de la División de Química Analítica de la Federación de Sociedades Químicas Europeas e Instituciones Profesionales (FECS) entre 2004 y 2010, vicepresidente del Grupo especializado de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química entre 1996 y 2001 y miembro de la junta directiva de la Real Sociedad Española de Química entre 2002 y 2011. Actualmente es miembro titular de la División de Química Analítica de la IUPAC. Finalmente, el Prof. Pingarrón fundó en 2006 la empresa de base tecnológica InBea Biosensores S.L. con sede en el Parque Científico de Madrid.

#### Premios de Investigadores Noveles Patrocinado por Sigma Aldrich

Profesora Titular. Universidad de Granada.



los clusters organometálicos de renio. En 2008, se incorporó a la Universidad de Granada con un Contrato de Incorporación de Doctores y, posteriormente, un contrato Ramón y Cajal. Es Profesora Titular de Universidad desde 2011. Su investigación se centra en el estudio de redes metalorgánicas abiertas para aplicaciones industriales, medioambientales y biológicas. Es autora de más de 35 publicaciones científicas y ha sido galardonada con el Premio Carrefour al Mejor Trabajo de Investigación en Medioambiente en 2005, el Premio Universidad de Granada a Trabajos de Investigación de Excelencia en 2008, y el Premio del Consejo Social de la Universidad de Granada a la Trayectoria de Jóvenes Investigadores 2011.



Dra. Elisa Barea

Investigador Ramón y Cajal. Universidad del País Vasco.

Emilio J. Cocinero (1978) completó su Doctorado en Química en 2005 bajo la dirección de los profesores José L. Alonso y Alberto Lesarri en la Universidad de Valladolid. Su trabajo de tesis, basado en el estudio de la estructura de aminoácidos por medio de la espectroscopía de microondas, fue reconocido con el Premio

Extraordinario de dicha Universidad. En 2006 se trasladó a la Universidad de Oxford (Reino Unido) formando parte del grupo del Prof. John P. Simons donde adquirió experiencia en el manejo de láseres para el estudio de la estructura tridimensional de azúcares. En enero de 2009 se vinculó a la Universidad del País Vasco, primero como Investigador Juan de la Cierva, y desde 2011 como Investigador Ramón y Cajal donde dirige una línea de investigación centrada en el estudio de moléculas biológicas como aminoácidos, azúcares y fármacos, generados y estabilizados en fase gas a bajas temperaturas, mediante diferentes técnicas espectroscópicas.



Dr. Emilio J. Cocinero



Dra. María del Carmen Giménez López

Royal Society Research Fellow. Universidad de Nottingham.

Maria del Carmen Giménez López obtuvo el título de Doctor en Químicas por la Universidad de Valencia en 2006 bajo la supervisión del Prof. Eugenio Coronado y del Dr. Francisco Romero en el área de Magnetismo Molecular. Posteriormente se trasladó a la Universidad de Nottingham (UK) donde realizó una estancia postdoctoral trabajando en la síntesis y funcionalización de moléculas para la formación de nanoestructuras bidimensionales, bajo la supervisión de los Profs. Neil Champness y Andrei Khlobystov. En 2009 se incorporó al grupo de Nanomateriales de Carbono del Prof. Khlobystov en la Universidad de Nottingham con una beca Marie Curie y desde 2011 es *Royal Society Dorothy Hodgkin Research Fellow* en esa misma institución (http://bit.ly/L0Xj18). Su línea de investigación principal se centra en el diseño de materiales híbridos basados en nanomateriales de carbono que incorporan especies magnéticas para spintrónica.



Dra. Silvia Ortega Gutiérrez

Investigadora Ramón y Cajal. Universidad Complutense de Madrid.

Silvia Ortega Gutiérrez obtuvo el título de Doctora por la Universidad Complutense de Madrid en 2004, bajo la supervisión de la profesora María Luz López Rodríguez. En 2005 se incorporó al grupo del profesor Benjamin F. Cravatt en *The Scripps Research Institute* (California, EEUU) como inves-

tigadora postdoctoral con una beca Fulbright. Desde enero de 2008 es investigadora Ramón y Cajal en el Departamento de Química Orgánica I de la Universidad Complutense de Madrid. Sus líneas de trabajo se centran en las áreas de la química médica y la química biológica con el fin de desarrollar moléculas con interés farmacológico e identificar dianas terapéuticas. Es autora de más de treinta y cinco publicaciones incluyendo revisiones, patentes, capítulos de libros y artículos en revistas de prestigio. Su trayectoria ha sido reconocida por la Federación Europea de Química Médica con la distinción Runner-up of the EFMC Prize for a Young Medicinal Chemist in Academia en 2011.

#### Premio hispano-alemán Elhúyar-Goldschmidt



Prof. Alois Fürstner

Max-Planck-Institut für Kohlenforschung

Alois Fürstner nació en Austria en 1962. Se graduó en 1987 en la Universidad Técnica de Graz (Austria), trabajando bajo la supervisión del Prof. Hans Weidmann. Después de una temporada postdoctoral con el Prof. Wolfgang Oppolzer en la Universidad de Ginebra, y una "habilitación" en

Graz (1992), se unió el Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim, Alemania, del que es Director desde 1998.

El trabajo del Prof. Fürstner se centra en catálisis organometálica, y abarca desde estudios básicos de mecanismos hasta su aplicación a la síntesis total de productos naturales. Sus líneas de investigación incluyen estudios sobre metátesis de alquenos y alquinos, reordenamientos

catalizados por platino y oro, el uso de catalizadores basados en hierro para reacciones de acoplamiento cruzado, reacciones de cicloisomerización y cicloadición, así como el desarrollo de versiones catalíticas de transformaciones estequiométricas de relevancia preparativa. Estos métodos permiten el acceso, conciso y flexible, a muchas moléculas bioactivas, incluyendo macrólidos, alcaloides, terpenos y glicoconjugados complejos. El profesor Fürstner ha recibido varios premios y distinciones, incluyendo el Leibniz de la Fundación de la Ciencia Alemana (1999), el IUPAC Thieme en síntesis química orgánica (2000), el Arthur C. Cope Scholar de la ACS (2002), la Centenary Lectureship de la RSC (2003), el Mukaiyama (2005), el Otto-Bayer-(2006), el Heinrich Wieland (2006), el Janssen Pharmaceutica por su creatividad en síntesis orgánica (2008) y la medalla Prelog de la ETH Zurich (2011). Es miembro de la Academia Alemana de Ciencias Naturales "Leopoldina" y miembro correspondiente de la Academia Austríaca de Ciencias.

#### Premio hispano-francés Catalán-Sabatier



Prof. Michel Armand

CNRS, Amiens

Michel Armand nació en Francia en 1946, se graduó en la École Normale Supérieure en Saint-Cloud, y se doctoró en Física en 1978. Desde 1989 es Director de Investigación en el Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS). Ha sido profesor invitado en Lawrence Berkeley Laboratory (1982-83), profesor en

la Universidad de Montreal (1995-2004) y director del laboratorio internacional en Materiales Electroactivos CNRS-UdM (2000-2004).

Michel Armand se ha dedicado a diversos aspectos teóricos y de aplicación práctica dentro del campo de la electroquímica, incluyendo el uso de electrolitos poliméricos. Es autor de más de 200 publicaciones, de más de 150 patentes y, hasta la fecha, ha dirigido más de 20 tesis doctorales. Es miembro del comité editorial de varias revistas de su ámbito (*Solid-State Ionics, Journal of Applied Electrochemistry, Synthetic Metals, J. Power Sources*). Ha recibido numerosos premios, incluyendo el premio Galileo (2010).

