

Síntesis de acenos superiores, Ruth Dorel

Viaje químico a las atmósferas de los planetas del sistema solar: Una propuesta de aprendizaje contextualizado de la ciencia, Josep Corominas Viñas

Mezclas eutécticas como alternativa sostenible a los disolventes convencionales en Química Orgánica, Rafael Chinchilla

Entidades colaboradoras



Socios Corporativos

- Sigma Aldrich (Merck)
- Bruker
- Cepsa
- Janssen Cilag
- Feique
- Lilly España

Anales de Química

Revista de la Real Sociedad Española de Química

Editor General

Miguel Ángel Sierra
Universidad Complutense de Madrid

Comité Editorial

Fernando P. Cossío
Universidad del País Vasco Ikerbasque

Silvia Lacorte Bruguera
Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua, CSIC

Óscar Millet
CIC bioGUNE

Gabriel Pinto
Universidad Politécnica de Madrid

M.^a Carmen Redondo
Colegio Estudio

María C. de la Torre
Instituto de Química Orgánica General, CSIC

Gregori Ujaque
Universitat Autònoma de Barcelona

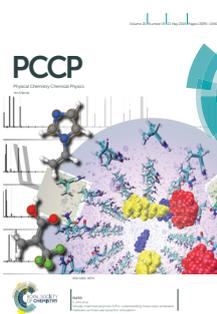
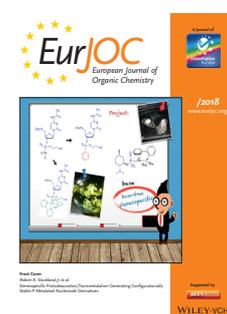
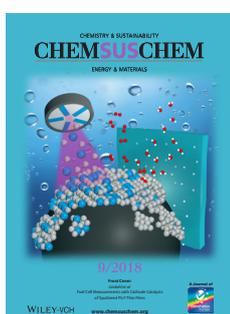
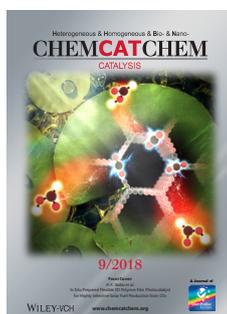
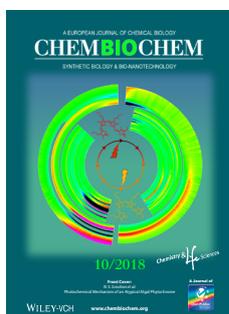
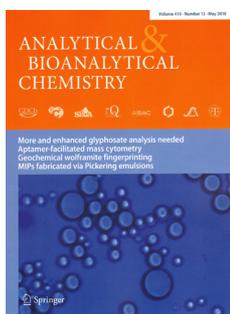
Secretaría Editorial

Patricia Yáñez-Sedeño
Real Sociedad Española de Química
www.rseq.org

Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense Ciudad Universitaria.
28040 Madrid
Tel (+34) 913 944 356. Fax (+34) 915 433 879



Revistas patrocinadas por la Real Sociedad Española de Química



Sumario



Composición y producción:

Moisés Fernández
Edinova Taller Editorial

Editorial	60
<i>Sonsoles Martín Santamaría</i>	
Carta del Presidente	61
<i>Antonio M. Echavarren</i>	
Cartas al editor	
<i>Las Olimpiadas Científicas y el menosprecio de la Ciencia, J. A. de Azcárraga, A. M. Echavarren, F. Marcellán</i>	62
<i>13.ª reunión anual de la European Young Chemists Network, Antonio M. Rodríguez y Fernando Gomollón</i>	64
Ensayo	
<i>La lenta agonía de la Universidad Española</i>	66
<i>Miguel A. Sierra</i>	
Investigación Química	
<i>Síntesis de acenos superiores</i>	69
<i>Ruth Dorel</i>	
<i>Mezclas eutécticas como alternativa sostenible a los disolventes convencionales en Química Orgánica</i>	79
<i>Diego A. Alonso, Alejandro Baeza, Rafael Chinchilla, Cecilia Gómez, Gabriela Guillena, Xavier Marset, Isidro M. Pastor, Diego J. Ramón, Diego Ros Níguez y Beatriz Saavedra</i>	
Enseñanza de la Química	
<i>Viaje químico a las atmósferas de los planetas del sistema solar: Una propuesta de aprendizaje contextualizado de la ciencia</i>	88
<i>Josep Corominas Viñas</i>	
<i>Radio Eslovaquia Internacional y la Teoría Atómica Moderna</i>	100
<i>Nuria Ruiz Morillas</i>	
Noticias de la RSEQ	104
Obituario	118
<i>Manuel Bernabé</i>	
<i>Julio Casado Linarejos</i>	
<i>Helmuth Möhwald</i>	
Reseñas de libros	
<i>Entre la Alquimia y la Química</i>	121
<i>Manuela Martín Sánchez</i>	

Anales de Química está disponible en versión impresa. Para más información, por favor contactar con pyanezs@ucm.es

Agradezco la oportunidad de dirigirme a vosotros desde estas líneas y poder salir del tono formal, funcional y práctico del día a día. También agradezco la confianza de Antonio M. Echavarrén para contar conmigo en el nuevo equipo que preside desde enero de 2018. Abordamos un gran reto después de la labor desarrollada por Jesús Jiménez Barbero en los años precedentes junto a José Manuel González y Pedro J. Pérez. Por mi parte, lo hago con una gran ilusión, muchas ganas y vocación de servicio.

Al escribir estas líneas, nos encontramos inmersos en la votación de la reforma de los Estatutos de la RSEQ. En esta reforma, han participado todos los Presidentes de Secciones Territoriales y Grupos en nombre de los socios a los que representan. Esta reforma, en realidad, podría denominarse simplemente “modernización” de los Estatutos, ya que se ha buscado adaptarlos a la situación presente de la RSEQ, con miras hacia el futuro, para poder trabajar así de forma más eficaz. En esta misma línea, también estamos trabajando en la renovación de la página Web. Como no, continuaremos apoyando el núcleo de la RSEQ, las actividades de los Grupos y Secciones Territoriales, así como otras actividades que han trascendido ya el ámbito del grupo o sección (lo que hemos denominado “eventos singulares”). Queremos también continuar la relación con otras sociedades científicas españolas y europeas, estrechando los lazos existentes y estableciendo nuevos, y también con otras sociedades internacionales.

Aumentar la representación del profesorado de enseñanza secundaria y bachillerato y apoyar sus inquietudes y actividades... ¿cómo hacerlo? Es una pregunta que ha estado presente en la RSEQ en los últimos años. Nos gustaría dar alguna respuesta. Continuamos con el apoyo decidido a las Olimpiadas de Química, y afrontamos tareas nuevas, como el acercamiento a las problemáticas concretas de los profesores en la enseñanza de la química. Desde la RSEQ, podemos darles voz. Para llevar a cabo muchas de estas medidas, el papel de las Secciones Territoriales es fundamental, ya que pueden canalizar el apoyo, patrocinio y visibilidad de muchas actividades, de forma más cercana e inmediata. También aquí queremos mejorar, apoyar de forma más intensa y aprovechar las iniciativas de Secciones más activas y creativas.

Además, es un objetivo importante el llegar a la juventud y que los más jóvenes se sientan representados en la RSEQ: doctorandos, estudiantes universitarios y alumnos de Bachillerato y Enseñanza Secundaria. Ellos son nuestro futuro y seguro que en la RSEQ pueden encontrar su sitio. Para ello ya hemos puesto en marcha la medida más sencilla, que es ofrecer una cuota de 5 euros para los menores de 25 años. Seguiremos poniendo en marcha otras medidas que faciliten su participación e integración en la RSEQ.

El año 2019 se presenta con varios acontecimientos importantes. Entre ellos, la celebración de nuestra XXXVII Reunión Bienal en Donostia - San Sebastián (capitaneada por Claudio Palomo) y la celebración del Año Internacional de la Tabla Periódica de los Elementos Químicos. Respecto al primer acontecimiento, quiero agradecer a todos los socios que se están implicando en la organización de simposios. Esta implicación hace que “la bienal” se haya convertido en un evento científico de referencia en España, con un formato dinámico, iniciado y madurado en



las dos ediciones anteriores, que permite incluir temáticas transversales y la participación activa de los Grupos Especializados, a la vez que la iniciativa individual de socios. De hecho, esta participación se materializó en la solicitud de 29 simposios por un total de 200 horas aproximadamente. Desde los Comités Científico y Organizador nos hemos visto obligados a reducir a 22 simposios (varios de ellos como fusión de simposios propuestos) y algo más de 100 horas. Desde aquí, agradezco a todos los socios y Grupos el trabajo y la buena disposición que han mostrado para que, una vez más, la bienal pueda ser un éxito.

El segundo acontecimiento que me gustaría destacar es el Año Internacional de la Tabla Periódica de los Elementos Químicos (IYPT-2019), proclamado así por las Naciones Unidas para reconocer “la necesidad de desarrollar una creciente conciencia global sobre el papel clave que juega la química en el desarrollo sostenible al proporcionar importantes soluciones a desafíos globales tales como la energía, la alimentación, la salud o la educación, entre otros”. Desde la RSEQ estamos poniendo en marcha una serie de actividades para darle el protagonismo que se merece y transmitir a la sociedad el papel beneficioso de la química. La conmemoración, que coincide con el 150 aniversario del descubrimiento del Sistema Periódico por Mendeleev en 1869, además coincide con el centenario de la IUPAC. Sin duda, ambos eventos contribuirán, de forma sinérgica, a mejorar la comprensión y valoración de la química en su conjunto.

Retomo la idea inicial de este editorial, en el que mencionaba el reto al que nos enfrentamos. Este gran reto supone continuar y consolidar el liderazgo de la RSEQ como sociedad científica española y como sociedad científica de referencia para investigadores, docentes y estudiantes, dentro de la química. La química entendida en su sentido amplio, como ciencia capaz de conversar en las fronteras con la física, la biología y la ingeniería. En definitiva, nuestro objetivo siempre será, con los fallos que seguramente tendremos, que la RSEQ sea una herramienta al servicio de los socios con los medios que tenemos a nuestro alcance.

Gracias y aquí me tenéis a vuestra disposición.

SONSOLES MARTÍN SANTAMARÍA
Secretaria General de la Real Sociedad Española de Química

Antonio M. Echavarren

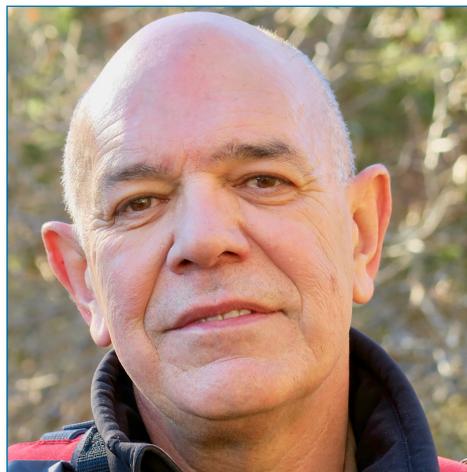
Estimados Socios:

Durante estos primeros seis meses de 2018, el Equipo de Gobierno de la RSEQ ha emprendido una serie de reformas, ya anunciadas en mi primera Carta como Presidente de la RSEQ en esta revista. Una de las reformas que creemos tendrá mayor calado, y que se desarrollará a lo largo de 2018 y el primer semestre de 2019, es el de gestión de nuestros recursos económicos, que se debe traducir en una mejor financiación de las actividades de la RSEQ a todos los niveles, especialmente a nivel local. Un mensaje que todos los socios deben de recibir es que la RSEQ cuenta con recursos suficientes para garantizar la cofinanciación de todas las conferencias, seminarios y cursos en cualquier ámbito de la química organizados en España y que incluyan conferenciantes de nivel nacional o internacional.

Como recordaba en mi anterior Carta, nuestros Estatutos tienen ya más de 15 años, un período en el que nuestra sociedad ha incrementado el número de sus socios en más de un 80%. Con el objetivo de afrontar esta realidad y dotarnos de una organización aún más dinámica, pensamos que era una tarea urgente el acometer una reforma de nuestros Estatutos y Reglamentos.

La reforma se ha discutido en dos Juntas de Gobierno y, tras recibir correcciones y enmiendas, el último borrador se aprobó por unanimidad en la reunión del 18 de mayo. Quiero aprovechar esta oportunidad en nombre del Equipo de Gobierno, para agradecer a todos los que han participado en la mejora de la propuesta inicial. La propuesta se ha enviado a todos los socios para su consideración en la Junta General Extraordinaria del 20 de junio en Santiago de Compostela. Aparte del voto presencial en dicha Junta, todos los socios que lo deseen podrán votar telemáticamente. La elección de Santiago de Compostela como sede de la Junta General Extraordinaria quiere aprovechar que en esa ciudad se organiza la reunión Bienal del Grupo de Química Orgánica, nuestro Grupo Especializado más numeroso. Aunque en la RSEQ ha sido habitual hacer coincidir las Juntas Generales con las reuniones científicas bienales, esta será la primera vez que una Junta General Extraordinaria tenga lugar en una ciudad diferente de Madrid. En esta línea, en el futuro tenemos previsto organizar algunas Juntas de Gobierno en otras ciudades españolas.

En esta reforma de los Estatutos proponemos incrementar los requisitos tanto para formar Grupos y Secciones como para que estos tengan representación en la Junta de Gobierno de la RSEQ. Para alcanzar estos mínimos, se ofrece un período de unos dos años, quedando finalmente en manos de la Junta de Gobierno cualquier decisión sobre posibles reestructuraciones o fusiones de Grupos o Secciones. Es importante destacar que ninguna de estas medidas pretende excluir a nadie de una sociedad en la que caben todos los químicos. Nuestro único propósito ha sido dotarnos de unos Estatutos que sean útiles para muchos años y que sirvan para



incentivar el aumento del número de socios de la RSEQ, con Secciones y Grupos más sólidos y dinámicos.

Para incentivar la incorporación de nuevos socios, hemos rebajado la cuota de afiliación a los más jóvenes, lo que permitirá a los estudiantes universitarios formar parte de la RSEQ por una cantidad casi testimonial. Los socios que se encuentren en paro también pagarán cuotas súper reducidas. También realizaremos en los próximos meses una campaña de captación de socios a todos los niveles con la ayuda de todas las Secciones Territoriales. El hecho de que 2019 haya sido declarado “Año Internacional de la Tabla Periódica de los Elementos Químicos”, actividad en la que la RSEQ se volcará a todos los niveles, debe también servir para incrementar el número de nuestros socios.

Los nuevos Estatutos mejoran otros aspectos de la vida de la RSEQ. Ahora, la adscripción de socios a Secciones Territoriales queda más clara, se contempla la posibilidad de crear Secciones Locales dentro de una Sección Territorial y se diferencia entre los Grupos Especializados y los organizados con cualquier otro criterio. También se crea el Comité Asesor del Presidente, formado por cinco miembros elegidos de entre los socios que hayan ostentado la Presidencia o la Secretaría General o que hayan sido galardonados con la Medalla de Oro o el Premio a la Trayectoria Distinguida de la RSEQ. Además de asesorar al Presidente en cualquier asunto, el Comité Asesor resolverá cualquier problema relacionado con la integridad ética profesional. Próximamente, el Equipo de Gobierno someterá a discusión de la Junta un documento que aborde este importante aspecto.

Finalmente, quisiera recordar que, aunque formamos parte de una sociedad científica muy descentralizada, en todas y cada una de las actividades que organicemos a cualquier nivel debemos de dejar claro que “todos somos RSEQ”, la sociedad líder de la química española.

ANTONIO M. ECHAVARREN
Presidente de la Real Sociedad Española de Química

Las Olimpiadas Científicas y el menosprecio de la Ciencia

Las Olimpiadas Científicas son un indicador del nivel de un país.

*A juzgar por el trato institucional que reciben,
el Ministerio de Educación vive de espaldas a la Ciencia*

Artículo publicado en el diario *El Mundo* el 22 de mayo de 2018.

En “La Ciencia en España como problema”, artículo publicado en el diario *El Mundo* el 4 de enero de 2017, señalábamos algunas de las dificultades de la Ciencia en nuestro país, desde el bajo lugar que ocupa en las preocupaciones reales de los ciudadanos hasta los insuficientes presupuestos de investigación, muy lejos de lo que corresponde a una de las potencias económicas de la Unión Europea. Queremos referirnos ahora a algo que constituye un verdadero escándalo y que pasa inadvertido para casi toda la sociedad española: el escaso aprecio del Ministerio de Educación, Cultura y Deporte (MECD) por el esfuerzo y capacidad de algunos de los mejores estudiantes preuniversitarios de ciencias de España. Las Olimpiadas Científicas Nacionales e Internacionales, que se celebran anualmente, constituyen uno de los acontecimientos más relevantes como vitrina del talento joven en las disciplinas científicas; Física, Química y Matemáticas en nuestro caso. Todos los países cuidan no sólo a los jóvenes que participan en ellas, sino que los profesores que los preparan y acompañan primero a la Olimpiada Nacional y después a las Internacionales, reciben un reconocimiento público por su infatigable y desinteresada labor, pues contribuyen a crear una auténtica “marca científica” de su país. Premios Nobel y medallas Fields (el “Nobel” de matemáticas) participaron en sus años juveniles en Olimpiadas Científicas, que siempre han servido para detectar y atraer talento al mundo de la Ciencia y la Tecnología. Hay también, por cierto, una interesante correlación entre los resultados de las Olimpiadas y los mejores países según los informes PISA.

El compromiso de los países punteros en Física, Química y Matemáticas con las Olimpiadas Científicas se inicia ya en las fases nacionales, apoyándolas no solo económicamente sino facilitando el trabajo de preparación previa en los centros escolares, fuera del horario de docencia regular. En el caso de España, el proceso comienza con las Olimpiadas locales en los distintos distritos universitarios y comunidades autónomas, donde los mejores pasan a la Olimpiada Nacional. Este acontecimiento, por cierto, es uno de los pocos que subsisten en España en el que jóvenes de todo el país conviven durante unos días mientras

participan en la Olimpiada Nacional, especialmente desde que la parcelación autonómica de la enseñanza universitaria restringió severamente su deseable movilidad. Los ganadores de las medallas de oro constituyen después la representación española en la Olimpiada Internacional y en la Iberoamericana.

En España, la organización de las fases locales y nacional de las Olimpiadas, y la constitución de las delegaciones que participan en las internacionales está, desde hace décadas, a cargo de las más que centenarias Reales Sociedades Españolas de Física (RSEF), Química (RSEQ) y Matemáticas (RSME), todas ellas sin ánimo de lucro, completamente independientes y cuyas actividades se realizan fundamentalmente gracias a las cuotas anuales de sus miembros. Hay que resaltar que sin la colaboración desinteresada de los profesores que participan en las fases locales (muchos de ellos miembros de la RSEF, la RSEQ o la RSME) y de todo el trabajo de preparación y coordinación que realizan nuestras Sociedades, las Olimpiadas no podrían celebrarse. Hay un extraordinario capital de conocimiento y de personas comprometidas en su organización que, aunque no aparece en ningún balance económico, literalmente no tiene precio. Al margen de la posible colaboración local y de las generosas facilidades de las distintas universidades donde se realizan las Olimpiadas, el MECD ha contribuido tradicionalmente a su celebración subvencionando las pruebas (que en física y química requieren material de laboratorio), los gastos de los profesores acompañantes y alumnos, incluidos los viajes a las ciudades de cualquier parte del mundo donde se celebran las Olimpiadas internacionales. Años atrás, el Ministerio de Educación daba becas para los estudios universitarios de medallistas; después, sólo premios en metálico y, hoy, nada. Aquellos premios tenían, además, un valor simbólico: el reconocimiento del talento y el esfuerzo de los mejores estudiantes de ciencias. Reconocimiento, por cierto, que merece un acto solemne en el Ministerio en honor de los medallistas, no sólo para honrar a esas jóvenes promesas, sino para transmitir inequívocamente al país que la Ciencia es esencial para su bienestar.

Las cartas al editor no requieren invitación y deben enviarse directamente a Miguel Á. Sierra: sierraor@ucm.es

Sin embargo, el mensaje actual es muy diferente. Desde hace años, la Dirección General del MECD que se ocupa –es un decir– de las Olimpiadas Científicas ha cambiado varias veces; dos, incluso, en el último año. La ausencia de coordinación y planificación de los servicios correspondientes del MECD y el permanente cambio de los responsables de las Olimpiadas, de las normas y de la gestión de las subvenciones, ha gravado nuestras Sociedades y multiplicado su trabajo extraordinaria e innecesariamente. Aunque no debiera ser así, tras cada cambio los nuevos responsables han de comenzar por averiguar qué son las Olimpiadas. Y, en el caso de las Olimpiadas Científicas de 2018, la desidia del MECD ha alcanzado cotas imposibles de justificar, aunque la intervención de Hacienda se esfuerza introduciendo trabas inverosímiles. Pues, sobre todo, hay desconocimiento, improvisación e incompetencia.

No sólo ha habido durante años retrasos en la transferencia de los fondos destinados a sufragar los gastos de las Olimpiadas Nacionales y que las Reales Sociedades han tenido que adelantar, sino que las Olimpiadas han tenido que iniciarse antes de que el MECD publicara las normas que las regulan. Las Olimpiadas Nacionales de Física, Química y Matemáticas de este año ya se han realizado con éxito en Valladolid, Salamanca y Jaén, respectivamente, sin que las normas de las Olimpiadas hayan sido establecidas por el MECD ni el Ministerio haya enviado representante alguno a su celebración. A este despropósito hay que añadir el agravante de que se ha comunicado que este año no hay garantía de subvención que compense los gastos ya realizados por nuestras tres sociedades para que las Olimpiadas Nacionales pudieran celebrarse. Esta situación confirma que el MECD da la espalda a la Ciencia y contrasta con lo que sucede en otros países, donde ministros y hasta algún presidente de gobierno ha participado en la solemne entrega de las medallas como reconocimiento a la creatividad y al talento científico de los jóvenes participantes (en España, en 2008, una clausura fue presidida por el Príncipe de Asturias acompañado por la propia ministra). Sin embargo, nuestros olímpicos serán parte esencial del futuro del país si no acaban antes captados, como ya se da el caso, por universidades extranjeras de primera línea a las que no preocupa el lugar de nacimiento de sus estudiantes. Reconozcamos al menos públicamente su esfuerzo.

Pese a la larga historia de las Olimpiadas Científicas, año tras año hay que explicar su funcionamiento a los

responsables ministeriales de turno (actualmente la Dirección General de Planificación y Gestión Educativa), la importancia que tienen para los jóvenes estudiantes, la compleja e ingente labor que realizan las Reales Sociedades a través de sus Comités Olímpicos para que puedan celebrarse, y la labor del muy numeroso, preparado y desinteresado grupo de profesores que preparan los estudiantes. No parece razonable pedir, además, que los profesores se costeen los gastos que ocasiona su contribución a las Olimpiadas, ni que las Reales Sociedades tengan que financiarlas sin apoyo ministerial. Esta situación está produciendo, desde hace tiempo, un estupor e indignación crecientes en las tres sociedades científicas que representamos; resulta difícil de comprender –pese a los problemas existentes, postcrisis incluida– la falta de interés del MECD en resolver algo que, en cualquier otro país, se considera importante. Más aún: las Olimpiadas requieren una financiación muy modesta para el MECD, pues lo que realmente no podría subvencionar por su elevadísimo coste nuestras Sociedades lo aportan gratuitamente. Por ello, creemos tener autoridad suficiente para solicitar al MECD que publique sin demora las normas de financiación de las Olimpiadas Nacionales ya realizadas y que permitan la participación de los medallistas de oro en la Olimpiada Internacional y en la Iberoamericana. De cara al futuro, la planificación de las Olimpiadas debería poderse hacer de forma anticipada, sencilla y estable, sin que constituyan la “patata caliente” que hoy se pasan entre sí los distintos organismos del MECD. Finalmente, debería realizarse un acto de reconocimiento a los medallistas, acompañados de sus familias, junto a los miembros de las delegaciones que participan en las Olimpiadas. Sería un merecido homenaje público al *esfuerzo* y el *mérito* de algunos de nuestros mejores estudiantes así como a los profesores que los preparan. La ciencia y la tecnología deben ser, también aquí, una seña de identidad de nuestro país. Convenzámonos todos, MECD incluido: sin Ciencia no hay futuro.

J. A. DE AZCÁRRAGA

Presidente de la Real Sociedad Española de Física (RSEF)

A. M. ECHAVARREN

Presidente de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ)

F. MARCELLÁN

Presidente de la Real Sociedad Matemática Española (RSME)

Sr. Editor,

Entre los días 5 y 9 de mayo, varios miembros del Grupo Jóvenes Investigadores Químicos (JIQ) de la RSEQ, además de nuestros compañeros de la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA) y Societat Catalana de Química (SCQ), acudimos para representar a la química española en Turín (Italia), durante la 13.^a reunión anual de la **European Young Chemists Network (EYCN)**, www.eycn.eu.

Esta iniciativa congrega a delegados jóvenes de todas las sociedades químicas que forman parte de **EuCheMS** (European Association for Chemical and Molecular Sciences, www.euchems.eu). Esta asociación europea busca promover las discusiones científicas y proveer una única e imparcial voz europea en política relativa a la química o campos relacionados.

Dentro de esta asociación, la EYCN representa a los jóvenes. Cualquier joven de menos de 35 años que pertenezca a alguna asociación miembro de EuCheMS, es automáticamente, miembro de EYCN. Uno de los objetivos de la EYCN es promover la química en Europa con diferentes iniciativas divulgativas y concursos como **PHOTOCHIMICA** (www.euchems.eu/6151-2/) o **Chemistry-REDISCOVERED** (www.euchems.eu/chemistry-rediscovered-european-competition/). EYCN también apoya la creación de nuevas redes profesionales, y fomenta las oportunidades educativas de

los miembros con iniciativas como **Young Chemists Crossing Borders (YCCB)**, un proyecto coorganizado con el Younger Chemist Committee (YCC) de la American Chemical Society (ACS), donde los premiados europeos reciben la oportunidad de participar y presentar en un congreso nacional de la ACS, a la vez que se invita a los premiados americanos a los simposios bienales de EuCheMS para que conozcan la red de jóvenes químicos europea. EYCN también promueve, en colaboración con la Sociedad de Química Italiana y el Consiglio Nazionale dei Chimici, el prestigioso premio **European Young Chemist Award (EYCA)**, www.eyca2018.org, que se convoca bianualmente y que tiene como objetivo reconocer la calidad investigadora de jóvenes científicos en ciencias químicas que se presentan en congreso de EuCheMS. Todas estas iniciativas se producen gracias a la colaboración con el poderoso tejido industrial que se encuentra en Europa y con las diferentes asociaciones que promueven oportunidades educativas y de relaciones interpersonales.

Además, este verano se celebrará en Liverpool el 7.^o congreso de química de EuCheMS (<https://www.euchems2018.org>), donde el EYCN estará presente con un simposio paralelo dirigido a los jóvenes europeos. El simposio, además de interesantes charlas científicas, contará con varios talleres prácticos sobre la preparación de soli-



Foto de grupo de los delegados europeos, durante la 13.^a reunión anual de EYCN en Turín

Las cartas al editor no requieren invitación y deben enviarse directamente a Miguel Á. Sierra: sierraor@ucm.es

citades en convocatorias a nivel europeo (ERC, MSCA), proyectos, currículum y formas de afrontar entrevistas profesionales. Además de la participación activa en dichas actividades, tenemos pensados varios eventos diseñados especialmente para que ampliéis vuestra red de contactos. Este congreso se encuentra entre los más relevantes para la comunidad científica europea, dado que es el único donde se reúnen químicos de todas las áreas y con varios perfiles profesionales de diversas regiones de Europa para presentar los últimos avances en sus respectivos campos.

Desde el grupo de Jóvenes Investigadores Químicos (JIQ) y los representantes en la EYCN os animamos a participar en estas valiosas actividades, ¡nos os perdáis esta magnífica oportunidad!

ANTONIO M. RODRÍGUEZ
Delegado del JIQ-RSEQ en EYCN

FERNANDO GOMOLLÓN-BEL
EYCN Steering Committee & Comité Científico
del 7th EuCheMS Chemistry Conference



7th EuCheMS
Chemistry Congress

Molecular frontiers and global challenges

ACC LIVERPOOL, UK
26–30 August 2018

www.euchems2018.org

La lenta agonía de la Universidad Española

Miguel A. Sierra

Cuando era más joven leí por primera vez una novela de Brian Aldiss titulada *En el lento morir de la Tierra*.¹ No es ni la mejor obra de Aldiss ni tampoco una gran novela, pero me enganchó como pocos otros libros lo han hecho. En ella se describe una Tierra agonizante, tan vieja que debido al “tidal locking” la mitad del planeta estaba expuesta al Sol a punto de convertirse en nova, y la otra permanecía en una noche perpetua. La parte solar estaba colonizada por una enorme higuera de Bengala, un único organismo que cubría todo el hemisferio iluminado. En esa higuera sobrevivían sin esperanza un grupo de humanoides esperando el final.

Haciendo gala de una capacidad para relacionar hechos que muchas veces raya el absurdo, hace unos días, después de terminar de releer por enésima vez la novela, caí en la cuenta de que esta es la situación de la Universidad Española. Sé que es difícil entender la relación, especialmente para quienes no han leído la novela de Aldiss, pero creo que podré explicarme.

Al igual que en “Hothouse” la Universidad Española está bloqueada en una situación de permanente iluminación (para unos) u oscuridad (para otros). Este bloqueo no es de marea si no un bloqueo burocrático. La universidad está sumergida en una burocracia absurda en la que es imposible hacer la más mínima gestión de forma eficiente. No sé si alguno de los habitantes del hemisferio iluminado podrá explicarme para qué, en tiempos en los que todo es digital, hace falta presentar las cosas por duplicado y a través de registro. Los que vivimos en el hemisferio oscuro simplemente no lo entendemos.

Además, el responsable último de la burocracia (el Ministerio de lo que sea, el nombre va cambiando periódicamente así que da lo mismo), complica las cosas más todavía. Con las inspecciones de gastos asusta a los habitantes de la zona iluminada. Estos a su vez trasladan a

la zona oscura sus temores y, ya lo tenemos, un bloqueo absoluto como en la novela. Por si no se me ha entendido, los habitantes de la zona iluminada son el Personal de Administración y de Servicios, mejor conocido como PAS, quienes reciben la luz directamente del Sol (el Ministerio o la Comunidad Autónoma, según corresponda).

Intentemos salir de la agonía de la universidad causada por la burocracia. ¿Es tan difícil asignar a cada profesor un porcentaje del presupuesto para docencia, darle libertad de gasto y luego pedirle justificación del mismo? Lo mismo vale para la ejecución de los dineros de investigación. La clave de este sistema (así funcionan por ejemplo en Estados Unidos o en Inglaterra) es la responsabilidad. El que alguien gaste dinero público de forma incorrecta no significa, ni mucho menos, que todos lo hagamos. El sistema burocrático universitario viola descaradamente la presunción de inocencia. Todos somos culpables de malversación de fondos públicos hasta que no se demuestre lo contrario. ¿No debería ser al revés, o es que aprendí mal lo que es una democracia? Sólo en los regímenes dictatoriales se es culpable mientras no se demuestre lo contrario. Para más *inri*, si por alguno de esos milagros que ocurren de vez en cuando, pillan a algún “chorizo”, normalmente la sanción es de risa, y solo sirve para reafirmar a la burocracia en que nos deben vigilar a todos.

El segundo componente de *En el lento morir de la Tierra*, es la higuera de Bengala que lo cubre todo de forma homogénea, asfixiando cualquier forma de vida que intente competir con ella. Algunos podrían pensar que la higuera es el Ministerio de turno, pero no. El Ministerio es el Sol responsable de todo. En esta universidad agonizante el análogo de la higuera sería el funcionariado. El funcionariado, al igual que la higuera, es homogéneo y lo ocupa todo en la universidad. Además, asfixia cualquier posibilidad de desarrollo de los profesores no funcionarios que dependen de la magnanimidad de los funcionarios para su supervivencia. ¿Se extraña alguien de que tanto



Universidad Complutense
C-e: sierraor@ucm.es

M. A. Sierra

Recibido: 19/05/2018. Aceptado: 29/05/2018.

¹ Traducción española de *The Long Afternoon of Earth*, publicada en 1962 (Signet, D2018) y posteriormente publicada en versión extendida como *Hothouse* (Faber, 1962). La versión española se publicó en una fantástica antología de ciencia ficción inglesa (*Ciencia Ficción Inglesa, Obras Escogidas*, vol 1, Aguilar, Madrid, 1969).

en Euskadi como en Cataluña se hayan creado sistemas de investigación y profesorado paralelos? Si no se puede vivir dentro de la higuera hay que vivir en las pocas zonas que ésta deja libre.