#### Acto Homenaje al Profesor Rafael Suau. 17 de febrero de 2012

El pasado 17 de febrero tuvo lugar en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Málaga (UMA), un sentido homenaje en memoria de nuestro querido amigo y compañero Prof. Rafael Suau Suárez. El acto, organizado por la Sección Territorial de Málaga de la RSEQ y la Facultad de Ciencias de la UMA, presidido por Adelaida de la Calle, rectora de la Universidad de Málaga, actuando en su representación María Valpuesta en calidad de vicerrectora de investigación y transferencia, contó con la intervención del decano de la Facultad de Ciencias, Joaquín Quirante; el presidente de la RSEQ, Jesús Jiménez-Barbero; el presidente del Grupo

Especializado de Química Orgánica de la RSEQ, Joan Bosch; y los profesores Josep Font, María Valpuesta y Ezequiel Perez-Inestrosa.

El decano de la Facultad de Ciencias hizo un recuerdo de la contribución de Rafael Suau a la facultad, desde sus inicios en la anterior sede, siendo un joven catedrático de Química Orgánica recién incorporado a la UMA, hasta su aportación en la dirección del anterior Departamento de Bioquímica, Biología Molecular y Química Orgánica y el actual Departamento de Química Orgánica en la presente localización del campus de Teatinos. Jesús Jiménez-Barbero

recordó la contribución de Rafael Suau en diferentes estamentos de la RSEQ y Joan Bosch glosó la particular dedicación al Grupo de Química Orgánica, resaltando la organización de los numerosos congresos y foros científicos nacionales e internacionales que propició.

El profesor Josep Font hizo un recorrido por los aspectos más relevantes de la aportación científica de Rafael Suau al campo de la fotoquímica orgánica, destacando sus aportaciones pioneras como uno de los primero científicos que contribuyó al desarrollo la fotoquímica en España, y la evolución y relevancia de sus trabajos. La profesora María Valpuesta glosó, en una emotiva evocación, la persona de Rafael Suau como profesional y compañero, su contribución en el campo de los productos naturales y su capacidad para liderar a los integrantes de las líneas de investigación que promovió en el Departamento de Ouímica Orgánica de la UMA. El profesor Ezequiel Pérez-Inestrosa destacó la dedicación con que, como profesor en la universidad, Rafael Suau acometía sus labores docentes. En este punto resultó particularmente entrañable la emisión de los vídeos que enviaron cuatro antiguos alumnos de Rafael Suau, que en la actualidad se encuentran realizando sus labores profesionales en diferentes sectores de la sociedad: Enrique Carballas Dorrego, director gerente de PERNOD RICARD; Antonio Gallardo Melgarejo, profesor químico del Cuerpo de Laboratorios de Aduanas (Resident Twinning Advisor IPA Project, Zagreb); Salvador García Claros, director de la refinería CEPSA en Santa Cruz de Tenerife; y María Victoria Silva Elipe, investigadora principal en AMGEN Inc., California, glosando la memoria del que fue su Profesor.

En este punto, se hizo entrega a los familiares más directos de Rafael Suau, en la figura de su viuda, de un ejemplar recopilatorio donde se incluyeron todos los trabajos de investigación publicados hasta esa fecha y que los autores de los mismos habían dedicado a la memoria de Rafael Suau.



Además de su viuda, al acto asistieron también sus tres hijas acompañadas de otros familiares.

Finalmente, se leyeron las palabras que remitió la rectora de la UMA resaltando la calidad personal de Rafael Suau, su implicación en la Universidad, destacando aquellos aspectos de su participación que han contribuido a la construcción de la Universidad de Málaga desde los momentos iniciales de la misma hasta la fecha de su fallecimiento.

Todos los participantes, así como los asistentes, que sobrepasaron en número el aforo del salón, coincidieron en resaltar los valores profesionales, científicos y docentes, así como la valía personal de nuestro difunto amigo Rafael Suau, como expresión de ejemplo para presente y futuras generaciones de químicos.

La Sección Territorial de Málaga de la RSEQ ha recopilado información sobre este homenaje (http://www.rseqmalaga. uma.es/).

> Remitido por: **Ezequiel Pérez-Inestrosa** Dpto. de Química Orgánica. Universidad de Málaga.

# El Campus Vida de la Universidad de Santiago de Compostela acogió la Primera Reunión Bienal del Grupo Especializado de Química Biológica de la RSEQ

El pasado 8 y 9 de Marzo se celebró en Santiago de Compostela la primera reunión bienal del recientemente creado Grupo Especializado de Química Biológica (GQB) de la RSEQ (www.quimicabiologica.es). Con esta reunión se pretendía proporcionar un foro de encuentro y de debate para los científicos interesados en este fascinante campo, y catalizar el desarrollo futuro de la disciplina. La ceremonia de apertura, que tuvo lugar en la Facultad de Biología de la Universidad de Santiago de Compostela, estuvo presidida por el Sr. Vicerrector de Investigación e Innovación de la Universidad de Santiago de Compostela, Francisco González García y el Presidente de la RSEQ, Jesús Jiménez Barbero.

La reunión contó con cuatro científicos de renombre internacional como conferenciantes plenarios: el Prof. Shankar Balasubramanian de la Universidad de Cambridge (Reino Unido), coinventor de la mundialmente utilizada tecnología de secuenciación del genoma, comercializada por la multinacional Solexa Illumina, que permite la lectura casi sin errores de



El Prof. Shankar Balasubramanian (Universidad de Cambridge) durante su conferencia.

mil millones de bases por barrido; el Prof. Thomas Carell de la Universidad Ludwig Maximilians de Munich (Alemania) y el Prof. Oliver Seitz de la Universidad Humboldt de Berlín (Alemania), ambos líderes mundiales en el campo de los ácidos nucleicos y el ADN; y el Prof. Modesto Orozco de la Universidad de Barcelona, especialista en la simulación por ordenador de sistemas biológicos. La reunión contó además con la participación de otros tres conferenciantes invitados: María Jesús Vicent del Centro de Investigación Príncipe Felipe, que presentó sus investigaciones en el campo de los polímeros terapéuticos, Niels-Christian Reichardt del CICbiomaGUNE que disertó sobre el desarrollo de herramientas de diagnóstico basadas en química de carbohidratos, y Ramón Álvarez-Puebla de la Universidad de Vigo, experto en el desarrollo de aplicaciones biológicas de las nanoestructuras plasmónicas.

A la reunión asistieron más de 140 investigadores que presentaron setenta comunicaciones, orales o carteles. La organización de esta primera reunión corrió a cargo del presidente y de la tesorera del GQB, José Luis Mascareñas y Concepción González Bello, y de los profesores Juan Granja, Miguel Vázquez López y Eugenio Vázquez, miembros del Centro Singular de Investigación en Química Biológica y Materiales Moleculares (CIQUS, www.usc.es/ciqus) y profesores de la Universidad de Santiago de Compostela.

Durante la reunión del grupo se otorgaron cuatro premios a investigadores jóvenes por las dos mejores comunicaciones flash y los dos mejores carteles, premios patrocinados por Lilly. Los galardonados fueron:

- Premio Lilly a la mejor comunicación flash: a las presentadas por Natalia Pérez-Hernández del Instituto de Investigaciones Químicas (IIQ-CSIC, Sevilla) titulada Synthetic organic pores: models for the study of confined water in biology, y por Víctor Muñoz-Robles de la Universidad Autónoma de Barcelona con la comunicación titulada Structural and catalytic insights of porphyrin-antibody artificial enzymes.
- Premio Lilly al mejor cartel: a los carteles presentados por Pilar Blasco del Centro de Investigaciones Biológicas (CIB-CSIC, Madrid) titulado *The recognition* of N-glycans by plant lectins studied by STD-NMR, y por Joan Atcher del Instituto de Química Avanzada de



Vista general de la exposición de carteles.