¿Qué hacemos para salir de esta situación? De otra forma ¿Cómo desarraigamos la higuera? Aquí hay varias opciones, desde mantener la situación actual con niveles de funcionariado distintos para cada escala (como en Francia: aunque la universidad francesa no es el espejo óptimo para mirarse, ellos lo hacen mejor que nosotros), hasta la forma más eficiente que es la inglesa o la americana. Allí un “Tenured Professor” es tan funcionario como aquí un catedrático. La diferencia es que allí funciona la ley de la oferta y la demanda. Ni todos los “Professors” cobran lo mismo en la misma universidad, ni tienen que estar perenemente como la higuera ocupando su espacio, por que hay formas ágiles para que el profesorado se mueva.

Adicionalmente, la higuera se reproduce a sí misma. Esto en la agonizante Universidad Española se llama endogamia. Los catedráticos colocamos a los nuestros que no tienen que ser necesariamente los mejores. Mal asunto para un organismo que pretende sobrevivir en un mundo cada vez más globalizado y competitivo. O acabamos con esta forma de pensar y de actuar o nuestra agonizante universidad se muere.

El tercer factor que también tiene paralelismo con la novela es la Democracia Universitaria (así con mayúsculas). En estos tiempos en los que se consulta a las bases para que sancionen, con su opinión mayoritaria, si me compro o no una camiseta nueva, lo que voy a decir está trasnochado y asumo que soy un abuelete demodé. ¿Dónde se ha visto que una universidad sea democrática? (la excepción es la *Российский университет дружбы народов*, pero eso es otra historia). La formación universitaria es un derecho que tiene un ciudadano en una democracia, pero a su vez es un privilegio que le cuesta mucho dinero a la sociedad. Por ello, la universidad debe ofrecer la mejor formación posible y de forma gratuita con un único criterio: la excelencia del profesorado y del alumnado. Esto no se consigue de forma democrática sino por méritos. Tampoco se consigue llevando la universidad a la puerta del alumno, como se ha hecho en este país. Es justo al revés. Por cierto, cuando los homínidos de la novela de Aldiss aplican la democracia, el grupo mayoritario toma la ruta errónea y se los comen los depredadores.

Dentro de la democracia universitaria es fundamental el carácter representativo de los distintos estamentos uni-

versitarios, desde los alumnos al personal docente, pasando por el personal de administración y de servicios. En la Universidad Española está claramente establecido el sistema de representatividad y proporcionalidad en sus distintos órganos de gobierno. Todos sabemos que desde el PAS hasta el último alumno intervienen en la elección de un rector. Por ello ya se cuida muy mucho el rector de no molestar a los distintos estamentos universitarios, su supervivencia depende de ello.

Junta estos dos aspectos de la democracia universitaria y el resultado es que nuestra universidad agoniza. ¿Es tan difícil que el Rector sea nombrado por el Parlamento Autonómico por una mayoría de 2/3 de la Cámara y que después tenga que dar cuentas a ese órgano democrático? Debe de serlo, porque no se hace.

¿Que hacer con una universidad democrática que no sea la *Российский университет дружбы народов*? Aquí la solución está al alcance de todos. Pueden mirar las universidades públicas de primer nivel en Inglaterra o Estados Unidos (no hablo de las alemanas porque no las conozco, pero me da la impresión de que no se deben de diferenciar mucho de las que menciono). En una universidad realmente democrática los mejores estudian gratis (gratis, no con unas becas miserables). No es democrático el que haya alumnos en un claustro o en un consejo de departamento. Lo democrático es que no haya alumnos que no pueden ir a la universidad por falta de recursos económicos o por que tienen que trabajar para ayudar a sus padres a mantener a la familia.

¿Y el PAS? Para eso están los sindicatos. Para negociar como en cualquier otra empresa las cuestiones laborales que les afectan. En ningún caso para influir en la gobernanza de la universidad, como ocurre ahora.

¿Agoniza la Universidad Española? Si me equivoco en lo que he expuesto arriba, estaría más sana que nunca. Pero, mucho me temo que los buitres (esos que vuelan dando vueltas y uno sabe que algo se está muriendo en el suelo) rondan el campus. La solución con la que termina la novela, con los protagonistas marchándose a otro planeta, es una que nuestra universidad no se puede permitir. Me he dejado otros problemas en el tintero¹ pero con los expuestos basta. O nos ponemos a ello o la higuera, el Sol y la “democracia” secan la, ya escasa, savia que le queda a nuestras universidades.

¹ Algunos de estos problemas los traté en el artículo “¿Tiene futuro la Investigación en la Universidad Española?”, revista *Claves de Razón Práctica*, núm 249, pág. 44 (noviembre-diciembre de 2016).

¿Quieres ser socio de una de las sociedades científicas más importantes de España?



**Si tienes menos
de 25 años,
hazte socio de la
RSEQ por 5 EUR**

 **RSEQ**
Real Sociedad Española de Química
www.rseq.org

Síntesis de acenos superiores

Ruth Dorel

Resumen: Tanto la excepcional eficiencia de los derivados del pentaceno en el campo de la electrónica molecular como la mejora en las propiedades semiconductoras predicha para los acenos con un sistema aromático más extendido han estimulado en los últimos años el desarrollo de nuevos métodos sintéticos y estrategias de funcionalización para la preparación de acenos superiores al tetraceno con el objetivo de obtener nuevos y mejorados materiales funcionales.

Palabras clave: acenos, hidrocarburos policíclicos aromáticos, síntesis, policiclos, semiconductores.

Abstract: The outstanding performance of pentacene-based molecules in molecular electronics as well as the predicted enhanced semiconducting properties of extended acenes has stimulated in recent years the development of new synthetic approaches and stabilization strategies for the preparation of acenes larger than tetracene with the aim of obtaining improved functional materials.

Keywords: acenes, polycyclic aromatic hydrocarbons, synthesis, polycycles, semiconductors.

INTRODUCCIÓN

Los acenos son una familia de hidrocarburos policíclicos aromáticos (HPAs) constituidos por anillos de benceno fusionados de forma lineal y, debido a sus excepcionales propiedades optoelectrónicas, han sido a lo largo de las últimas décadas objeto de amplio estudio por parte de la comunidad científica. Así, los acenos resultan atractivos como candidatos para ser implementados en dispositivos de electrónica molecular^[1] tales como transistores de efecto de campo (OFETs),^[2] diodos orgánicos de emisión de luz (OLEDs)^[3] o células fotovoltaicas.^[4]

Al contrario de lo que sucede con los miembros más pequeños de la serie, los acenos con más de cuatro anillos de benceno (tetraceno) no pueden extraerse a partir de fuentes naturales y, por consiguiente, sólo son accesibles a través de rutas sintéticas que, a menudo, implican múltiples etapas. Las prometedoras propiedades semiconductoras del pentaceno^[5] junto con las predicciones teóricas de unas propiedades mejoradas para sus homólogos superiores^[6] han estimulado un interés renovado en el desarrollo de nuevas estrategias para la preparación y aplicación de acenos superiores. Sin embargo, tanto la síntesis como la implementación de acenos superiores al pentaceno en materiales funcionales están limitadas por el hecho de que tanto la solubilidad como la estabilidad de dichos compuestos dis-

minuyen drásticamente conforme el número de anillos fusionados aumenta. Así, los acenos superiores típicamente se descomponen a través de procesos fotooxidativos^[7] así como a través de procesos de dimerización u oligomerización.^[8]

La naturaleza inestable de los acenos superiores también se puede explicar en términos de los sextetos aromáticos de Clar.^[9] Cualquier aceno posee únicamente un sexteto aromático distribuido a lo largo de todo el sistema conjugado (Figura 1a). Esto conlleva un rápido decrecimiento de la diferencia energética entre los orbitales HOMO y LUMO (Figura 1b)^[10] y por consiguiente un incremento de la reactividad química con cada anillo adicional fusionado,^[11] lo cual convierte la síntesis de los acenos más largos en un auténtico reto. De hecho, pese a que ya en 1939 se describie-



R. Dorel

University of Groningen
Stratingh Institute for Chemistry
Nijenborgh 4, 9747AG Groningen (The Netherlands)
C-e: r.dorel@rug.nl

Recibido: 01/02/2018. Aceptado: 04/05/2018.

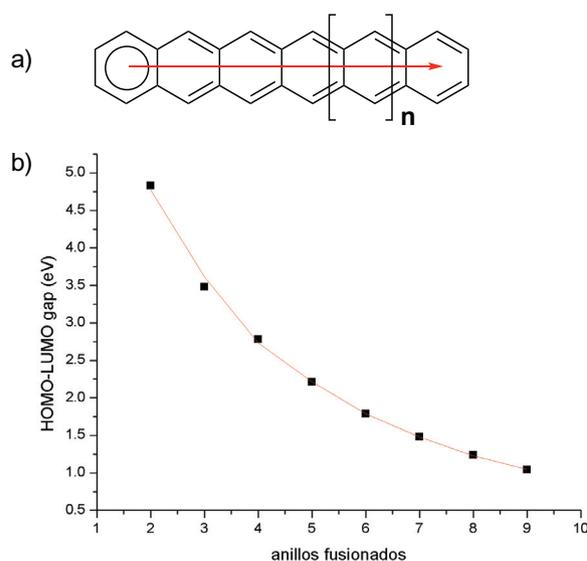


Figura 1. a) Sexteto de Clar en la serie de los acenos. b) Predicción teórica de la diferencia de energías entre los orbitales HOMO y LUMO en la serie de acenos^[10]

ran algunos trabajos seminales sobre la síntesis de acenos superiores al pentaceno,^[12] la naturaleza inestable de estos compuestos ha imposibilitado hasta hace muy poco tiempo una caracterización inequívoca de los mismos.

La reactividad de los acenos está fuertemente influenciada por los sustituyentes unidos al núcleo aromático y, por consiguiente, se han desarrollado a lo largo de los años diferentes estrategias de funcionalización con el objetivo de eludir la (foto)inestabilidad intrínseca a los acenos superiores.^[13] Un bloqueo estérico del anillo central de la molécula minimiza las reacciones intermoleculares impidiendo así procesos de dimerización u oligomerización, mientras que la incorporación de sustituyentes que influyen electrónicamente el núcleo aromático es una estrategia común para reducir la tendencia a la fotooxidación. Por otro lado, la introducción de heteroátomos en la estructura de los acenos tiene un notable efecto en sus propiedades físicas y químicas.^[14] Así, los heteroacenos presentan un mayor potencial de oxidación y una mayor diferencia energética entre los orbitales HOMO y LUMO, lo cual se traduce en una mayor estabilidad en comparación con los correspondientes hidrocarburos.

En los últimos años se han sintetizado una variedad de acenos estabilizados con diferentes sustituyentes con el objetivo de mejorar tanto su procesabilidad como sus propiedades optoelectrónicas. Sin embargo, no existe una estrategia general para la síntesis y funcionalización de anillos de benceno linealmente fusionados.^[13,15] En este contexto, el objetivo del presente trabajo es compilar las diferentes estrategias que se han empleado en los últimos años para la preparación de derivados estabilizados de acenos superiores al tetraceno así como para la preparación de los correspondientes hidrocarburos no funcionalizados. La discusión se ha organizado de acuerdo con el tipo de transformación empleada para formar el núcleo aromático de los acenos tal y como se muestra en la Figura 2.

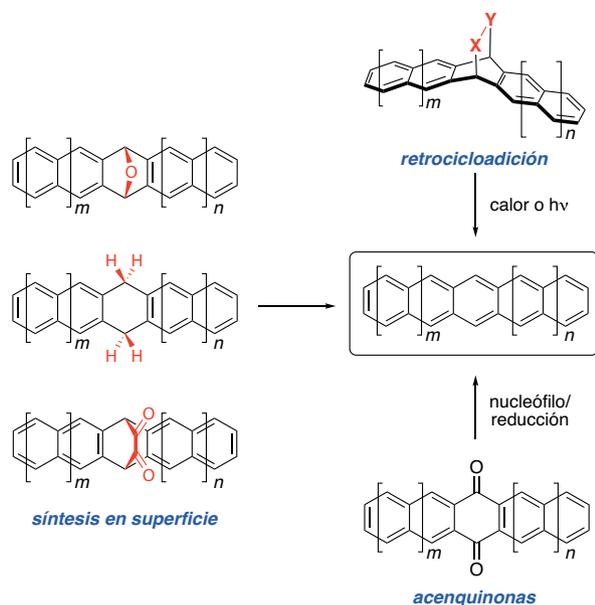


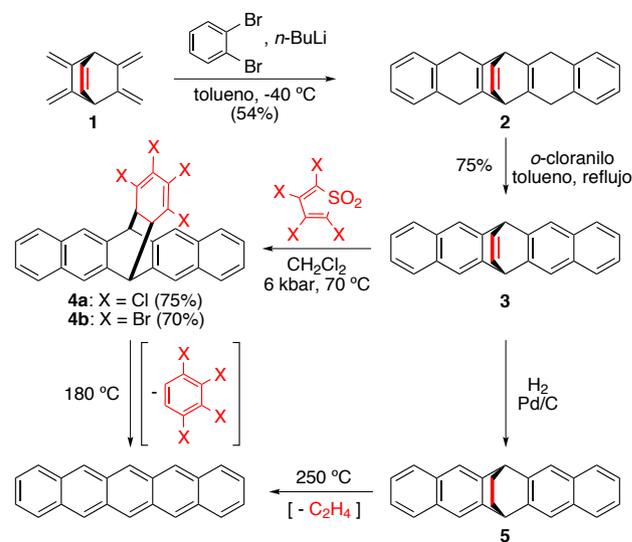
Figura 2. Estrategias generales para la síntesis de acenos superiores

ACENOS POR RETROCICLOADICIÓN

Una manera de abordar la síntesis de los acenos superiores es utilizar precursores estabilizados con grupos solubilizantes que sean a su vez acenos enmascarados y puedan por tanto ser convertidos en acenos mediante la eliminación de dichos grupos.^[16] Esta estrategia ha permitido no sólo la preparación de nuevos dispositivos electrónicos basados en acenos sino también el acceso a la serie de acenos superiores no sustituidos hasta el nonaceno,^[15a] los cuales debido a su elevada reactividad sólo pudieron ser generados en matrices sólidas de gases inertes.

Eliminaciones inducidas térmicamente

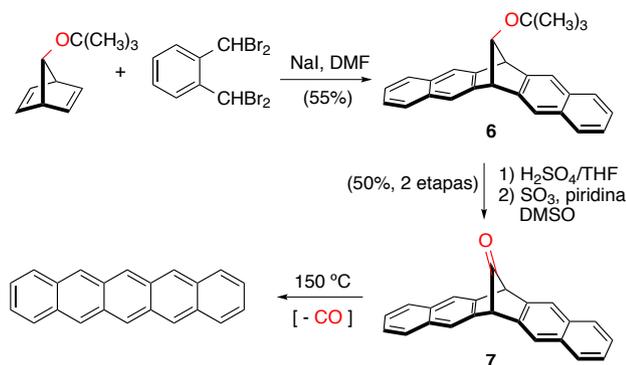
En 1996 se publicó un trabajo pionero en esta área, el cual describe la formación de una fina película de pentaceno a través de una transformación de retro-Diels-Alder del aducto de dicho aceno con tetraclorobenceno (**4a**) inducida térmicamente.^[17] Este precursor y su análogo bromado **4b**, el cual también pudo ser convertido en pentaceno en estado sólido, fueron preparados mediante la cicloadición de Diels-Alder entre **3** y el correspondiente dióxido de tetrahalotiofeno a elevadas presiones (Esquema 1).^[18] De manera análoga, la termólisis de **5**, derivado de la hidrogenación de **3** sobre Pd/C, dio lugar a pentaceno tras la eliminación de eteno a 250 °C.



Esquema 1. Síntesis de pentaceno mediante retro-Diels-Alder

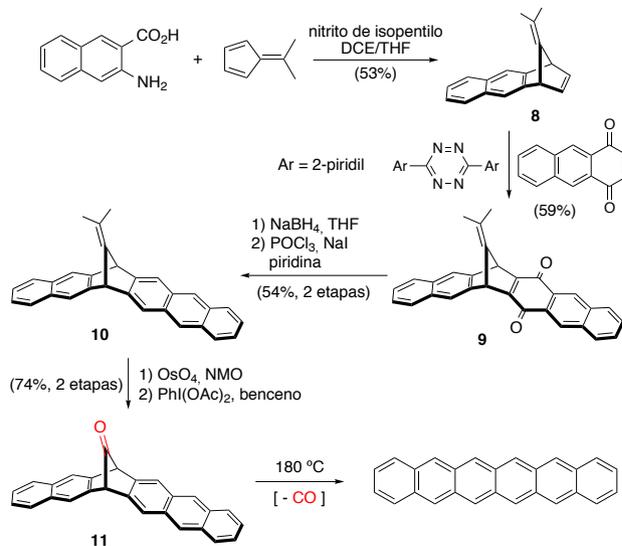
Esta estrategia ha permitido también la preparación de películas delgadas de pentaceno mediante reacciones de retro-Diels-Alder inducidas térmicamente a partir de cicloadductos con diferentes dienófilos tales como *N*-sulfonilbutilcarbamatos^[19] o cetomalonatos de dietilo,^[20] los cuales también se han utilizado para preparar un precursor soluble del hexaceno.^[21]

Las finas películas de acenos preparadas mediante procesos de retro-Diels-Alder exhiben en general movilidades de carga más altas en los casos en los que los cicloaductos precursores contienen grupos salientes de menor tamaño, lo cual se ha atribuido a una menor contaminación del grupo saliente en la película resultante.^[22] En este contexto, derivados de acenos con grupos carbonilo puente dan lugar a los correspondientes acenos mediante descarbonilación térmica quelotrópica, siendo por tanto monóxido de carbono el único subproducto generado. A modo de ejemplo, el compuesto **6** derivado de una doble reacción de Diels-Alder entre un *orto*-quinodimetano y 7-*tert*-butoxynorbordadieno se convirtió en el precursor de pentaceno **7** mediante una secuencia de desprotección y oxidación del alcohol secundario en la posición puente (Esquema 2).^[23] El precursor **7** dio lugar a pentaceno en rendimiento prácticamente cuantitativo mediante la extrusión de CO al calentar a 150 °C. De forma similar los precursores con grupos cetal en la posición puente dan también lugar a pentaceno a través de la eliminación de CO₂ a elevadas temperaturas.^[24]



Esquema 2. Síntesis de pentaceno mediante descarbonilación quelotrópica inducida térmicamente

La síntesis de hexaceno también fue completada con éxito a partir del correspondiente precursor **11** con un carbonilo puente mediante extrusión de CO a 180 °C en estado sólido (Esquema 3).^[25] El precursor **11** se obtuvo en seis etapas a partir del ácido 3-amino-2-naftóico, el cual reacciona con 6,6-dimetilfulveno para dar lugar al intermedio bicíclico **8** a través de la formación *in situ* de un intermedio de bencino. La reacción de Diels-Alder entre **8** y 1,4-antraquinona da lugar al cicloaducto **9**, el cual se puede convertir en el precursor de hexaceno **11** mediante la reducción de los grupos carbonilo y posterior ruptura oxidante del doble enlace en la posición puente. El hexaceno generado mediante este método pudo posteriormente ser cristalizado, permitiendo así la primera elucidación inequívoca de su estructura mediante difracción de rayos X. A partir de estos cristales también fue posible estudiar las propiedades semiconductoras del hexaceno en estado sólido. Además, en contra de lo que se había establecido anteriormente,^[26] el hexaceno se pudo almacenar en estado sólido en condiciones ambientales siempre y cuando



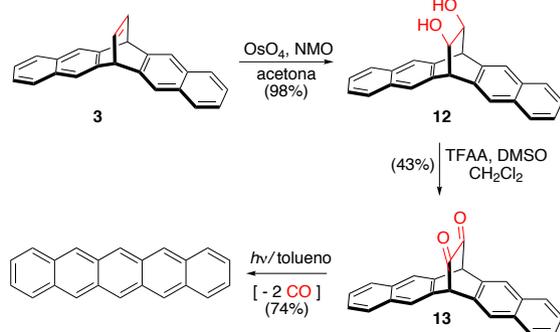
Esquema 3. Síntesis de hexaceno mediante descarbonilación térmica

se mantuviera en la oscuridad durante más de un mes sin observarse degradación significativa, aunque este aceno resultó ser extremadamente inestable en disolución o en presencia de luz.

Eliminaciones inducidas fotoquímicamente

Pese a que la termólisis de ciertos precursores para generar los correspondientes acenos es un método importante para preparar OFETs que puedan ser procesados en disolución, las altas temperaturas requeridas en este proceso a menudo limitan su aplicabilidad. Por el contrario, la conversión fotoquímica de los correspondientes precursores en acenos presenta la ventaja de que se puede llevar a cabo a temperaturas iguales o inferiores a la temperatura ambiente, lo cual ha motivado en los últimos años la síntesis de diferentes tipos de precursores de acenos fotoconvertibles.^[27]

El primer ejemplo de síntesis fotoquímica de acenos se describió en 2005 y consistió en la síntesis de pentaceno mediante una reacción de Strating-Zwanenburg a partir del precursor **13**, el cual contiene una subestructura de biciclo[2.2.2]octano-2,3-diona (precursor α -dicetona).^[28] La síntesis del fotoprecursor **13** se llevó a cabo mediante dihidroxilación del eteno puente en **3** para dar lugar a **12**, seguida de una doble oxidación de Swern (Esquema 4). La irradiación de **13**, en ausencia de oxígeno para evitar la formación de endoperoxidos, dio lugar a pentaceno tanto en disolución como en estado sólido. La fotodescarbonilación de precursores α -dicetona también se ha utilizado para preparar derivados de pentaceno funcionalizados.^[29] Además, la síntesis de pentaceno^[30] y hexaceno^[25] a partir de los correspondientes precursores con grupos carbonilo puente se pudo también llevar a cabo, además de térmicamente,^[25,27] fotoquímicamente en ausencia de oxígeno.

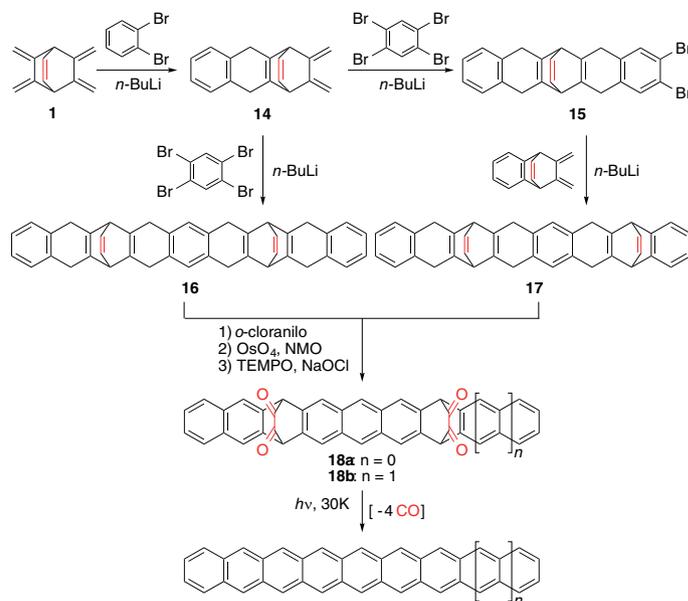


Esquema 4. Síntesis de pentaceno a partir del precursor α -dicetona **13**

La síntesis de acenos superiores al pentaceno constituyó un verdadero desafío hasta que recientemente, tras haberse llevado a cabo la síntesis del pentaceno de forma satisfactoria,^[28] la conversión fotoquímica de precursores α -dicetona estables se aplicó con éxito para preparar hexaceno^[26] y otros acenos superiores hasta el nonaceno. Los acenos superiores no sustituidos muestran una gran propensión a la dimerización y oligomerización, la cual sólo pudo prevenirse mediante aislamiento de estos materiales en matrices inertes. De hecho, aunque ya en los años 1940 y 1950 se describieron algunos intentos de preparar heptaceno,^[31] los análisis llevados a cabo para la caracterización de los productos obtenidos en aquel momento no pudieron demostrar de forma inequívoca la generación de este aceno y, por consiguiente, la existencia del heptaceno fue durante mucho tiempo objeto de controversia, llegándose a la conclusión de que este aceno era el límite de estabilidad en la serie.

No fue hasta 2006 cuando el heptaceno pudo ser detectado de forma inequívoca tras generarlo en una matriz polimérica mediante fotodegradación del correspondiente precursor α -dicetona.^[32] No obstante, el heptaceno no pudo aislarse cuando la irradiación del mismo precursor se llevó a cabo en una disolución en tolueno e, incluso en la matriz sólida, su tiempo de vida no superó las 4 h debido a la difusión de oxígeno en la matriz.

En lo que respecta a acenos superiores al heptaceno, tanto el octaceno como el nonaceno pudieron ser generados mediante la descarbonilación fotoquímica de los correspondientes precursores α -dicetona **18** cuando ésta se llevó a cabo a 30 K en una matriz de argón sólido (Esquema 5).^[33] Los fotoprecursores de ambos acenos fueron concebidos de modo que ninguno de ellos contuviera ningún fragmento aromático mayor que el antraceno para garantizar tanto la estabilidad como la solubilidad de los mismos y, por consiguiente, en estos precursores se introdujeron dos puentes α -dicetona por molécula. De este modo, el esqueleto de estos acenos se ensambló mediante secuencias de cicloadiciones de Diels-Alder, las cuales dieron lugar a los derivados parcialmente hidrogenados **16** y **17**, y éstos fueron posteriormente sometidos a aromatización en presencia de *o*-cloranilo seguida de una secuencia de dihidroxilación/oxidación similar a la que ya se había desarrollado para la síntesis de los precursores de pentaceno.^[28]



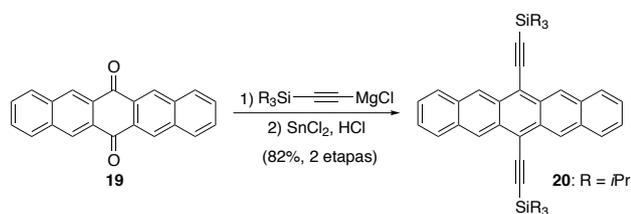
Esquema 5. Síntesis fotoquímica de octaceno y nonaceno

ACENOS A PARTIR DE ACENQUINONAS

Las acenquinonas son materiales de partida muy comunes para la preparación de derivados de acenos bien mediante reducción directa de los grupos carbonilo o mediante la adición nucleófila de especies organometálicas seguida de aromatización reductora. Estos precursores se obtienen habitualmente mediante cicloadiciones de Diels-Alder o a través de reacciones de tipo Friedel-Crafts intramoleculares y exhiben, en general, una estabilidad y solubilidad muy superior a las de los correspondientes acenos homólogos.

Derivados de pentaceno

La adición de nucleófilos a acenquinonas fue la estrategia inicialmente utilizada para preparar derivados de pentaceno con propiedades optoelectrónicas mejoradas,^[34] aunque la implementación de estos materiales en dispositivos electrónicos todavía estaba en este punto limitada por la elevada propensión de estos compuestos a reaccionar con oxígeno molecular en presencia de luz. El punto de inflexión en lo que a síntesis de acenos orientada a la aplicación práctica en dispositivos se refiere se reportó en 2001, año en el que se describió la síntesis de 6,13-bis(triisopropilsilil)pentaceno (**20**) a partir de pentacenquinona **19** (Esquema 6).^[35] Los sustituyentes (triisopropilsilil) etinilo confirieron a este compuesto por un lado suficiente solubilidad y estabilidad como para poder ser procesado en condiciones ambientales y por otro lado una movilidad de huecos significativamente mejorada con respecto a la del pentaceno no sustituido como consecuencia del empaquetamiento que adopta **20** en estado sólido. A partir de



Esquema 6. Síntesis del bis(trimetilil)pentaceno **20**

entonces y siguiendo una estrategia similar se han conseguido preparar diversos derivados de pentaceno 6,13-dialquilados, siendo posible obtener tanto derivados con los dos sustituyentes alquilado idénticos^[36] como derivados asimétricamente disustituídos mediante el control de la estequiometría de la reacción.^[37]

Por otro lado, la reducción directa de 6,13-pentacenquinonas es una estrategia comúnmente empleada para la preparación de derivados de pentaceno carentes de sustituyentes en el anillo central.^[38] De hecho, la reducción por etapas de **19** a través del correspondiente diol da lugar bajo condiciones de reacción suaves a pentaceno de una pureza comparable a la de una muestra purificada mediante sublimación.^[39]

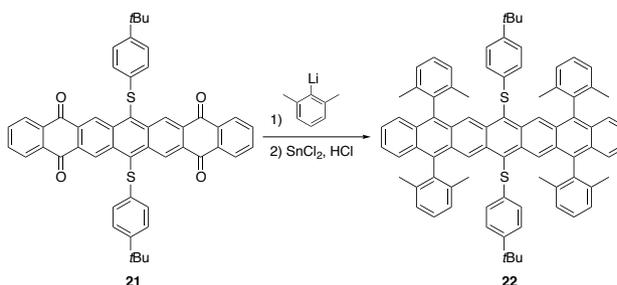
Derivados de hexaceno

La estrategia de sililación desarrollada para la síntesis de derivados de pentaceno^[37] también se ha aplicado con éxito para la preparación de derivados estables de otros acenos superiores. En el caso del hexaceno, el uso de sustituyentes (triisopropilsilil)etino no permitió obtener derivados estables, sino que fue necesario el uso de alquinos con grupos tri-*tert*-butilsililo más voluminosos para poder aislar el correspondiente derivado 6,15-bis (tri-*tert*-butilsilil) hexaceno.^[40] Posteriormente se demostró que otros sustituyentes trialkilsililo en los grupos alquino también dan lugar a derivados de hexaceno de estabilidad moderada, los cuales se descomponen principalmente a través de procesos de dimerización más que a través de fotooxidación.^[41]

Derivados de heptaceno

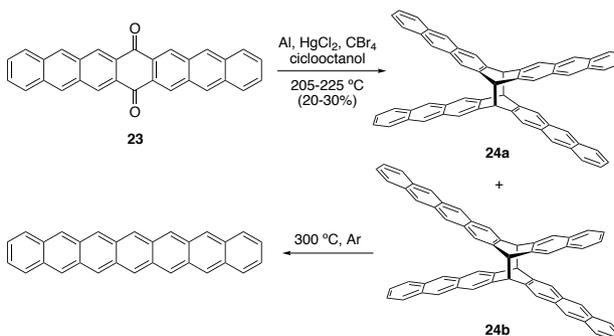
El primer derivado de heptaceno cristalino se preparó a partir de 7,16-heptacenquinona a través de una secuencia de dos pasos similar a la previamente descrita para la síntesis de **20**, aunque en este caso fue necesario el uso de un grupo tris(trimetilsilil)sililo mucho más voluminoso en ambos sustituyentes alquilado para evitar la descomposición del derivado de heptaceno final.^[40] Estudios posteriores demostraron que la inclusión de sustituyentes arilo directamente unidos al núcleo de heptaceno le conferían a éste una estabilización adicional, siendo entonces posible el uso de grupos triisopropilsililo menos voluminosos en los grupos alquilado.^[42]

Los grupos fenilo *o,o*-alquil-disustituídos confieren una mayor estabilidad a los acenos frente a la dimerización debido a que los sustituyentes en posición *orto*- se disponen directamente por encima y por debajo del plano del sistema π , mientras que los sustituyentes tioalquilo y tioarilo aumentan su resistencia a la fotooxidación.^[43] La combinación de estas dos estrategias de estabilización permitió la preparación de un derivado de heptaceno de elevada estabilidad (**22**), el cual permaneció inalterado durante semanas en estado sólido, durante días en disolución y en ausencia de luz, y durante horas en una disolución expuesta al aire y en presencia de luz (Esquema 7).^[44]



Esquema 7. Síntesis del derivado de heptaceno **22**

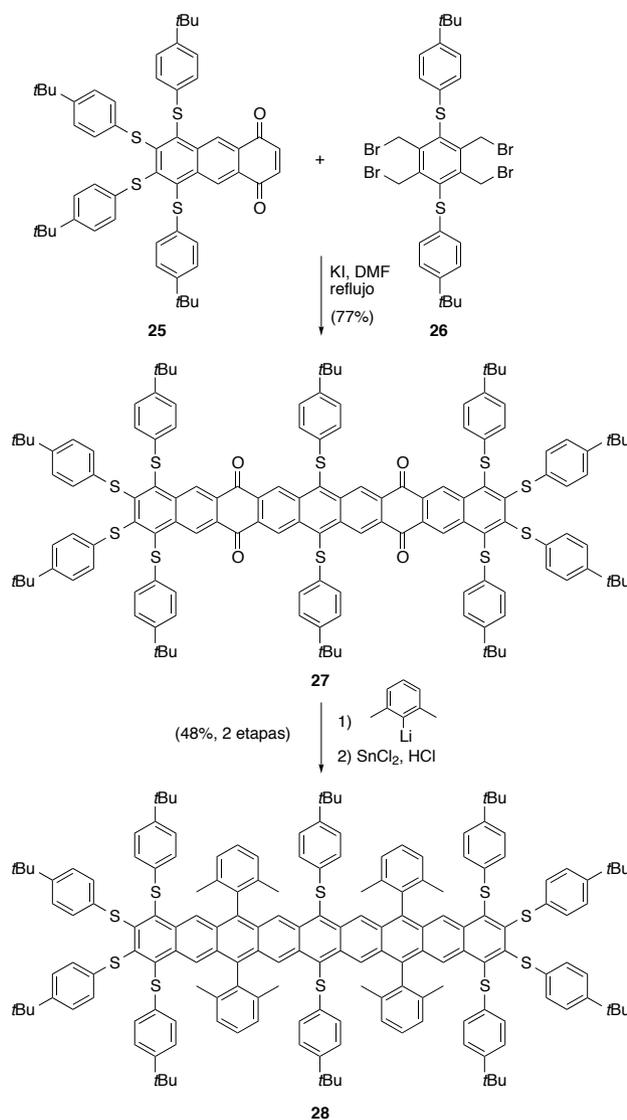
Por otro lado, la reducción de Meerwein-Ponndorf-Verley de acenquinonas es un método bien establecido para la preparación de acenos no sustituidos tales como antraceno o pentaceno.^[45] Sin embargo, la reducción de 7,16-heptacenquinona (**23**) en condiciones de reacción similares no permite la obtención directa de heptaceno. El producto mayoritario de esta transformación resultó ser una mezcla de dímeros del mismo **24a** y **24b**, los cuales pudieron ser convertidos en heptaceno en estado sólido tras calentar a 300 °C bajo una corriente de Ar (Esquema 8).^[46] El heptaceno así generado pudo ser almacenado en estado sólido y en ausencia de oxígeno, observándose una vida media de varias semanas a temperatura ambiente. Además, mediante este método se demostró por primera vez la posibilidad de generar finas películas de este aceno mediante técnicas de deposición en fase vapor.