De izquierda a derecha: Juan Granja, Niels Christian Reichardt, Modesto Orozco, José Luis Mascareñas, Concepción González Bello, Oliver Seitz, Federico Gago, Shankar Balasubramanian y Sonsoles Martín Santamaría. Lugar: Centro Singular de Investigación en Química Biológica y Materiales Moleculares (CIQUS).

Cataluña (IQAC-CSIC, Barcelona) con el cartel titulado Effect of salt on a dynamic combinatorial library based on pseudopeptidic dithiols.

Remitido por: **Concepción González Bello**Centro Singular de Investigación en Química Biológica y Materiales
Moleculares (CIQUS), Universidad de Santiago de Compostela.
concepcion.gonzalez.bello@usc.es



#### Medallas del GE de Química Orgánica

La RSEQ quiere felicitar a los dos premiados. Las medallas del Grupo Especializado de Química Orgánica (GEQOR) en su edición del año 2012 se han concedido a:

#### Medalla Fèlix Serratosa



Prof. Miguel Yus

Catedrático de Química Orgánica en la Universidad de Alicante.

Licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de Zaragoza en 1969, Miguel Yus se doctoró también en el mismo centro en 1973. Realizó una estancia posdoctoral de dos años en el Max Planck Institut für Kohlenforschung en Mülheim a.d. Ruhr, después de la cual se incorporó al Departamento de Química Orgánica de la

Universidad de Oviedo. Catedrático de Universidad desde el año 1987, en 1988 se traslada a la Universidad de Alicante, siendo primero director del Departamento de Química Orgánica (1988-2003) y desde 2003 director del Instituto Universitario de Síntesis Orgánica (ISO) en la citada institución. Ha sido profesor visitante en diferentes universidades (ETH-, Oxford, Harvard, Uppsala, Tucson, Okayama, Paris, Estrasburgo y Kioto). Coautor de más de 500 publicaciones, la mayoría en el campo del desarrollo de nuevas metodologías de síntesis en las que participan intermedios organometálicos. Pertenece o ha pertenecido al Comité Ediorial de diferentes publicaciones científi-

cas (Tetrahedron, Tetrahedron Letters, Chemistry Letters, European Journal of Organic Chemistry, Trends in Organic Chemistry, Current Organic Chemistry y Current Chemical Biology), siendo el editor regional de Letters in Organic Chemistry. Ha sido director de más de 50 tesis doctorales y entre los premios recibidos habría que destacar: Japan Society for the Promotion of Science Prize (1999) y 2007), Premio Hispano-Francés de la Societé Française de Chimie (1999), C.A. Stiefvater Memorial Lecture Award (2001), Nagase Science and Technology Foundation fellowship (2003), Cellchem Lectureship (2005), Singenta Lectureship (2007), premio Fundeun-Iberdrola (2007) y el Luso-Español de Química Conferencia Lourenço-Madinaveitia (2011). En el año 2012 fue nombrado miembro de la Academia Europea de las Ciencias y las Artes dentro de la sección de Ciencias Naturales. Su investigación actual se centra en la preparación de compuestos organometálicos funcionalizados de muy elevada reactividad y su uso en síntesis orgánica, la activación de diferentes metales catalizada por arenos, la preparación de nuevos catalizadores metálicos, entre ellos nanopartículas metálicas, con el fin de usarlos en reacciones homogéneas y heterogéneas selectivas y también en catálisis asimétrica. En 2002, el profesor Yus y otros miembros del ISO fundaron la compañía MEDALCHEMY, S.L. dedicada a la química fina y de APIs.

#### Medalla Ignacio Ribas



Prof. Carlos Saá

Catedrático de Química Orgánica en la Universidad de Santiago

Carlos Saá, natural de Lugo, estudió Química en la Universidad de Santiago de Compostela donde obtuvo el título de Doctor en 1985 bajo la supervisión de los Prof. Luis Castedo, Rafael Suau y José Manuel Saá por su trabajo en la síntesis de alcaloides isoquinolínicos. Realizó una estancia postdoctoral de dos años

(1987-1988) en la Universidad de Berkeley, California, trabajando en el grupo del Prof. K. P. C. Vollhardt en la síntesis de alcaloides de ergot mediante cicloadiciones [2+2+2] entre

alquinos y nitrilos catalizadas por Co(I). Desde el año 2004 es Catedrático del Departamento de Química Orgánica en la Universidad de Santiago de Compostela del que ha sido su Director durante los años 2006-2010. Sus líneas de investigación se centran en el estudio de la catálisis organometálica y sus aplicaciones en síntesis orgánica. Entre los logros más reconocidos por la comunidad científica destacan sus aportaciones en cicloadiciones y ciclaciones como la síntesis de piridinas y derivados mediante cicloadiciones [2+2+2] entre alquinos y nitrilos catalizadas por cobalto o rutenio, la síntesis de ciclohexadienos y ciclooctatrienos mediante cicloadiciones [2+2+2] y [4+2+2] entre alquinos y alquenos/ dienos catalizadas por rutenio, nuevas vías de ciclación de alquinales catalizadas por rutenio y nuevas rutas de síntesis de compuestos azaheterocíclicos mediante heterociclaciones de alquinales catalizadas por rutenio y osmio.

#### XXV Olimpiada de Química y VII Encuentro de profesores de Química

Se ha celebrado en El Escorial (Madrid), entre los días 27 y 29 de abril, la fase nacional de la XXV edición de la Olimpiada de Química. Han participado 132 estudiantes de bachillerato de toda España, teniendo que resolver un ejercicio de cuestiones y cuatro problemas, unas pruebas cuyo nivel permite seleccionar a los cuatro estudiantes españoles que representarán a España en la fase internacional que se celebrará en USA (Washington) y en la fase Iberoamericana en Argentina. Este año, esta celebración ha tenido lugar en la Comunidad de Madrid debido a que un estudiante madrileño ganó la edición anterior, Moisés Maestro, que actualmente estudia Bioquímica en la UCM. Ha sido organizada por la Asociación y el Colegio Oficial de Químicos de Madrid en colaboración con la Asociación Nacional de Ouímicos de España, la Real Sociedad Española de Química y la inestimable ayuda de las Universidades de Madrid. El último día se realizó una visita cultural al Monasterio de El Escorial.

El día 29 tuvo lugar la clausura y la entrega de premios a los participantes, acto en el que participaron, Carmen Aguilera, Directora del Centro Nacional de Innovación e Investigación Educativa en representación del Ministerio de Educación, Gustavo Martínez, Subdirector General de Formación del Profesorado en representación de la Consejería de Educación y Empleo de la Comunidad de Madrid, Bernardo Herradón, Editor General de Anales de Química en representación de la RSEQ, Carlos Negro, Presidente de ANQUE y Juan José Álvarez, Presidente de la Asociación de Ouímicos de Madrid.

Los cuatro ganadores de la olimpiada nacional han sido: Sergio Tomás Martínez, del IES Hnos Amorós de Villena (Alicante); Óscar Rivero Salgado del I.E.S. Cidade de Antioquia de Xinzo de Limia (Orense); Marta Pita Vidal del I.E.S. Rosalía de Castro de Santiago de Compostela (A Coruña) y Jorge Lacaba reina del Colegio El Valle de Alicante.

Hay que destacar el buen ambiente vivido por estudiantes, profesores y acompañantes, que representa una de las características más importantes de esta actividad y que permite establecer vínculos y relaciones entre todos los estudiantes.