Esquema 8. Síntesis de heptaceno en estado sólido

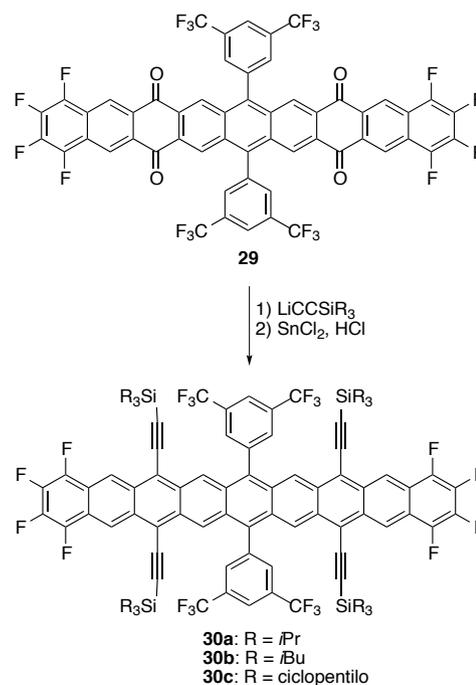
Derivados de nonaceno

La síntesis del primer derivado de nonaceno también se basó en el uso de sustituyentes arilo y tioarilo como grupos estabilizantes. De este modo, el así llamado “nonaceno persistente” **28** se obtuvo mediante la adición nucleófila del correspondiente reactivo organolítico a la bisquinona **27**, la cual resulta de una doble reacción de Diels-Alder entre **25** y el bisdieno generado *in situ* a partir de **26** (Esquema 9).^[47] El derivado de nonaceno **28** fue caracterizado a través de una serie de técnicas en disolución incluyendo espectroscopía de RMN de ¹H y ¹³C, UV/Vis/NIR y fluorescencia. Sin embargo, los datos espectroscópicos obtenidos para este compuesto resultaron posteriormente ser más consistentes con un derivado endoperóxido producto de la descomposición oxidativa de **28** que con un nonaceno funcionalizado.^[48]



Esquema 9. Síntesis del derivado de nonaceno **28**

Con el objetivo de asignar de forma inequívoca las propiedades optoelectrónicas del nonaceno se prepararon subsiguientemente una serie de derivados de dicho aceno moderadamente estables y completamente caracterizables (**30**) con sustituyentes electronattractores y grupos (trialquilil)etinilo voluminosos como agentes estabilizantes (Esquema 10).^[48] La exposición de disoluciones de **30** a la luz y al aire derivó en la completa descomposición de estos compuestos en cuestión de horas para dar lugar a los correspondientes endoperóxidos, cuyos perfiles espectroscópicos resultaron ser, como ya se ha mencionado, similares a los previamente descritos para **28**.^[47]



Esquema 10. Síntesis de derivados de nonaceno **30**

ACENOS SOBRE SUPERFICIES METÁLICAS

El desarrollo de nuevas técnicas de manipulación y análisis sobre superficies a lo largo de los últimos años ha dado lugar a un abanico de nuevas herramientas para el ensamblaje de nano-estructuras moleculares con un nivel de precisión sin precedente.^[49] Además, la combinación de condiciones de ultra-alto vacío junto con el uso de temperaturas criogénicas y sustratos químicamente inertes ha permitido la síntesis y caracterización detallada de moléculas que de otro modo serían demasiado reactivas y por tanto inestables como para ser estudiadas.^[50]

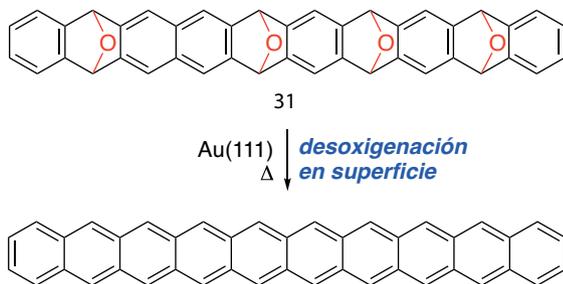
El primer ejemplo de síntesis de un aceno sobre una superficie metálica fue descrito en 2013 para la preparación de pentaceno sobre una superficie de Ni(111) a partir de tetratioantraceno como precursor.^[51] Desde entonces, la

química sobre superficies metálicas ha sido aplicada con éxito en la síntesis y caracterización de acenos superiores no estabilizados, habiéndose así conseguido recientemente la primera caracterización de las propiedades electrónicas de acenos con hasta diez anillos de benceno fusionados linealmente.

Acenos a partir de epoxiacenos

La síntesis de tetraceno en una superficie de Cu(111) fue descrita en 2016 a través de la reducción de mezclas de isómeros de diepoxitetraceno, obtenidos a través de cicloadiciones [4+2] de arinos, mediante manipulación atómica inducida por la punta de un microscopio de efecto túnel.^[52] Poco después y siguiendo una estrategia similar se consiguió la síntesis de moléculas de hexaceno sobre una superficie de Au(111), la cual permitió la obtención de imágenes de la estructura electrónica de este aceno.^[53]

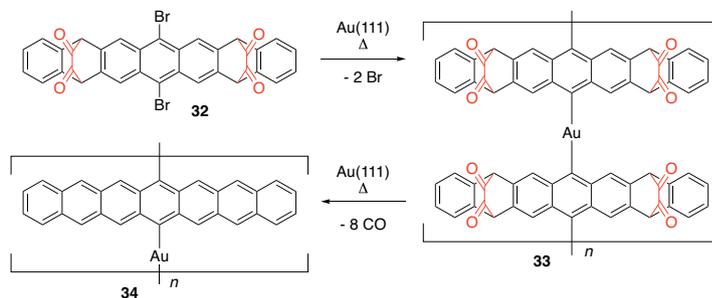
De manera análoga, recientemente se ha logrado por vez primera la preparación de moléculas de decaceno sobre una superficie de Au(111) mediante la reducción de mezclas de tetraepoxi-precursores **31**, obteniéndose así el aceno más largo que se ha descrito hasta la fecha (Esquema 11).^[54] La estructura electrónica de las moléculas de decaceno sobre Au(111) se estudió mediante técnicas de espectroscopía y microscopía de efecto túnel (STS y STM), obteniéndose un valor de 1.17 eV para la diferencia entre las energías de los orbitales HOMO y LUMO.



Esquema 11. Síntesis de decaceno sobre Au(111)

Acenos a partir de α -dicetonas

El precursor α -dicetona del heptaceno empleado anteriormente para su generación fotoquímica en una matriz criogénica^[32] se ha empleado también recientemente para la generación de heptaceno sobre una superficie de Ag(111).^[55] Además, el uso de precursores α -dicetona dibromados **32** permitió la obtención de complejos organometálicos de heptaceno **34** sobre una superficie de Au(111) (Esquema 12).^[56] La síntesis de estos complejos se llevó a término mediante un protocolo en dos etapas, mediante el cual en primer lugar se promovió a 435 K la formación de los complejos organometálicos de los deriva-

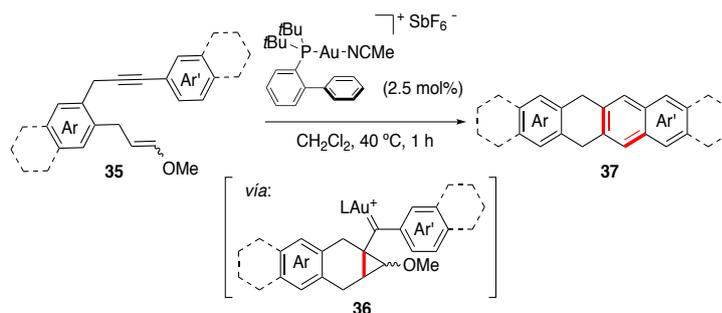


Esquema 12. Síntesis de complejos organometálicos de heptaceno sobre Au(111)

dos de heptaceno protegidos **33**, y posteriormente en una segunda etapa a 535 K se llevó a cabo la eliminación de los grupos α -dicetona puente y por tanto la síntesis de los núcleos de heptaceno.

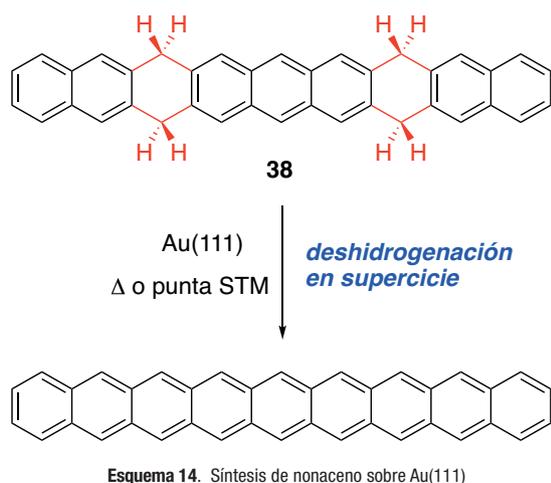
Acenos a partir de hidroacenos

Los acenos parcialmente saturados o hidroacenos, los cuales presentan una solubilidad y estabilidad notablemente mejoradas con respecto a las de los correspondientes sistemas conjugados, fueron descritos hace ya más de una década como "acenos protegidos por hidrógeno".^[57] Sin embargo, su uso como precursores estabilizados de los correspondientes acenos ha estado en general esencialmente limitado a la preparación de derivados de acenos con no más de cinco anillos de benceno, siendo posiblemente una de las principales razones para ello la escasez de métodos sintéticos que permitieran la preparación sistemática y selectiva de hidroacenos. Recientemente se ha descrito un método para la síntesis de hidroacenos **37** mediante la cicloadición de 1,7-eninos **35** catalizada por Au(I), la cual transcurre bajo condiciones de reacción suaves presuntamente a través de intermedios del tipo **36** (Esquema 13).^[58] Esta transformación, además de tolerar un amplio rango de grupos funcionales, permitió la síntesis de derivados parcialmente saturados de acenos superiores no sustituidos con hasta nueve anillos, los cuales resultaron ser estables bajo condiciones ambientales.



Esquema 13. Síntesis de hidroacenos **37** catalizada por Au(I)

El tetrahidrononaceno **38** preparado a través de dicho método se empleó posteriormente como precursor directo del correspondiente sistema conjugado, el nonaceno. Este proceso de deshidrogenación se llevó a cabo sobre una superficie de Au(111) y pudo ser inducido tanto térmicamente como mediante un microscopio combinado de efecto túnel y fuerza atómica (STM/AFM) (Esquema 14).^[59] De este modo, esta transformación permitió por primera vez el estudio detallado de las propiedades electrónicas de moléculas de nonaceno fisisorbidas en una superficie de Au(111), encontrándose una diferencia entre las energías de los orbitales HOMO y LUMO de 1.19 eV.



CONCLUSIONES

Los acenos con más de cinco anillos de benceno, pese a tener una estructura altamente simétrica y aparentemente simple, no pueden obtenerse fácilmente mediante técnicas sintéticas convencionales debido a su elevada tendencia a la descomposición en disolución a través de procesos de oligomerización y fotooxidación. Mientras que la introducción de sustituyentes estabilizantes unidos al núcleo de aceno ha permitido la preparación y caracterización de derivados relativamente estables de acenos superiores hasta el nonaceno, la preparación de los hidrocarburos no estabilizados estaba hasta hace poco limitada a la fotodescarbonilación de los correspondientes precursores con grupos carbonilos puente, la cual presenta limitaciones para llevar a cabo el estudio exhaustivo de las propiedades electrónicas de dichos compuestos. Sin embargo, a lo largo del último año el desarrollo de la química sobre superficies metálicas ha permitido la preparación y el estudio detallado de las propiedades de los acenos superiores hasta el decaceno, abriendo así amplias perspectivas para un mayor entendimiento de las propiedades de esta extraordinaria familia de hidrocarburos policíclicos aromáticos.

AGRADECIMIENTOS

La autora desea expresar su agradecimiento a su mentor y director de tesis doctoral, el profesor Antonio M. Echavarrén, así como a su actual supervisor el profesor Ben L. Feringa. Asimismo, quisiera también agradecer el apoyo económico recibido por parte de la Fundación Ramón Areces (Beca Postdoctoral Ciencias de la Vida y de la Materia 2017).

BIBLIOGRAFÍA

- [1] a) M. Bendikov, F. Wudl, D. F. Perepichka, *Chem. Rev.* **2004**, *104*, 4891-4946. b) J. E. Anthony, *Chem. Rev.* **2006**, *106*, 5028-5048. c) J. E. Anthony, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 452-483. d) Z. Sun, Q. Ye, C. Chi, J. Wu, *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 7857-7889.
- [2] a) C. Wang, H. Dong, W. Hu, Y. Liu, D. Zhu, *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 2208-2267. b) S. Allard, M. Forster, B. Souharce, H. Thiem, U. Scherf, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 4070-4098.
- [3] a) S. A. Odom, S. R. Parkin, J. E. Anthony, *Org. Lett.* **2003**, *5*, 4245-4248. b) M. A. Wolak, B.-B. Jang, L. C. Palilis, Z. H. Kafafi, *J. Phys. Chem. B* **2004**, *108*, 5492-5499.
- [4] a) S. Yoo, B. Domercq, B. Kippelen, *Appl. Phys. Lett.* **2004**, *85*, 5427-5429. b) A. K. Pandey, J.-M. Nunzi, *Appl. Phys. Lett.* **2006**, *89*, 213506. c) J. Roncali, P. Leriche, P. Blanchard, *Adv. Mater.* **2014**, *26*, 3821-3838.
- [5] C. D. Dimitrakopoulos, A. R. Brown, A. Pomp, *J. Appl. Phys.* **1996**, *80*, 2501-2508.
- [6] a) K. B. Wiberg, *J. Org. Chem.* **1997**, *62*, 5720-5727. b) K. N. Houk, P. S. Lee, M. Nendel, *J. Org. Chem.* **2001**, *66*, 5517-5521.
- [7] a) S.-H. Chien, M.-F. Cheng, K.-C. Lau, W.-K. Li, *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109*, 7509-7518. b) A. R. Reddy, M. Bendikov, *Chem. Commun.* **2006**, 1179-1181. c) J.-M. Aubry, C. Pierlot, J. Rigaudy, R. Schmidt, *Acc. Chem. Res.* **2003**, *36*, 668-675. d) W. Fudicikar, T. Linker, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 15071-15082.
- [8] S. S. Zade, N. Zamoshchik, A. R. Reddy, G. Fridman-Marueli, D. Sheberla, M. Bendikov, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 10803-10816.
- [9] E. Clar, *The Aromatic Sextet*; J. Wiley, London, **1972**.
- [10] M. Huzak, M. S. Deleuze, B. Hajgató, *J. Chem. Phys.* **2011**, *135*, 104704.
- [11] H. F. Bettinger, *Pure Appl. Chem.* **2010**, *82*, 905-915.
- [12] a) C. Marschalk, *Bull. Soc. Chim. Fr.* **1939**, *6*, 1112-1121. b) E. Clar, *Ber. Dtsch. Chem. Ges. B* **1939**, *72*, 1817-1821.
- [13] a) X. Shi, C. Chi, *Chem. Rec.* **2016**, *16*, 1690-1700. b) K. J. Thorley, J. E. Anthony, *Isr. J. Chem.* **2014**, *54*, 642-649.
- [14] a) U. H. F. Bunz, J. U. Engelhart, B. D. Lindner, M. Schafroth, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 3810-3821. b) U. H. F. Bunz, *Acc. Chem. Res.* **2015**, *48*, 1676-1686. c) Q. Miao, *Adv. Mater.* **2014**, *26*, 5541-5549. d) W. Jiang, Y. Li, Z. Wang, *Chem. Soc. Rev.* **2013**, *42*, 6113-6127.
- [15] a) H. F. Bettinger, C. Tönshoff, *Chem. Rec.* **2015**, *15*, 364-369. b) C. Tönshoff, H. F. Bettinger, *Top. Curr. Chem.* **2014**, *349*, 1-30. c) Q. Ye, C. Chi, *Chem. Mater.* **2014**, *26*, 4046-4056. d) J. Li, Q. Zhang, *Synlett* **2013**, *24*, 686-696. e) S. S. Zade, M. Ben-

- dikov, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, *49*, 4012-4015. f) R. Dorel, A. M. Echavarren, *Eur. J. Org. Chem.* **2017**, 14-24.
- [16] M. Watanabe, K.-Y. Chen, Y. J. Chang, T. J. Chow, *Acc. Chem. Res.* **2013**, *46*, 1606-1615.
- [17] A. R. Brown, A. Pomp, D. M. de Leeuw, D. B. M. Klaassen, E. E. Havinga, P. Herwig, K. Müllen, *J. Appl. Phys.* **1996**, *79*, 2136-2138.
- [18] P. T. Herwig, K. Müllen, *Adv. Mater.* **1999**, *11*, 480-483.
- [19] a) K. P. Weidkamp, A. Afzali, R. M. Tromp, R. J. Hamers, *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 12740-12741. b) A. Afzali, C. R. Kagan, G. P. Traub, *Synth. Met.* **2005**, *155*, 490-494.
- [20] T.-H. Chao, M.-J. Chang, M. Watanabe, M.-H. Luo, Y. J. Chang, T.-C. Fang, K.-Y. Chen, T. J. Chow, *Chem. Commun.* **2012**, *48*, 6148-6150.
- [21] M. Watanabe, W.-T. Su, K.-Y. Chen, C.-T. Chien, T.-H. Chao, Y. J. Chang, S.-W. Liu, T. J. Chow, *Chem. Commun.* **2013**, *49*, 2240-2242.
- [22] O. D. Jurchescu, J. Baas, T. T. M. Palstra, *Appl. Phys. Lett.* **2004**, *84*, 3061-3063.
- [23] K.-Y. Chen, H.-H. Hsieh, C.-C. Wu, J.-J. Hwang, T. J. Chow, *Chem. Commun.* **2007**, 1065-1067.
- [24] H.-H. Huang, H.-H. Hsieh, C.-C. Wu, C.-C. Lin, P.-T. Chou, T.-H. Chuang, Y.-S. Wen, T. J. Chow, *Tetrahedron Lett.* **2008**, *49*, 4494-4497.
- [25] a) M. Watanabe, Y. J. Chang, S.-W. Liu, T.-H. Chao, K. Goto, M. M. Islam, C.-H. Yuan, Y.-T. Tao, T. Shinmyozu, T. J. Chow, *Nat. Chem.* **2012**, *4*, 574-578. b) T. J. Chow, *Chem. Rec.* **2015**, *15*, 1137-1139.
- [26] R. Mondal, E. M. Adhikari, B. K. Shah, D. C. Neckers, *Org. Lett.* **2007**, *9*, 2505-2508.
- [27] M. Suzuki, T. Aotake, Y. Yamaguchi, N. Noguchi, H. Nakano, K.-i. Nakayama, H. Yamada, *J. Photochem. Photobiol. C Photochem. Rev.* **2014**, *18*, 50-70.
- [28] a) H. Uno, Y. Yamashita, M. Kikuchi, H. Watanabe, H. Yamada, T. Okujima, T. Ogawa, N. Ono, *Tetrahedron Lett.* **2005**, *46*, 1981-1983. b) H. Yamada, Y. Yamashita, M. Kikuchi, H. Watanabe, T. Okujima, H. Uno, T. Ogawa, K. Ohara, N. Ono, *Chem. Eur. J.* **2005**, *11*, 6212-6220.
- [29] a) Y. Zhao, R. Mondal, D. C. Neckers, *J. Org. Chem.* **2008**, *73*, 5506-5513. b) S. Katsuta, H. Yamada, T. Okujima, H. Uno, *Tetrahedron Lett.* **2010**, 1397-1400. c) C. Tönshoff, H. F. Bettinger, *Chem. Eur. J.* **2012**, *18*, 1789-1799. d) B. Pal, B.-C. Lin, M. V. Carreon dela Cerna, C.-P. Hsu, C.-H. Lin, *J. Org. Chem.* **2016**, *81*, 6223-6234.
- [30] T.-H. Chuang, H.-H. Hsieh, C.-K. Chen, C.-C. Wu, C.-C. Lin, P.-T. Chou, T.-H. Chao, T. J. Chow, *Org. Lett.* **2008**, *10*, 2869-2872.
- [31] a) E. Clar, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **1942**, *75B*, 1330-1338. b) W. J. Bailey, C.-W. Liao, *J. Am. Chem. Soc.* **1955**, *77*, 992-993.
- [32] R. Mondal, B. K. Shah, D. C. Neckers, *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 9612-9613.
- [33] C. Tönshoff, H. F. Bettinger, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, *49*, 4125-4128.
- [34] a) C. F. H. Allen, A. Bell, *J. Am. Chem. Soc.* **1942**, *64*, 1253-1260. b) D. R. Maulding, B. G. Roberts, *J. Org. Chem.* **1969**, *34*, 1734-1736. c) P. J. Hanhela, D. B. Paul, *Aust. J. Chem.* **1981**, *34*, 1701-1717.
- [35] J. E. Anthony, J. S. Brooks, D. L. Eaton, S. R. Parkin, *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 9482-9483.
- [36] Para una selección de ejemplos, ver: a) J. E. Anthony, D. L. Eaton, S. R. Parkin, *Org. Lett.* **2002**, *4*, 15-18. b) J. Guo, D. Liu, J. Zhang, J. Zhang, Q. Miao, Z. Xie, *Chem. Commun.* **2015**, *51*, 12004-12007. c) H. G. Kim, H. H. Choi, E. Song, K. Cho, E.-J. Choi, *RSC Adv.* **2015**, *5*, 8070-8076. d) Y. Shu, Y.-F. Lim, Z. Li, B. Purushothaman, R. Hallani, J. E. Kim, S. R. Parkin, G. G. Malliaras, J. E. Anthony, *Chem. Sci.* **2011**, *2*, 363-368.
- [37] Para una selección de ejemplos, ver: a) S. H. Etschel, A. R. Waterloo, J. T. Margraf, A. Y. Amin, F. Hampel, C. M. Jäger, T. Clark, M. Halik, R. R. Tykwinski, *Chem. Commun.* **2013**, *49*, 6725-6727. b) J. Schwaben, N. Münster, M. Klues, T. Breuer, P. Hofmann, K. Harms, G. Witte, U. Koert, *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 13758-13771. c) E. T. Chernick, R. Casillas, J. Zirzmeier, D. M. Gardner, M. Gruber, H. Kropp, K. Meyer, M. R. Wasielewski, D. M. Guldi, R. R. Tykwinski, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 857-863.
- [38] Para una selección de ejemplos, ver: a) S. H. Chan, H. K. Lee, Y. M. Wang, N. Y. Fu, X. M. Chen, Z. W. Cai, H. N. C. Wong, *Chem. Commun.* **2005**, 66-68. b) J. E. Anthony, J. Gierschner, C. A. Landis, S. R. Parkin, J. B. Sherman, R. C. Bakus, II, *Chem. Commun.* **2007**, 4746-4748. c) D. Matsumura, K. Kitazawa, S. Terai, T. Kochi, Y. Ie, M. Nitani, Y. Aso, F. Kakiuchi, *Org. Lett.* **2012**, *14*, 3882-3885.
- [39] C. Pramanik, G. P. Miller, *Molecules* **2012**, *17*, 4625-4633.
- [40] M. M. Payne, S. R. Parkin, J. E. Anthony, *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 8028-8029.
- [41] B. Purushothaman, S. R. Parkin, J. E. Anthony, *Org. Lett.* **2010**, *12*, 2060-2063.
- [42] a) D. Chun, Y. Cheng, F. Wudl, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 8380-8385. b) H. Qu, C. Chi, *Org. Lett.* **2010**, *12*, 3360-3363.
- [43] I. Kaur, W. Jia, R. P. Kopreski, S. Selvarasah, M. R. Dokmeci, C. Pramanik, N. E. McGruer, G. P. Miller, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 16274-16286.
- [44] I. Kaur, N. N. Stein, R. P. Kopreski, G. P. Miller, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 3424-3425.
- [45] a) S. Coffey, S. Boyd, *J. Chem. Soc.* **1954**, 2468-2470. b) V. Bruckner, A. Karczaga, K. Körmendy, M. Meszaros, J. Tomasz, *Tetrahedron Lett.* **1960**, *1*, 5-6.
- [46] R. Einholz, T. Fang, R. Berger, O. Grüninger, A. Früh, T. Chasé, R. F. Fink, H. F. Bettinger, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 4435-4442.
- [47] I. Kaur, M. Jazdzzyk, N. N. Stein, P. Prusevich, G. P. Miller, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 1261-1263.
- [48] B. Purushothaman, M. Bruzek, S. R. Parkin, A.-F. Miller, J. E. Anthony, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 7013-7017.
- [49] a) S.-W. Hla, L. Bartels, G. Meyer, H.-K. Rieder, *Phys. Rev. Lett.* **2000**, *85*, 2777-2780. b) N. Pavliček, B. Schuler, S. Collazos, N. Moll, D. Perez, E. Guitian, G. Meyer, D. Peña, L. Gross, *Nat. Chem.* **2015**, *7*, 623-628. c) N. Pavliček, L. Gross, *Nat. Rev. Chem.* **2017**, *1*, 0005.
- [50] a) N. Pavliček, A. Mistry, Z. Majzik, N. Moll, G. Meyer, D. J. Fox, L. Gross, *Nat. Nanotech.* **2017**, *12*, 308-311. b) B. Schuler, S. Fatayer, F. Mohn, N. Moll, N. Pavliček, G. Meyer, D. Peña, L. Gross, *Nat. Chem.* **2016**, *8*, 220-224.

- [51] L. E. Dinca, C. Fu, J. M. MacLeod, J. Lipton-Duffin, J. L. Brusso, C. E. Szkacs, D. Ma, D. F. Perepichka, F. Rosei, *ACS Nano* **2013**, *7*, 1652-1657.
- [52] J. Krüger, N. Pavliček, J. M. Alonso, D. Pérez, E. Guitián, T. Lehmann, G. Cuniberti, A. Groudou, G. Meyer, L. Gross, F. Moresco, D. Peña, *ACS Nano* **2016**, *10*, 4538-4542.
- [53] J. Krüger, F. Eisenhut, J. M. Alonso, T. Lehmann, E. Guitián, D. Pérez, D. Skidin, F. Gamaleja, D. A. Ryndyk, C. Joachim, D. Peña, F. Moresco, G. Cuniberti, *Chem. Commun.* **2017**, *53*, 1583-1586.
- [54] J. Krüger, F. García, F. Eisenhut, D. Skidin, J. M. Alonso, E. Guitián, D. Pérez, G. Cuniberti, F. Moresco, D. Peña, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 11945-11948.
- [55] M. Zugermeier, M. Gruber, M. Schmid, B. P. Klein, L. Ruppenthal, P. Müller, R. Einholz, W. Hieringer, R. Berndt, H. F. Bettinger, J. M. Gottfried, *Nanoscale* **2017**, *9*, 12461-12469.
- [56] J. I. Urgel, H. Hayashi, Di M. Giovannantonio, C. A. Pignedoli, S. Mishra, O. Deniz, M. Yamashita, T. Dienel, P. Ruffieux, H. Yamada, R. Fasel, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 11658-11661.
- [57] A. J. Athans, J. B. Briggs, W. Jia, G. P. Miller, *J. Mater. Chem.* **2007**, *17*, 2636-2641.
- [58] R. Dorel, P. R. McGonigal, A. M. Echavarren, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 11120-11123.
- [59] R. Zuzak, R. Dorel, M. Krawiec, B. Such, M. Kolmer, M. Szymonski, A. M. Echavarren, S. Godlewski, *ACS Nano* **2017**, *11*, 9321-9329.

**Prospects in
Chemical
Sciences II**

**Celebrating Luis Castedo's
80th Birthday**

**Nov
30th
2018**

Mezclas eutécticas como alternativa sostenible a los disolventes convencionales en Química Orgánica

Diego A. Alonso, Alejandro Baeza, Rafael Chinchilla, Cecilia Gómez, Gabriela Guillena, Xavier Marse, Isidro M. Pastor, Diego J. Ramón, Diego Ros Níguez y Beatriz Saavedra

Resumen: Este artículo muestra propiedades, características y usos en síntesis orgánica de las mezclas eutécticas de bajo punto de fusión. Estos sistemas están atrayendo gran atención como sustitutivos medioambientalmente sostenibles de los disolventes orgánicos convencionales debido a su baja toxicidad, alta biodegradabilidad y escasa huella ecológica.

Palabras clave: Mezclas eutécticas, disolventes, síntesis orgánica, reutilización, Química Verde.

Abstract: This article shows properties, characteristics and uses in organic synthesis of low-melting eutectic mixtures. These systems are attracting high interest as environmentally sustainable substitutes of conventional organic solvents, due to their low toxicity, high biodegradability and low ecological print.

Keywords: Eutectic mixtures, solvents, organic synthesis, reuse, Green Chemistry.

INTRODUCCIÓN

La gran mayoría de las crisis económicas han ido acompañadas por un innegable cambio del modelo productivo, aunque unas veces hayan sido provocadas por el sistema financiero y otras, por la obsolescencia del modelo de producción. En este sentido, la crisis del 73, o crisis del petróleo, puso sobre la mesa un aspecto de la economía que, desde la Revolución Industrial, no se había tenido muy en cuenta: la finitud de las materias primas y, por lo tanto, del modelo de producción que lo sustentaba. Además, a mediados de los años 80, el mundo científico llamó la atención a la sociedad sobre diferentes aspectos perniciosos de nuestro sistema productivo. De hecho, tras la Cumbre del Milenio de los líderes mundiales en la sede de las Naciones Unidas, la Asamblea General aprobó la Declaración del Mi-

lenio. En ella, se establecieron unas orientaciones para la implementación de unos valores fundamentales esenciales para las relaciones internacionales en el siglo XXI, a través de ocho capítulos y objetivos clave, entre los que destacamos el cuarto objetivo que lleva por título: “Protección de nuestro medio ambiente común”.^[1a] Cinco años después, la Asamblea General de la ONU identificó los principios y guías sobre el desarrollo sostenible, incluido el desarrollo económico y social, así como la protección del medio ambiente.^[1b]

Los químicos, incluso antes de estas declaraciones solemnes, ya habían comenzado a buscar y proponer soluciones, en su campo, al problema de la sostenibilidad, como pueden ser el empleo y reciclado de catalizadores o el diseño de reacciones que no generen subproductos, entre otras posibilidades. Sin embargo, el problema del disolvente sigue en primer plano.

Los disolventes son ubicuos en todos los aspectos de la industria química, y se pueden encontrar desde el tratamiento de limpieza de equipamientos, hasta en las pinturas, pasando por los adhesivos, revestimientos, tratamientos de materias primas, y por supuesto como medios de reacción. En 2007 se estimó la demanda mundial en torno a los 20 millones de toneladas, mientras que 5 años después ésta fue de 28 millones de toneladas, y se esperan tasas de crecimiento anuales incluso superiores hasta al menos la década de los años 30. Por poner un ejemplo en la industria química de alto valor añadido y social, como puede ser la farmacéutica, se ha evaluado que el disolvente constituye entre el 80 y el 90% de la masa no acuosa, usada para fabricar cualquier principio activo (API).^[2] Por lo que la correcta elección del disolvente puede ser el factor más importante para conseguir que un proceso químico sea sostenible.