Paralelamente a la olimpiada se celebró el VII Encuentro de Profesores de Ouímica, jornada que habitualmente se viene celebrando el día que los estudiantes realizan las pruebas y que permite intercambiar experiencias entre profesores de toda España y entre profesores de universidad y de secundaria y que fue coordinado por Emilio Gómez, presidente de la Comisión de Enseñanza de ANQUE. En la presente edición se celebraron tres ponencias por la mañana, que corrieron a cargo de Valentín González profesor universitario y director de la revista Química e Industria que habló sobre "Química y energía, un binomio indisoluble", Juan José Álvarez, presidente de la Asociación de Químicos de Madrid que habló sobre la química y el mundo de la salud, y Juan Hernández, Catedrático de Secundaria que nos habló sobre Conceptos claves en el aprendizaje significativo de la Química. Por la tarde, se organizo una mesa redonda donde se debatió "La reforma educativa de la ESO y del bachillerato" en la que participaron: Begoña Núñez y Agustín Verges, profesores de secundaria de Castilla y León y de las Islas Baleares, Ángel Valea, Catedrático de la Universidad del País Vasco y Josep Fernández, profesor universitario de la Universidad de Barcelona. La mesa redonda estuvo moderada por Antonio Antiñolo, Catedrático de la Universidad de Castilla-La Mancha. A continuación, se desarrolló un taller donde se incluyeron "Algunas propuestas ante la reforma del bachillerato" que podrían ser un punto de partida para mejorar la enseñanza de la química en la educación secundaria. El encuentro fue clausurado por Carlos Negro Álvarez, Presidente de la ANQUE, con una conferencia sobre El AIQ: un punto de partida.

Remitido por: Mario Redondo Ciercoles (RSEQ y ANQUE)

#### Acto de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales sobre "La ciencia española ante los recortes presupuestarios"

El viernes 16 de marzo de 2012 se celebró una jornada en la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales sobre "La ciencia española ante los recortes presupuestarios". Tras la presentación, por parte del Presidente de la Real Academia, Prof. Miguel Ángel Alario, el Presidente de la Confederación de Sociedades Científicas de España (COSCE), Prof. Carlos Andradas, pasó a exponer los aspectos más relevantes de la Carta abierta por la ciencia en España. Tras él, tomó la palabra el Prof. Daniel Peña, Presidente de la Conferencia de Rectores de Universidades de Madrid. En todas las intervenciones se hizo hincapié en la gravedad que para España como país tiene un posible recorte presupuestario en I+D+i de más del 8% (casi el doble del promedio de lo previsto para la Administración Central), lo que repercutirá negativamente en la competitividad de España a medio plazo.

Seguidamente se procedió a establecer una mesa redonda, moderada por el Prof. Antonio García-Bellido, constituida por representantes de los partidos políticos: CIU (Josep María Martorell), UPyD (Carlos Martínez Gorriarán), IU (Caridad García), PSOE (Jaime Lissavetzky) y PP (Alejandro Fernández). El PNV excusó su asistencia por problemas de agenda. El Prof. García-Bellido se refirió al acto como "un día triste" para la comunidad científica española y se lamentó de que, iniciativas como la Carta abierta por la ciencia en España, no se hubieran producido antes. Los ponentes de los distintos partidos coincidieron, con sus correspondientes matices, en la importancia que la I+D+i tiene como estrategia de crecimiento sostenible y como pilar fundamental de una economía basada en el conocimiento y la innovación. No obstante, se pusieron de manifiesto diferencias importantes en lo que concierne

a las medidas inmediatas a tomar frente a los anunciados recortes. Frente a más inversión pública, demandada por la representante de IU, el representante del PP incidió en una mejor utilización de los recursos disponibles y en la implicación privada en la financiación de la I+D. El representante de CIU enumeró una serie de iniciativas legislativas que ha tomado la Generalitat de Cataluña, como que los recortes previstos no afecten a los centros de investigación, o las nuevas políticas de contratación de personal investigador. El representante del PSOE indicó que se opondrían en el Congreso a este tipo de recortes y destacó su rechazo a la tasa de reposición cero en empleo público en investigación. Por su parte, el representante de UPyD insistió en la prioridad que se le debe dar a la ciencia frente a otras inversiones y anunció alguna enmienda en ese sentido en el Congreso de los Diputados.

Se produjeron varias intervenciones de los asistentes al acto, fundamentalmente de representantes sindicales, pidiéndose a los representantes de los partidos políticos compromisos concretos para minimizar los recortes previstos y lograr un consenso que permita que la ciencia sea considerada como un tema de Estado que asegure una financiación sostenida a medio y largo plazo y que nos permita salir del furgón de cola de los países europeos en este tema. Con un porcentaje del 1,4% del PIB en inversión en I+D+i, España

se sitúa muy por debajo de la media de los países que conforman la Unión Europea.

En su intervención para cerrar el acto, el Prof. Andradas insistió en que, de cada euro que recauda el Estado, menos de 1 céntimo es lo que se destina a investigación y desarrollo, y como medida concreta pidió a los representantes de los partidos políticos invitados al acto que firmarán la *Carta abierta por la ciencia en España*.

Nota 1ª: El 3 de abril de 2012 fue presentado a las Cortes Generales el Proyecto de Presupuestos Generales del Estado para 2012. En esta página se facilita el acceso a diversa documentación relativa al mismo: http://bit.ly/KwP7Na.

Nota 2ª: El 10 de abril de 2012 la COSCE presentó un análisis de los Presupuestos Generales del Estado en I+D+i, que se puede descargar directamente en la siguiente página: www.cosce.org/pdf/Informe COSCE Analisis Proyecto PGE2012.pdf.

Nota 3<sup>a</sup>: Después de esta reunión, el tema de los recortes en ciencia ha seguido debatiéndose a nivel social, científico y político. Han aparecido numerosas noticias en prensa; muchas de ellas se han difundido a través del grupo de Facebook de la RSEQ (http://on.fb.me/zORV36).

**Prof. José M. Pingarrón.**Departamento de Química Analítica.
Universidad Complutense de Madrid.

#### Premios a la mejor Tesis Doctoral de la Sección Territorial de Madrid

El viernes 20 de Abril, tuvo lugar en la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid el acto de entrega de los Accésit y el Primer Premio a la Mejor tesis doctoral en Química defendida durante el curso académico 2010-2011 en la Comunidad de Madrid. En esta VIII edición, el Primer Premio se otorgó a la Tesis Doctoral titulada Diseño de biosensores electroquímicos de ADN. Aplicaciones a la determinación de microorganismos patógenos realizada por el Dr. Óscar Andrés Loaiza Fernández y dirigida por los Dres. José Manuel Pingarrón, María Pedrero y Susana Campuzano, del Departamento de Química Analítica de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense. Los dos accésit que contemplaba la convocatoria se otorgaron a las tesis doctoral tituladas NMR Studies of molecular recognition events related to cancer processes FGFR and tubulin as targets realizada por la Dra. Lidia Nieto Garrido y dirigida por los Dres. Jesús Jiménez Barbero y Ángeles Canales, del Departamento de Biología Físico-Química del Centro de Investigaciones Biológicas (CSIC) y a la Tesis Doctoral Titulada Propiedades magnéticas de nanopartículas de ferritas  $MFe_2O_4$  (M: elemento de transición) realizada por la Dra. Verónica Blanco Gutiérrez y dirigida por los Dres. Regino Sáez Puche y M. José Torralvo-Fernández, del Departamento de Química Inorgánica de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense.