De izquierda a derecha, fila superior: D. A. Alonso, A. Baeza, R. Chinchilla, C. Gómez, G. Guillena, X. Marse; fila inferior: I. M. Pastor, D. J. Ramón, D. R. Níguez, B. Saavedra

Universidad de Alicante. Departamento de Química Orgánica e Instituto de Síntesis Orgánica, 03690 San Vicente del Raspeig (Alicante)
C-e: diego.alonso@ua.es – alex.baeza@ua.es – chinchilla@ua.es
cgomez@ua.es – gabriela.guillena@ua.es – ipastor@ua.es
djramon@ua.es

Recibido: 09/01/2018. Aceptado: 05/03/2018.

DISOLVENTES ALTERNATIVOS

Los disolventes típicos, como pueden ser tolueno, clorofórmico, dimetilsulfóxido, hexano, etc., provienen todos del petróleo, por lo que su uso en un futuro es insostenible. Todos ellos son volátiles (y se van acumulando en la atmósfera), son inflamables, en muchos casos son tóxicos y/o no biodegradables, por lo que el impacto medioambiental, tanto inmediato como a largo plazo, es muy negativo. Y, por otra parte, la huella de carbono de estos disolventes comunes volátiles (o *Volatile Organic Compounds* en terminología inglesa; VOCs) es enorme, si tenemos en cuenta tanto su proceso de fabricación, reciclado y destrucción final.^[3a] Por lo tanto, la necesidad de utilizar nuevos disolventes sostenibles es una prioridad en la industria, y lo debería ser en la academia. En teoría, un disolvente ideal debe ser seguro, tanto para los seres humanos como para el medio ambiente, siendo su uso y obtención también sostenible.^[3b]

Dentro de este marco referencial, diferentes disolventes se han introducido como alternativa a los VOCs. Aunque alguno de estos disolventes neotéricos se está utilizando de forma industrial para algún proceso, todos ellos presentan ciertas ventajas o inconvenientes a la hora de ser usados como medios comunes para llevar a cabo reacciones en el campo de la Química Orgánica.

El agua podría ser considerada como el disolvente ideal, dado su precio, toxicidad, inflamabilidad y su impacto medioambiental.^[4] Pero sus limitaciones en cuanto a la solubilidad de los compuestos orgánicos, su nucleofilia, así como su difícil y cara purificación cuando está contaminada por compuestos orgánicos ha hecho que su utilización sea limitada.

Aunque los fluidos supercríticos, sobre todo dióxido de carbono,^[5] se están utilizando en estos momentos en la industria agroalimentaria, su utilización de forma general está muy limitada por el alto coste del equipamiento necesario, la baja solubilidad de los reactivos orgánicos y la alta reactividad de las moléculas que forman este fluido.

Los disolventes fluorados^[6] también han sido propuestos como alternativa, pero su elevado precio y su persistencia en la atmósfera hace que su expansión sea muy reducida.

Otra posibilidad es el uso de los llamados líquidos iónicos. Compuestos orgánicos formados generalmente por un catión de amonio, como puede ser de imidazolio o de piridinio, y un anión con una baja nucleofilia. En un principio se creyó que estos disolventes eran los ideales, ya que son térmicamente muy estables, tienen una presión de vapor casi nula, no son inflamables, son inmiscibles con muchos disolventes orgánicos típicos y, lo más importante, sus propiedades se pueden modular de forma racional en función de su síntesis.^[7] Sin embargo, frente a todas estas virtudes, han ido apareciendo diferentes inconvenientes, como pueden ser su alto precio, estabilidad frente al agua, toxicidad intrínseca, baja biodegradabilidad,^[8] e ineficiencia en su síntesis (usando disolventes orgánicos, reactivos derivados del petróleo y generando muchos residuos). Todo esto ha llevado a dejar de con-

siderar a los líquidos iónicos como posibles disolventes sostenibles.

Algunos compuestos derivados de la biomasa, como pueden ser etanol, limoneno, lactato de etilo,^[9] glicerol,^[10] ó 2-metiltetrahidrofurano^[11] se han propuesto como alternativa, pero siguen presentando ciertos problemas de inflamabilidad, presión de vapor alta y, sobre todo, de falta de posible modulación de sus propiedades para que puedan ser una alternativa general a los disolventes clásicos.

MEZCLAS EUTÉCTICAS

Las mezclas eutécticas de bajo punto de fusión [en terminología inglesa *Deep Eutectic Solvents* (DES)] donde podrían incluirse los sistemas que presentan una transición vítrea [conocidas en inglés como *Low Melting Mixtures* (LMM) o *Low Transition Temperature Mixtures* (LTTM)] se obtienen al calentar dos o más sólidos inmiscibles en una proporción determinada que sufren un cambio de fase sólido-líquido a una temperatura determinada, llamada punto eutéctico, comportándose a estos efectos como si fuese un líquido puro (Figura 1).

Aunque las mezclas eutécticas eran muy conocidas,^[12] al igual que la inusual reactividad encontrada cerca del punto eutéctico,^[13] no fue hasta el principio de este siglo cuando comenzaron a ser consideradas como posibles medios de reacción.^[14]

Existen cuatro tipos distintos de DES, clasificados en base a su propiedades y composición.^[15] Los DES del tipo I, contienen una sal de amonio cuaternaria y un haluro metálico. Debido al uso de haluros metálicos anhidros para su preparación, son generalmente más caros y tóxicos comparados con otros tipos de DES, siendo la causa de que no sean utilizados como disolventes respetuosos con el medio ambiente. Los DES del tipo II son parecidos

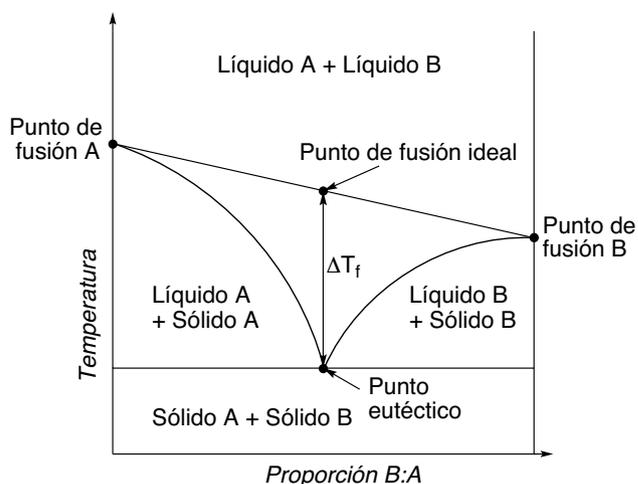


Figura 1. Diagrama de fase para una mezcla eutéctica (DES)

a los del tipo I, pero tienen en su estructura haluros metálicos hidratados, lo que los hacen más baratos, generando una amplia variedad de mezclas eutécticas a baja temperatura. Los DES del tipo III son los más importantes, desde el punto de vista químico orgánico, debido a su facilidad de preparación y a su potencial uso como disolventes sostenibles. Están formados, generalmente, por una sal de amonio cuaternaria que interactúa con compuestos que tienen carácter dador de hidrógeno. Los DES del tipo IV se forman combinando un haluro metálico con un ácido de Lewis o de Brønsted.

Los líquidos eutécticos del tipo III son obtenidos generalmente al mezclar un compuesto con carácter aceptor de enlaces de hidrógeno (HBA), típicamente una sal con alto punto de fusión, como el cloruro de colina (ChCl), con una sustancia que actúe como dadora de enlaces de hidrógeno (HBD). La adición de esta última a la sal hace que se establezcan enlaces de hidrógeno entre los dos componentes de manera que la carga del anión de la sal se deslocaliza, disminuyendo la fuerza del enlace iónico entre el catión y el anión de la sal y, por tanto, la energía de la red cristalina hasta distorsionarla totalmente. Esta disrupción de la estructura cristalina (Figura 2) da lugar a una disminución del punto de fusión de la mezcla. La nueva estructura formada está constituida por una red extensa de enlaces de hidrógeno entre los componentes, en donde existen huecos o agujeros. Esta estructura está menos ordenada y su densidad disminuye.

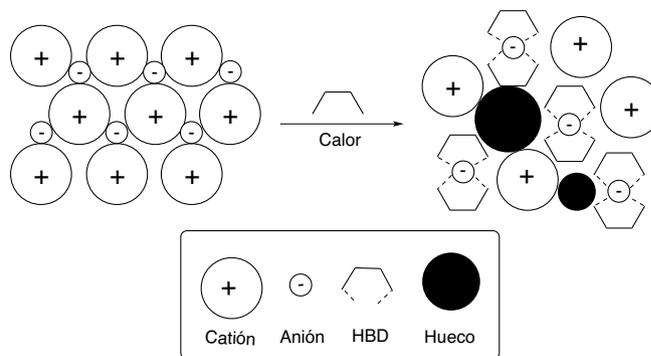


Figura 2. Estructura general para una mezcla eutéctica (DES)

Cuanto más fuerte es la interacción entre los componentes, mayor es la depresión del punto de fusión (Tabla 1). Por ejemplo, en la relina, el primer DES usado en síntesis formado por la combinación de cloruro de colina (P.f. 302 °C) y urea (P.f. 134 °C) en una proporción 1:2, la interacción es tan fuerte que el punto de fusión en el eutéctico es de 12 °C, lo que supone una disminución de 122 °C respecto al ideal (Figura 1).

Algunas de estas mezclas no presentan un verdadero punto eutéctico (similar a un punto de fusión), sino que presentan una zona similar a la zona de transición vítrea, por lo que hay autores que prefieren utilizar otras terminologías como mezclas de bajo punto de fusión^[16] o de bajo punto de transición.^[17]

Tabla 1. Propiedades físicas y de biodegradación de algunos DES

DES	Proporción[a]	T (°C)[b]	Densidad (g/cm ³)[c]	Viscosidad (cP)	Conductividad (mS/cm)	Biodegradabilidad (%) [d]	Preparación T (°C)[e]
ChCl-Urea (relina)	1:2	12	1.25	750 (25 °C)	0.199 (40 °C)	97.1	75
ChCl-Glicerol	1:2	-40	1.18	376 (20 °C)	1.05 (20°C)	95.9	100
ChCl-Glucosa	1:2	14	1.21 (85 °C)	8045.1 (25°C)	-	82.0	80
ChCl-Ácido malónico	1:2	10	1.25	1124 (25°C)	0.36	76.3	100
ChCl-Ácido tartárico	1:2	47	1.27 (30 °C)	66441 (30 °C)	0.014 (30 °C)	84.6	100
ChCl-Ácido cítrico	1:2	69	1.33 (30°C)	289 (75 °C)	0.018 (30 °C)	81.6	100
ChCl- <i>p</i> -TsOH	1:1	27	1.21 (30 °C)	183 (30 °C)	0.04 (30 °C)	80.4	120
L-Prolina-Ácido oxálico	1:1	-14.5	1.35	12000 (27 °C)	-	-	80

[a] Relación molar. [b] Punto de fusión o de transición vítrea. [c] Medida a 25 °C. [d] 28 días, siguiendo el test^{20b} de la botella cerrada. [e] Los DES fueron preparados por simple mezcla de ambos componentes en la proporción adecuada y calentados a la temperatura indicada hasta la formación de una fase homogénea, sin necesidad de purificación o cualquier otro paso.

La toxicidad de estas mezclas eutécticas, sobre todo de aquellas que provienen de fuentes naturales^[18] es inexistente o prácticamente nula,^[19] mientras que su biodegradabilidad es extraordinariamente alta^[20] (Tabla 1).

La formación de cualquier DES, a partir de sus componentes es extraordinariamente sencilla, no genera ningún tipo de subproducto y no necesita ninguna etapa de purificación, por lo que su huella ecológica es idónea. Además, la alta solubilidad en agua de los componentes del DES hace que la adición de esta genere una nueva capa orgánica líquida con solo los productos orgánicos, precipitando estos en algunos casos, por lo que el tratamiento final de las reacciones llevadas a cabo en DES es muy simple y económico.

La polaridad de estos disolventes va desde valores semejantes al cloroformo (4, incluso inferior, con la incorporación de nuevos DES fuertemente lipofílicos^[21a]), a superiores a los valores del agua (80), por lo que la solubilidad tanto de los compuestos orgánicos como los inorgánicos es relativamente fácil.^[21b] Además, la formación de microemulsiones, de forma directa^[22] o por la presencia de tensioactivos,^[23] aumenta la solubilidad parcial de cualquier reactivo.

A pesar de todas las ventajas, las mezclas eutécticas también poseen algunos inconvenientes, siendo el mayor de ellos su alta densidad y viscosidad,^[24] lo que puede devenir en un importante problema sobre todo a escala industrial o en su aplicación en química de flujo continuo (Tabla 1). Sin embargo, este problema comienza a ser solucionado con la adición de un tercer componente, como puede ser agua, ácidos carboxílicos, haluros, y la generación de mezclas ternarias eutécticas.^[25]

Estas cualidades han hecho que las mezclas eutécticas^[26] sean el disolvente ideal para muchas aplicaciones, como puede ser en biotecnología,^[27] química analítica,^[28] reacciones de polimerización,^[29] procesos de extracción y separación,^[30] nanotecnología,^[31] o valorización de biomasa.^[32] Incluso, comenzamos a tener evidencias de que el mecanismo para sobrevivir de ciertas células a temperaturas extremas,^[33] así como el metabolismo y biosíntesis de moléculas fuertemente lipofílicas,^[34] tiene lugar en este tipo de disolventes eutécticos. Particularmente interesante y actual es el uso de estos sistemas como disolventes en síntesis orgánica, una disciplina en la que el disolvente siempre juega un papel crucial desde el punto de vista del impacto medioambiental cuando se pretende escalar los procesos a nivel industrial.

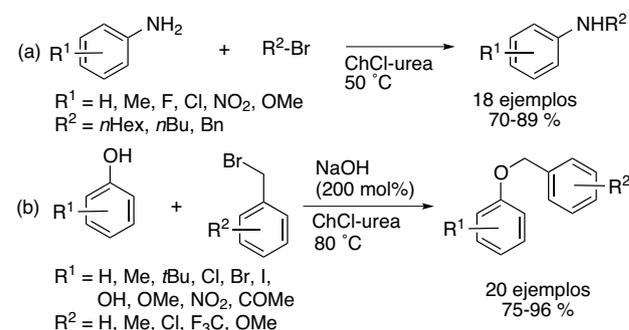
SÍNTESIS ORGÁNICA USANDO MEZCLAS EUTÉCTICAS

Un DES en síntesis orgánica puede ser usado exclusivamente como medio de reacción, actuando como un mero espectador del proceso, si bien puede jugar también un papel catalizando el mismo. Ello se debe a que el DES puede contener ácidos o bases, especies que actúan como catalizadores en muchas reacciones. Frecuentemente es difícil de asegurar que el DES es un disolvente totalmente "inocuo" en un proceso y no interviene de forma efectiva en el mecanismo de la misma, activando los sustratos. El uso de

DES en procesos sintéticos químico-orgánicos está siendo cada vez más frecuente a la vista de su potencial como sustitutos medioambientalmente ventajosos de los VOCs.^[35] En lo que sigue, mostraremos algunos ejemplos del uso de DES en diversos procesos sintéticos que puedan ilustrar el potencial de estas mezclas eutécticas en la preparación de compuestos de interés.

Reacciones de alquilación

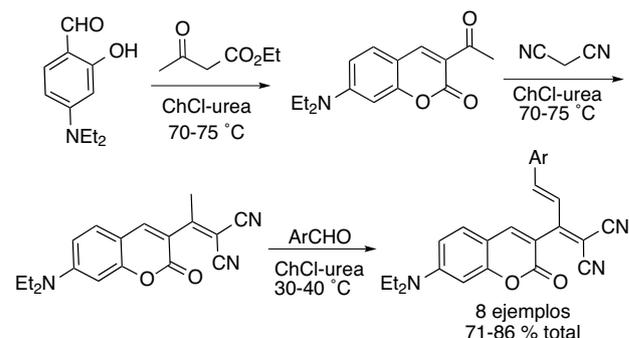
Han podido mono-*N*-alquilarse aminas aromáticas con bromuros de alquilo usando ChCl-urea como DES y sin necesitar el uso de bases fuertes [ecuación (a) en Esquema 1].^[36] El DES se recupera mediante una simple extracción con acetato de etilo y el proceso ha podido ser repetido en cinco ciclos sucesivos de reacción, observando solo un ligero descenso del rendimiento tras el cuarto. Este mismo DES se ha usado en la *O*-bencilación de fenoles usando NaOH como base [ecuación (b) en Esquema 3],^[37] pudiendo ser recuperado como en el caso anterior y siendo reutilizado con resultados similares.