El acto estuvo presidido por el Director de la ETS de Ingenieros Industriales, Dr. Jesús Félez Mindán, y en el



Dos de los premiados (Óscar y Lidia) con los directores de la tesis de Verónica, el Dr. Luis Cabra, el director de la escuela de Ingenieros Industriales de la UPM, el presidente, la secretaria y el tesorero de la RSEQ-STM.

mismo intervinieron la Dra. Maria Cruz Moreno-Bondi, Secretaria de la Junta Directiva de la Sección Territorial de Madrid de la RSEQ, para dar lectura al acta de la Comisión que seleccionó a las tesis premiadas; el Dr. Óscar Andrés Loaiza Fernández para hacer una breve presentación del trabajo doctoral premiado; el Dr. José Losada, Vocal de la Sección Territorial de Madrid de la RSEQ, para hacer la presentación del conferenciante invitado, Dr. Luis

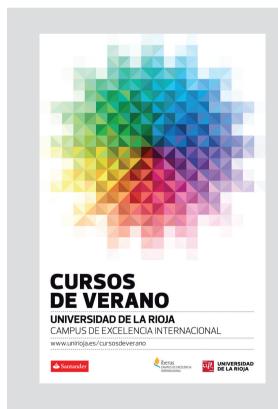
Cabra, Director Ejecutivo de Desarrollo y Producción de Upstream, REPSOL quién pronunció la conferencia titulada *El papel del petróleo y el gas en un futuro energético sostenible*. Esta conferencia tuvo una gran acogida entre el numeroso público asistente. En ella, el Dr. Cabra presentó una perspectiva general del problema energético, analizando todas las posibles soluciones.

Posteriormente intervino el Presidente de la Junta Directiva de la Sección Territorial de Madrid de la RSEQ, Dr. Juan José Vaquero López, quién felicitó a los premiados, destacó la gran calidad de las 20 tesis doctorales que optaron al premio y manifestó su preocupación por los recortes presupuestarios que están afectando a la investigación y la incidencia que la disminución de la financiación pueden tener en la mejora de calidad de la misma y en el desarrollo de proyectos innovadores a medio y largo plazo. El acto finalizó con unas palabras de felicitación, agradecimiento y despedida del Director de la Escuela.

Remitida por: **Juan José Vaquero, Dpto. de Química Orgánica**Facultad de Farmacia, Universidad de Alcalá

## IV Escuela de Verano sobre Historia de la Química

Materia y radiación. La ciencia en la frontera de los siglos XIX y XX Logroño, 4–6 de julio, 2012











Vicerrectorado de Estudiantes



Contacto: http://fundacion.unirioja.es/cursosdeverano/historiaquimica

#### La determinación precisa de las constantes de la naturaleza: el Número de Avogadro

El Número de Avogadro  $(N_A)$  es uno de los iconos de la química. Con su definición, significado y valor,  $N_A$  relaciona las escalas atómico-molecular y macroscópicas de la materia.  $N_A$  se define como el número de átomos presentes en 12 gramos del isótopo 12 del carbono ( $^{12}$ C), lo que se traduce en el número de partículas (átomos, iones, moléculas, electrones, etc.) en un mol de partículas. Su valor, aproximadamente  $6,022 \times 10^{23}$  partículas por mol ( $\text{mol}^{-1}$ ) da idea del pequeño tamaño de átomos y moléculas.

Los intentos iniciales de determinar el valor de  $N_A$  se remontan a mediados del siglo XIX (Loschmidt, 1865), culminando en los experimentos de Perrin (1908) basados en propuestas teóricas de Einstein (1905). Desde la determinación del valor de  $N_A$  por Perrin, se han realizado medidas más precisas de su valor (ver W. B. Jensen, *J. Chem. Ed.* **2010**, 87, 1302), cuya inexactitud se ha cifrado en 4,4 partes por 100 millones ( $10^8$ ).

Sin embargo, en la actualidad hace falta determinar el valor de  $N_A$  con una precisión mayor de 2 partes en 100 millones ¿Por qué tanta precisión?

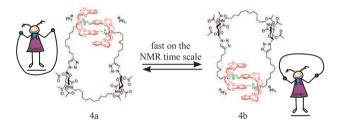
El objetivo es redefinir la unidad de masa en el Sistema Internacional de Unidades, dejando a un lado la definición basada en la masa de un cilindro de platino-iridio, y redifiniendo en términos de constantes de la naturaleza, siendo la de Plank (h) la más adecuada para esta redefinición. La constante de Planck se puede determinar indirectamente a partir de medidas de la constante de Rydberg  $(R_{\infty})$ , la magnitud física medida con más precisión, y del Número de Avogadro  $(N_{4})$ . En los últimos años se han descrito diversos métodos para determinar  $N_4$  con precisión, que se basan en la determinación de la densidad de un monocristal por difracción de rayos X, como propuesto por W. H. Bragg y W. L. Bragg en 1913. Para conseguir estas medidas precisas, se ha usado un monocristal esférico perfecto de un kilogramo de silicio enriquecido en el isótopo 28 (99,995% de <sup>28</sup>Si). Para obtener un resultado experimental satisfactorio, es necesaria la determinación precisa del peso atómico relativo del silicio.

En una reciente publicación en *Analytical Chemistry* (2012, *84*, 2321–2327), Mester y colaboradores han determinado el peso atómico de <sup>28</sup>Si usando espectrometría de masas ciclotrónica. El peso atómico determinado para el <sup>28</sup>Si es 27,97696839 (24), lo que da un valor de 6,02214040 (19) x  $10^{23}$  mol<sup>-1</sup> para  $N_4$ .



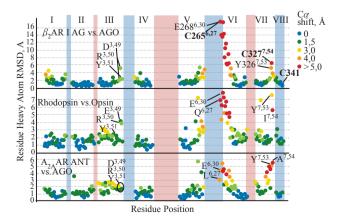
#### La comba de Daisy

Dos equipos de investigación en Montpellier y Madrid han estudiado una nueva molécula que es capaz de presentar dos estructuras tridimensionales, perfectamente definidas, dependiendo de las condiciones del medio (Chem. Sci. 2012, 3, 1851-1857). La aproximación combinada de métodos de síntesis orgánica, resonancia magnética nuclear y modelado molecular ha permitido demostrar que esta molécula muestra una nueva topología, que se ha denominado "rota-macrociclo", ya que contienen elementos propios de los rotaxanos y de los macrociclos. Esta máquina molecular muestra una estructura de doble lazo entrecruzado, con una forma semejante a la de una niña con una cuerda para saltar a la comba. La molécula presenta movimientos internos v. dependiendo del pH elegido. muestra distintas interacciones polares y no polares, que permiten generar, a voluntad, una cavidad que puede ser muy grande (14 Åx 11 Å) o significativamente más pequeña (10,5 Åx 5 Å). Este rota-macrociclo molecular podría usarse como transportador para liberar una carga (molécula) determinada al pH elegido.



# Revelando la dinámica de proteínas esenciales: la plasticidad del receptor $\beta$ 2-adrenérgico

Los receptores acoplados a proteínas G (GPCRs) son ubícuos en nuestro organismo. Nuestro genoma codifica alrededor de 800 GPCRs. Estos receptores de membrana están implicados en múltiples procesos fisiológicos e inmunes y reconocen múltiples y variados estímulos químicos (agonistas). La importancia biológica de los GPCRs también se pone de manifiesto por el hecho de que alrededor del 30% de los fármacos actuales interaccionan, directa o indirectamente, con un GPCR. Por lo tanto, el conocimiento de su activación, mecanismo de acción y dinámica es esencial en el diseño de medicamentos eficaces.



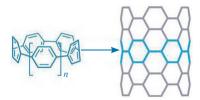
En una publicación reciente (*Science* **2012**, *335*, 1106–1110), el grupo de K. Wüthrich (*The Scripps Research Institute*), Premio Nobel de Química en 2002, ha descrito un avance espectacular en el conocimiento de los procesos de reconocimiento molecular que involucran a los GPCRs, concretamente al receptor  $\beta$ 2-adrenérgico ( $\beta$ 2AR). El grupo del Scripps modificó 4 residuos de cisteína de  $\beta$ 2AR con trifluoroetanol, lo que permitió us estudio estructural usando técnicas de <sup>19</sup>F-RMN. Los autores han demostrado que  $\beta$ 2AR no funciona como un interruptor simple, sino que puede adoptar distintos estados conformacionales que le permiten controlar los distintos procesos en los que participa. De hecho, el  $\beta$ 2AR puede sintonizar su estructura tridimensional de acuerdo con la estructura química del agonista.

#### El nanotubo más "nano"

En un artículo publicado recientemente (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, *51*, 2474–2476), Xia y Jarni (Universidad de Boston) han conseguido sintetizar el que se puede considerar el nanotubo de carbono más pequeño observado hasta el momento.

Los nanotubos de carbono son estructuras tubulares aproximadamente 50000 veces más estrechas que un cabello humano y que poseen unas propiedades eléctricas, mecánicas y térmicas únicas. Sin embargo, la gran limitación que existe en la actualidad para la explotación industrial es la dificultad para prepararlos en grandes cantidades. Además, los métodos existentes para su síntesis suelen dar lugar a mezclas heterogéneas de nanotubos con diferentes longitudes y diámetros. Por lo tanto, el desarrollo de metodologías que permitan la preparación de nanotubos de carbono de una manera controlada es un área de intensa investigación en la actualidad.

Los cicloparafenilenos (CCPs) son una familia de moléculas consistentes en una cadena de anillos de benceno en forma de aro. Estas moléculas representan la unidad estructural más corta con estructura de nanotubo de carbono. A pesar de los intensos esfuerzos enfocados en su obtención, los primeros ejemplos de este tipo de compuestos solo pudieron ser preparados por primera vez en el año 2008, más de setenta años después de haber sido propuesta su estructura. En este trabajo, Xia y Jarni han descrito la síntesis del CCP más pequeño hasta el momento, compuesto únicamente de 6 anillos de benceno (6[CCP]). El problema principal asociado a la preparación de estas moléculas es que deberían ser planas pero sin embargo son circulares, por lo cual son estructuras altamente tensionadas. Para conseguir "doblar" la cadena de anillos de benceno los autores emplean un método muy inteligente y relativamente sencillo basado en "disfrazar" la presencia de algunos de los anillos bencénicos de la cadena, transformándolos en análogos con estructuras de ciclohexadienos. De esta manera pueden deformar la cadena lo suficiente como para unir sus extremos y a continuación aromatizar de nuevo los anillos bencénicos para obtener el



6[CCP]. Además, los autores han sido capaces de llevar a cabo un estudio mediante difracción de rayos X de un cristal de este compuesto; observando que, a diferencia de otros CCPs, esta molécula adopta en el estado cristalino un empaquetamiento que da lugar a estructuras con forma de nanotubo de carbono.

El empleo de CCPs podría permitir una aproximación mucho más precisa para la obtención de nanotubos de carbono, ya que se puede variar de manera controlada el diámetro y orientación de los anillos aromáticos, que son dos de las variables más importantes a la hora de determinar las propiedades electrónicas de un nanotubo. Las moléculas de CCPs podrían ser usadas como "semillas" o moldes para conseguir cantidades de nanotubos de carbono con las características deseadas.

En una publicación posterior (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, en prensa; DOI: 10.1002/anie.201201494), Nazario Martín y colaboradores revisan las aproximaciones a la síntesis de ciclofenilenos *para*-conectados y poliarenos hemiesféricos, como intermedios para la síntesis por diseño de nanotubos de carbono monocapa.

#### La lucha sin cuartel contra la malaria

La malaria es una de los mayores problemas sanitarios globales afectando a centenares de millones de personas, muchos de ellos niños. La enfermedad es causada por parásitos del género *Plasmodium*, que se transmiten cuando las hembras del mosquito *Anopheles* se alimentan de sangre humana. Aunque las causas de mortalidad y morbilidad son variadas, una de las principales es la existencia de cepas de *Plasmodium* resistentes a todos los fármacos existentes. Por lo tanto, son necesarios nuevos fármacos para continuar combatiendo la enfermedad.

El centro de investigación de *GSK* en Tres Cantos (Madrid) se ha caracterizado por una intensa actividad investigadora en este campo terapéutico. Una reciente investigación (*ACS Med. Chem. Lett.* **2012**, *3*, 373–377) del grupo de *GSK* liderado por F. Calderón ha identificado una nueva famila de agentes antimaláricos, derivados del sistema de indolina. Este tipo de compuestos habían sido previamente usados como antagonistas del receptor HT<sub>2</sub> de serotonina (5-hidroxitriptamina). Aunque esta actividad biológica podría complicar su desarrollo como agentes antimaláricos, los investigadores en *GSK* optimizaron la estructura, consiguiendo compuestos con afinidad reducida por el receptor HT<sub>2</sub>, manteniendo un buen perfil antiparasitario.

En los últimos meses se han publicado artículos relevantes en el área de la química médica de agentes antimaláricos. Así, un equipo multidisciplinar encabezado por R. K. Guy y en la que han participado investigadores de *GSK* en Tres Cantos han revisado críticamente resultados recientes sobre el cribado fenotípico de los tipos de agentes antimaláricos disponibles; una estrategia que promete ser útil en el diseño de nuevos agentes terapéuticos (*Chem. Biol.* **2012**, *19*, 116–129).

Actualmente, el tratamiento antimalárico más eficiente es el combinado basado en artemisina. Esta molécula es un endoperóxido sesquiterpénico que se extrae de la planta *Artemisia annua*, que se cultiva en diversos sitios con este propósito. Sin embargo, el suministro basado en la producción de la planta puede ser inseguro y costoso. Por otra parte, la complejidad estructural de la artemisina hace que su síntesis total sea muy laboriosa y cara. Sin embargo, el ácido artemisínico se puede extraer en mayor cantidad de dicha planta o puede ser produ-

cido por ingeniería del metabolismo (D. K. Ro *et al. Nature* **2006**, *440*, 940–943); de esta manera, el ácido artemisínico puede ser un material de partida ideal para la hemisíntesis de artemisina; aunque el desarrollo de un proceso con alto rendimiento y escalable es un reto considerable.

En una publicación reciente (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, *51*, 1706–1709), Lévesque y Seeberger han desarrollado un método en *flujo continuo* para convertir el ácido artemisínico en artemisina. Este método puede servir para proporcionar suficiente cantidad (potencialmente hasta 800 gramos al día) del fármaco antimalárico a precio razonable.

#### Más cerca de la síntesis homogénea de proteínas

La síntesis total química de proteínas puede ser una alternativa económica y versátil a la basada en métodos biotecnológicos. Para alcanzar esta etapa de desarrollo es necesario avanzar en aspectos básicos de la química de aminoácidos y péptidos.

La introducción del concepto de *ligación química nativa* a mediados de los 90 supuso un avance considerable en el campo de la síntesis de péptidos y glicopéptidos. Esta ligación química permite la síntesis de proteínas a través de segmentos peptídicos no protegidos. En este campo de la química, S. J. Danishefsky con sus más de 70 años sigue dando muestras de una inagotable capacidad de innovación. En un reciente artículo (*J. Am. Chem. Soc.* 2012, *134*, 3912–3916) describe, primero enfocando el trabajo con una precisa introducción, los avances realizados en la ligación química nativa con sustratos derivados de tioprolina y selenoprolina. Hasta ahora el desarrollo de esta metodología estaba centrado en segmentos peptídicos que incorporasen cisteína o derivados. Esta extensión permite trabajar con un aminoácido tan característico como la prolina.

Los protocolos de desulfuración y de deselenación en ambientes libres de metales son imprescindibles para poder aplicar este tipo de metodologías a la síntesis de nuevos fármacos o compuestos de interés biológico. Danishefsky cuida en su artículo estos aspectos decantándose por la ligación mediante selenoprolina para acceder a sistemas con gran demanda estérica.

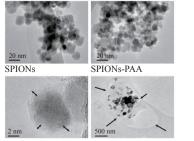
No se queda ahí, y nos brinda la síntesis de una molécula compleja, un glicopéptido, mediante esta metodología. En concreto realiza la síntesis de un fragmento doblemente glicosilado de una hormona glicoprotéica de gran interés como la eritropoyetina. Esta síntesis se enmarca dentro de los esfuerzos por obtener de forma totalmente sintética la eritropoyetina y muestra la versatilidad de esta nueva metodología para la obtención de glicanos complejos.

El trabajo de Samuel J. Danishefsky es de una inmensa calidad y complejidad y prácticamente ninguno de sus últimos artículos hubiera deslucido en una sección como ésta. Valga esta reseña para rendir un pequeño homenaje a un excepcional químico que nos sigue sorprendiendo artículo tras artículo.

#### Avanzando en las aplicaciones biomédicas de nanopartículas magnéticas: terapias inmunogénicas del carcinoma de mama de ratón

Las nanopartículas de óxido de hierro supermagnéticas (superparamagnetic iron oxide nanoparticles, SPIONs) se utilizan en diversas aplicaciones biomédicas, ya que pueden ser guiadas a través de un campo magnético externo, pero sin poseer magnetismo residual en ausencia del mismo. En el campo de la oncología, las SPIONs han sido utilizadas con fines diagnósticos, tanto como potenciadores de contraste para resonancia magnética, como vehículos para la detección de biomarcadores. También han sido usadas con fines terapéuticos: para aislamiento y transfección de células madre hematopoyéticas en terapia génica, en la hipertermia magnética y como sistemas de administración de diferentes agentes terapéuticos. La terapia génica en tumores consiste en el tratamiento o eliminación de tumores mediante la transferencia de DNA o en el uso de genes que codifiquen para antígenos tumorales para reemplazar algún gen que esté alterado.

En este artículo (*Biomaterials*, **2012**, *33*, 4379–4391) se publica el diseño de nanopartículas de óxido de hierro, sintetizadas por coprecipitación alcalina de sulfatos ferrosos y férricos en disolución acuosa, obteniendo un líquido magnético, ferrofluído. Seguidamente, las SPIONs se modifican, *in situ*, con poliácido acrílico (PAA), con el fin de funcionalizarlas, posteriormente, con el polímero catiónico de polietilenimina (PEI).

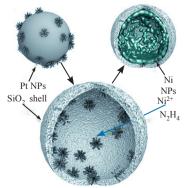


SPIONs-PAA-PEI SPIONs-PAA-PEI-pDNA<sup>GFP</sup>

Hasta el momento, la magnetofección de tumores, es decir, el aporte o transferencia de ácidos nucleicos a una célula tumoral utilizando un campo magnético externo, no ha contado con importantes efectos antitumorales usando SPIONs. Sin embargo, la combinación de revestimiento y funcionalización de las SPIONs usando los polímeros PAA y PEI, resultó ser no tóxico y fue eficaz para magnetofección *in vitro*, esto es, para transferir pDNA a diferentes células mediante un campo magnético. Los estudios *in vivo* han demostrado que la magnetofección de pDNA a tumores de adenocarcinoma de mama de ratón TS/A, usando SPIONs-PAA-PEI, condujo a una importante acción antitumoral.

#### Hacia los nanoreactores

La síntesis de nanomateriales basados en nanocápsulas. que simultáneamente poseen las ventajas de ser sistemas huecos y porosos, presentan diversas aplicaciones en distintas áreas como biomedicina, catálisis, almacenamiento de gas o separación por adsorción. Investigadores de la Universidad de Vigo han sintetizado nanorreactores basados en cápsulas de sílice porosas en cuyo interior se localizan nanopartículas de platino con alta actividad catalítica (Angew. Chem. Int. Ed. 2012, 51, 3877-3882). Estos sistemas se sintetizan a partir de nanopartículas de poliestireno (PS) recubiertas con capas de sulfonatos de poliestireno (PSS) e hidrocloruro de polialilamina (PAH), con el objetivo de proporcionar una multicapa externa (PS/PSS/PAH/PSS/PAH) cargada homogéneamente. Estos polielectrolitos fueron, por tanto, seleccionados con la finalidad de generar una carga superficial positiva necesaria para la posterior adsorción electrostática de nanopartículas de platino dendrítico (Pt<sub>d</sub>). Una vez depositadas las nanopartículas de Pt<sub>d</sub> en la superficie del polímero se recubren con sílice obteniendo PS@Pt<sub>d</sub>@ SiO<sub>2</sub>, para posteriormente eliminar el PS y conseguir cápsulas huecas y porosas con Pt<sub>d</sub> adherido a su superficie interna. Algunos ejemplos de catalizadores localizados en nanocavidades han sido descritos sin tener en cuenta la variación de la actividad catalítica durante o debido a la encapsulación. En este trabajo se presentan nanocápsulas donde la actividad catalítica de las nanopartículas de platino se mantiene después del proceso de encapsulación. Además, estos materiales no son sólo útiles para llevar a cabo reacciones químicas sino también para la fabricación de materiales. De este modo, haciendo uso de la actividad catalítica de las nanopartículas de Pt<sub>d</sub>, se pueden reducir diferentes metales, quedando por tanto confinados en el interior de las cápsulas, ofreciendo así nuevas rutas de síntesis de catalizadores dentro de los nanoreactores.

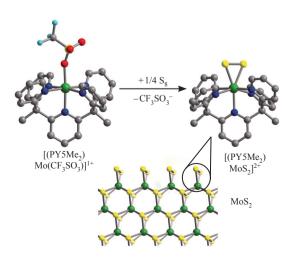


#### La molibdenita, material útil en electrónica y catálisis

La molibdenita, disulfuro de molibdeno, es un mineral que pertenece al grupo de los sulfuros, con apariencia y tacto similar al grafito. La estructura cristalina de la molibdenita fue determinada por Linus Pauling y su tutor de tesis doctoral, Roscoe Dickinson, mediante difracción de rayos X. La investigación fue publicada en *J. Am. Chem. Soc.* 1923, 45, 1466–1471, donde se describe la estructura compuesta por 6 átomos de azufre, que conforman un prisma hexagonal, alrededor del átomo de molibdeno. La molibdenita, como consecuencia de su estructura laminar, compuesta por una capa de átomos de molibdeno entre dos capas de átomos de azufre, presenta un bajo coeficiente de fricción y se utiliza a menudo como lubricante sólido o como aditivo para lubricantes.

Científicos del laboratorio de electrónica de la Escuela Politécnica Federal de Lausanne (EPFL) han revelado que este mineral es un semiconductor muy eficaz y presenta un gran potencial en la producción de transistores muy pequeños, diodos emisores de luz (LEDs) y células solares (Nature Nanotech. 2011, 6, 147-150). Además, los autores describen ventajas de la molibdenita en comparación con otros materiales como el silicio y el grafeno. Frente al silicio tridimensional, es posible preparar la molibdenita en una sola capa de menor espesor y, además, fabricar transistores que consuman mucha menos energía que los tradicionales compuestos por silicio. En comparación con el grafeno, el disulfuro de molibdeno presenta una banda prohibida de 1,8 eV, que ofrece un mayor control sobre el comportamiento eléctrico del material, mientras que el grafeno no presenta esta banda, propiedad esencial para algunas aplicaciones electrónicas, como la fabricación de transistores.

Más recientemente, se ha encontrado una variación de la molibdenita teniendo un ligando pentapiridil coordinado. Este complejo imita los fragmentos triangulares activos de los bordes de la estructura de disulfuro de molibdeno y que tiene la propiedad de catalizar la producción electroquímica de hidrógeno. Este complejo se presenta como una alternativa de bajo coste, frente al platino, para la producción de hidrógeno a partir de agua acidificada (*Science* 2012, 335, 698–702). Los autores presentan como estrategia el empleo de unidades moleculares discretas para conseguir aumentar la densidad de sitios del material y así, conseguir catalizadores más activos con menor cantidad de material.



# La compleja red de canales de la zeolita ITQ-39 explica sus propiedades

Por sus interesantes propiedades, las zeolitas son frecuentemente usadas desde las industrias petroquímica o nuclear a aplicaciones más domésticas como limpieza de gateras o acuarios. Los usos en química, tanto básica como aplicada, son innumerables, desde catálisis hasta la absorción y separación de compuestos orgánicos, pasando por aplicaciones biomédicas (por ejemplo, liberación de fármacos).

Estas aplicaciones son consecuencias de la estructura de estos materiales; que son sólidos cristalinos microporosos compuestos por una red de tetraedros (TO<sub>4</sub>, donde T representa átomos como Si, Ge, Ti, Al, B, Ga,...), que comparten todos sus vértices dando lugar a una estructura tridimensional con canales de dimensiones moleculares. Se conocen más de 190 zeolitas diferentes, aceptadas por la *International Zeolite Association* (IZA), clasificadas según su sistema de canales (monodireccional, bidireccional o tridireccional), o según su tamaño de poro (pequeño-8-MR, medio-10-MR, largo-12-MR, o extralargo-12-MR). El conocimiento de la estructura, a nivel atómico, de las zeolitas es de gran importancia para poder estudiar sus propiedades y predecir las posibles aplicaciones de estos materiales.

Una de las zeolitas con mayor potencialidad industrial es la ITQ-39, sintetizada por el grupo de Avelino Corma (ITQ-CSIC) en 2011 (J. Am. Chem. Soc. 2011, 133, 9497–9505), que ha demostrado ser muy eficaz en las conversiones catalíticas de compuestos aromáticos o de gasolina en diesel. Sin embargo, en el caso de la zeolita ITQ-39, la elucidación de su estructura resulta muy dificil ya que presenta partículas de polvo de tamaño nanométrico y diferentes defectos en su estructura. El grupo de Corma ha descrito un método basado en la técnica de cristalografía de difracción de electrones (Nature Chem. 2012, 4, 188–194) para resolver la estructura tridimensional de compuestos como la ITQ-39. El método desarrollado consta de dos softwares basados en el estudio de defectos en cristales, como son la tomografía de difracción de electrones por rotación y el método de reconstrucción a través de las imágenes obtenidas mediante microscopía electrónica de transmisión de alta resolución. De esta forma, han determinado la estructura de la zeolita ITQ-39, que está formada por tres polimorfos distintos con una estructura tridimensional de canales de tamaño de 12-MR y 10-MR interconectados (el diámetro de los canales está determinado por el número de tetraedros que lo forman, denominándose número de anillo o MR).

Dicha estructura confiere a esta zeolita propiedades importantes para ser utilizada en procesos industriales como alquilación de benceno y nafta (gasolina), para lo cual se usan actualmente zeolitas de similar estructura como beta y MWW. De este modo, los autores compararon la actividad catalítica de la zeolita ITQ-39 para la conversión de nafta a diesel, obteniendo mejores conversiones y rendimientos y mayor tiempo de vida que las zeolitas comerciales beta y MWW.

# Reactivando la proteína p53 con derivados halogenados: estrategia en el desarrollo de fármacos anticancerosos

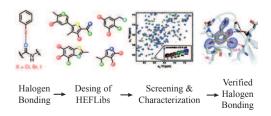
El grupo de investigación del Profesor Boeckler (Universidad Eberhard-Karls en Tubinga) ha descrito el diseño de una librería molecular constituida por derivados halogenados (HEFLib, *Halogen-Enriched Fragment Libraries*), y su aplicación como punto de partida para el desarrollo de nuevos agentes anticáncer (*J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 6810–6818).

La estrategia, denominada Fragment Based Discovery Drugs (FBDD), se basa en el cribado de librerías moleculares constituidas por no más de 10000 compuestos cuyo peso molecular no debe exceder de los 160 Da. Esta estrategia permite identificar compuestos sencillos (fragmentos químicos) con afinidades por las dianas terapéuticas inferiores a 1  $\mu$ M. La modificación estructural posterior de estos fragmentos facilita el desarrollo de moléculas de bajo peso molecular biológicamente activas.

En esta publicación se ha elegido como diana una mutación de la proteína p53, que previene generalmente la formación de tumores, se encuentra inactiva en la mayoría de los cánceres debido a un proceso de mutación o de simple perturbación. De ahí que el desarrollo de compuestos capaces de promover la estabilización y reactivación de la proteína p53 sea un área de investigación de enorme interés.

La HEFLib desrrollada por Boeckler está formada por derivados de 6-yodofenol sustituidos, algunos de los cuales causan la muerte de celulas cancerosas, lo que apoya la hipótesis de que su acción se deba a la reactivación de la proteina p53. En este estudio se han resuelto la estructuras cristalina por difracción de rayos X de los complejos con la proteína, lo que ha permitido establecer que la interacción del átomo de yodo aromático con el oxígeno carbonílico de un residuo de leucina es fundamental para su actividad biológica.

Estos resultados abren un amplio camino en la identificación de nuevos agentes anticancerosos. Pero lo más relevante es la futura aplicación de las HEFLib al descubrimiento de nuevos compuestos específicos de dianas terapéuticas muy variadas.



Noticias redactadas por: Héctor Busto (Universidad de La Rioja), Bernardo Herradón (IQOG-CSIC), Enrique Mann (IQOG-CSIC), Sonsoles Martín-Santamaría (Universidad CEU San Pablo), Yolanda Pérez-Cortés (Universidad Rey Juan Carlos) y Mª del Carmen de la Torre (IQOG-CSIC).

# ChemPubSoc Europe

16 societies • 11 journals • 1 network



















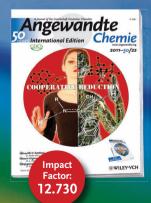


E-magazine for chemists



- High Impact Factor journals
- Short publication times
- Excellent authors
- Top editorial services
- Supported by 73,000 society members

Closely associated with



www.ChemistryViews.org

www.chempubsoc.eu





# SANTANDER HOGAR SATISFACCIÓN



# Nosotros comprometidos Tu hogar protegido Tú satisfecho

**LLEGAMOS** 

24h

**EVALUAMOS** 

48h 72h

**PLANIFICAMOS** 

www.bancosantander.es

**ARREGLAMOS** 

94% de satisfacción\*



# Web Toolbox

SIGMA-ALDRICH



Structure Search



**Your Favorite Gene** 



**Mobile Apps** 



**Unit Converter** 



Antibody Explorer



0

Standards Explorer Analytical



Normality & Molarity Calculator



Videos & Webinars



**Antibiotic Selector** 



**Enzyme Explorer** 



Glassware Center



Interactive Periodic Table



Reagents Search Analytical



Pressure-Temperature Nomograph



**Applications Explorer** Analytical

and much more can be found at www.sigmaaldrich.com/toolbox