Esquema 1. Reacciones de alquilación de aminas y fenoles

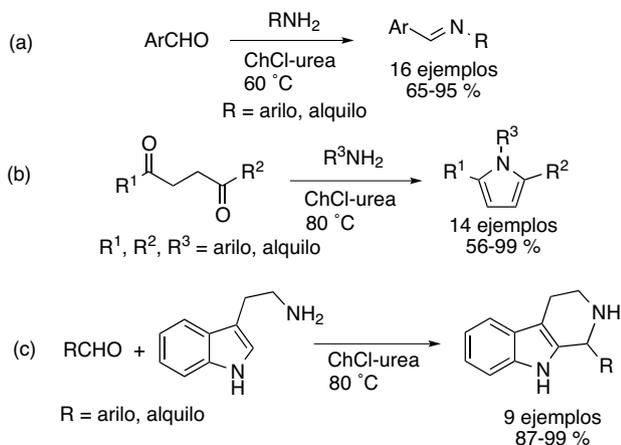
Reacciones de condensación

Interesantes reacciones de condensación en DES han sido desarrolladas en los últimos años. Por ejemplo, el proceso "one-pot" mostrado en el Esquema 2, donde una doble condensación de Knoevenagel en ChCl-urea, seguida por una condensación aldólica da lugar, con elevados rendimientos, a derivados de cumarinas utilizables como tintes.^[38]



Esquema 2. Síntesis de cumarinas mediante reacciones de Knoevenagel

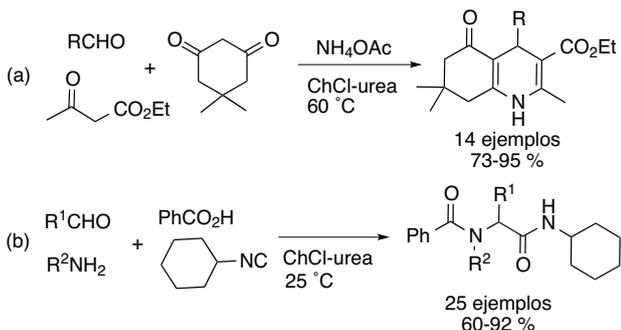
Este mismo DES ha sido utilizado en la síntesis de iminas por condensación de aldehídos con aminas primarias, con excelentes rendimientos [ecuación (a) en Esquema 3],^[39] así como en la síntesis de Paal-Knorr en ausencia de ácido entre 1,4-dicetonas y aminas para dar pirroles pudiendo reusar el DES hasta en cinco ocasiones [ecuación (b) en Esquema 3],^[40] o también en la reacción de Pictet-Spengler entre triptamina y aldehídos para dar tetrahidrocarbolinas, siendo esta vez reusando el DES hasta cuatro veces [ecuación (c) en Esquema 3].^[41]



Esquema 3. Reacciones de condensación mediante iminas

Reacciones multicomponente

En este tipo de reacciones, tres o más productos de partida reaccionan entre sí para dar el producto final, normalmente con gran economía atómica. Los DES se han utilizado como medios de reacción sostenible en estos procesos, particularmente aquellos formados por ChCl. Un ejemplo del uso de estas mezclas eutécticas en este tipo de procesos es la síntesis de derivados de 1,4-dihidropiridina por reacción de aldehídos, acetato de etilo y 5,5-dimetilciclohexano-1,3-diona [ecuación (a) en Esquema 4].^[42] Los productos finales se obtuvieron en solo pocos minutos y el DES pudo reutilizarse hasta cinco veces. Otro ejemplo de proceso multicomponente es la reacción de Ugi entre cuatro componentes llevada a cabo en el DES anterior [ecuación

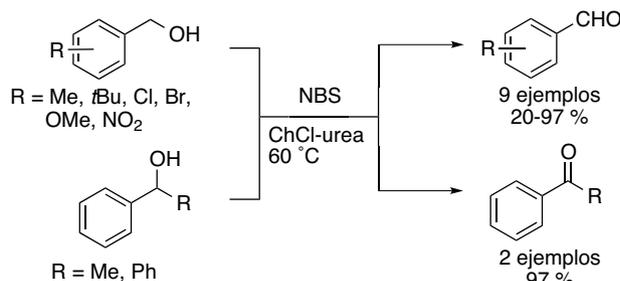


Esquema 4. Reacciones multicomponente en DES

(b) en Esquema 4], dando lugar a las diamidas finales con rendimientos mucho más altos que usando VOCs como disolventes.^[43] El DES pudo utilizarse en tres ciclos de reacción sin merma de actividad.

Reacciones redox

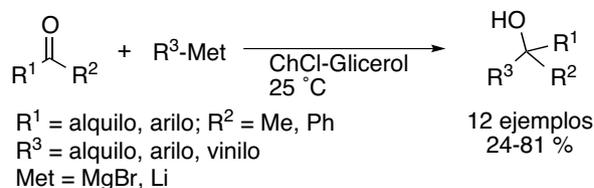
Los alcoholes bencílicos primarios pueden oxidarse a los aldehídos correspondientes utilizando *N*-bromosuccinimida (NBS) como oxidante en DES (Esquema 5), no observándose sobreoxidación incluso cuando se usa un exceso de NBS.^[44] Los correspondientes alcoholes secundarios dan lugar a fenonas, y resulta interesante destacar que, con ambos alcoholes, si se reemplaza el DES por un disolvente convencional, el rendimiento obtenido disminuye considerablemente. Por otra parte, también hay ejemplos de reducciones usando mezclas eutécticas, como la reducción de aldehídos a alcoholes usando borohidruro de sodio, en ChCl-urea a temperatura ambiente.^[45]



Esquema 5. Oxidación de alcoholes en DES

Reacciones con compuestos organometálicos

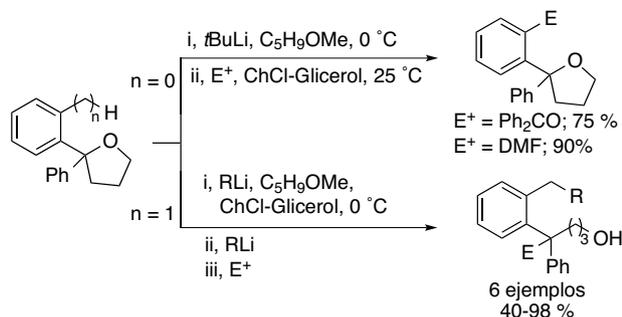
Por el momento, no existen demasiados ejemplos de este tipo de reacciones en mezclas eutécticas, si bien algunos de los existentes resultan muy interesantes. Por ejemplo, la adición de compuestos organolíticos y reactivos de Grignard a cetonas, usando ChCl-Glicerol como disolvente, permite llevar a cabo el proceso en presencia de aire (Esquema 6).^[46a] Asimismo, se ha descrito la adición de organolíticos a iminas en DES.^[46b]



Esquema 6. Adición de organometálicos a cetonas en DES

También se ha llevado a cabo en el DES anterior la litiaación regioselectiva dirigida por un anillo de furano, seguida de la reacción con diferentes electrófilos (Esquema 7).^[47] De esta forma, cuando un 2,2-difeniltetrahidrofurano es *orto*-litiado, el aril-litio formado puede ser atrapado con

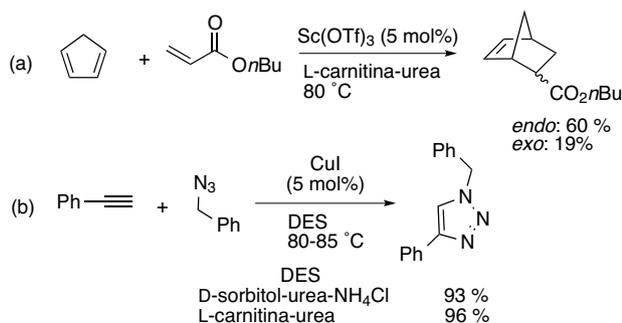
electrófilos. Sin embargo, con derivados de tolilo ($n=1$) la desprotonación en la posición bencílica va seguida de eliminación y apertura del anillo de tetrahidrofurano. La adición de un segundo equivalente de base genera un anión bencílico que reacciona con electrófilos.



Esquema 7. Desprotonación con organolitílicos en DES

Reacciones metalo-catalizadas

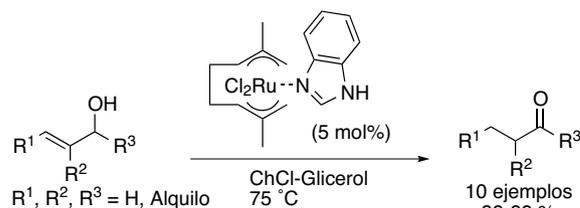
El uso de catalizadores conteniendo metales para llevar a cabo transformaciones orgánicas en mezclas eutécticas no está todavía demasiado explorado, pero algunos ejemplos pueden encontrarse de este campo particularmente importante en síntesis orgánica. Por ejemplo, la reacción de Diels-Alder entre ciclopentadieno y acrilato de *n*-butilo se ha llevado a cabo utilizando triflato de escandio como catalizador en una mezcla eutéctica formada por L-carnitina-urea a 80 °C [ecuación (a) en Esquema 8].^[48] Otro ejemplo de cicloadición, es la reacción “click” entre azida de bencilo y fenilacetileno en diferentes mezclas eutécticas [ecuación (b) en Esquema 8].^[48]



Esquema 8. Cicloadiciones en DES

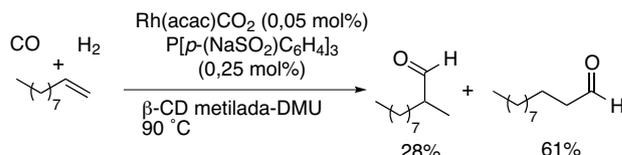
Los anteriores ejemplos usan sales inorgánicas como catalizadores, pero resultan más interesantes las reacciones promovidas por complejos metálicos, ya que la actividad catalítica del complejo puede modularse con los ligandos. Un ejemplo muy interesante es el mostrado en el Esquema 9, donde se produce la isomerización de alcoholes alílicos a cetonas en presencia de complejos de rutenio como catalizadores en una mezcla eutéctica como disolvente.^[49a] Así, cuando la reacción se lleva a cabo con catalizadores de rutenio similares, pero carentes de la unidad de benzimidazol, los resultados en términos de rendimiento y

tiempos de reacción resultan muy inferiores, mostrando la importancia de la interacción ligando-disolvente. La mezcla catalizador-disolvente pudo reutilizarse cuatro veces sin mostrar pérdida de actividad. Otros complejos metálicos de oro en DES se han usado en cicloisomerizaciones de sustratos insaturados.^[49b-d]



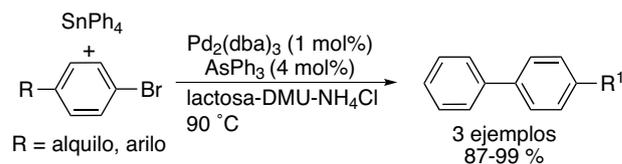
Esquema 9. Isomerización de alcoholes alílicos en DES

Importante por su posible aplicación industrial es la hidroformilación de alquenos terminales, tales como el ejemplo mostrado con el dec-1-eno, usando un catalizador de rodio y una fosfina aniónica como ligando, en una mezcla eutéctica formada por una ciclodextrina metilada y dimetilurea (DMU; Esquema 10).^[50] El uso de esta fosfina resulta crucial para mantener el catalizador metálico en la fase del DES y no en la de alqueno, algo vital para la fácil reutilización de la mezcla catalizador-DES.



Esquema 10. Reacción de hidroformilación en DES

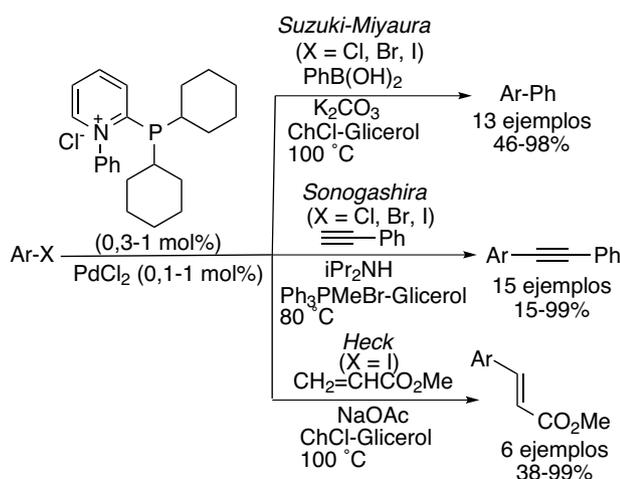
El importante campo de la catálisis con complejos de paladio también ha dado lugar a interesantes desarrollos preliminares al realizarse en mezclas eutécticas. Por ejemplo, la reacción de acoplamiento de Stille se ha llevado a cabo utilizando trifenilarsina como ligando para el catalizador de paladio, logrando excelentes rendimientos (Esquema 11).^[51] Estos resultados son muy inferiores si se utilizan como ligandos otras fosfinas que se han mostrado muy efectivas usando VOCs como disolventes. La combinación catalizador-mezcla eutéctica puede ser reutilizada varias veces y no se requiere el uso de VOCs para aislar el producto final.



Esquema 11. Reacción de acoplamiento en DES

Un ligando catiónico tipo piridinio-fosfina, combinado con dicloruro de paladio, se ha usado recientemente como catalizador en diferentes reacciones de acoplamiento cru-

zados, tales como Suzuki–Miyaura, Sonogashira, o Heck, en mezclas eutécticas (Esquema 12).^[52] Ligandos tradicionales para catálisis con paladio no fueron capaces de competir con los resultados obtenidos con este ligando en condiciones tan polares, el cual se ha demostrado, mediante determinaciones analíticas, espectroscópicas y teóricas, que es capaz de coordinarse con el DES. Además, el sistema catalizador-disolvente pudo ser reutilizado hasta cinco veces en las reacciones de Suzuki y Sonogashira.

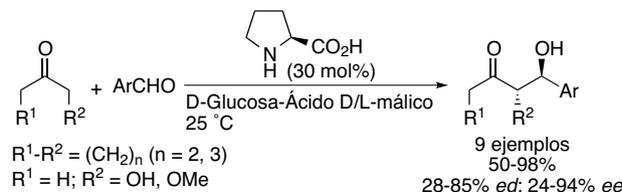


Esquema 12. Reacciones de acoplamiento cruzado en DES

Este ligando, en combinación con sales de paladio, se ha utilizado también en la reacción multicomponente entre ácidos arilborónicos, metabisulfito de sodio y electrófilos para generar arilsulfonas, reciclándose el catalizador y el DES hasta en tres ocasiones sin pérdida de actividad.^[53]

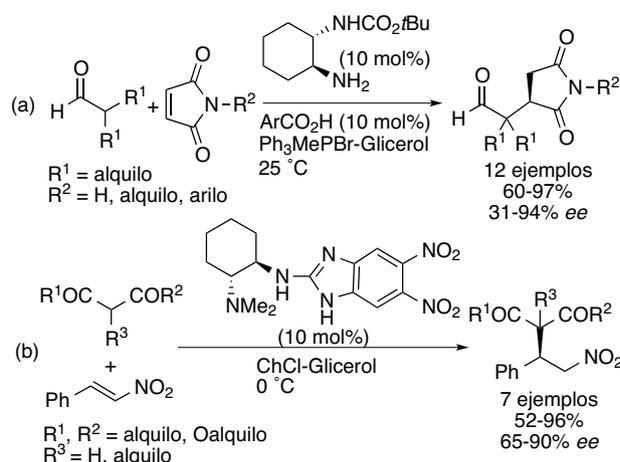
Reacciones órgano-catalizadas

Al contrario que en los procesos metalo-catalizados en DES, donde las reacciones asimétricas no están desarrolladas eficientemente, los procesos órgano-catalizados en DES han permitido obtener reacciones estereoselectivas. Un ejemplo de un proceso organocatalítico asimétrico llevado a cabo en una mezcla eutéctica es el reciente uso de L-prolina como organocatalizador en la reacción aldólica entre cetonas y aldehídos aromáticos (Esquema 13).^[54] El organocatalizador, junto con el DES, pudo ser recuperado por extracción con agua y reusado hasta tres veces. La misma reacción entre ciclohexanona y 4-nitrobenzaldehído ha sido realizada en DES basados en ChCl con un sistema de flujo continuo, obteniendo el producto final con elevados rendimientos y diastereo- y enantio-selectividades, pudiendo modular la diastereoselectividad *anti/sin* del proceso usando diferentes DES.^[55] La reacción aldólica enantioselectiva también se ha llevado a cabo con L-isoleucina en ChCl-etilenglicol,^[56] extrayendo los productos finales del medio de reacción y reciclando la mezcla organocatalizador-DES hasta cinco veces.



Esquema 13. Reacción aldólica asimétrica organocatalizada en DES

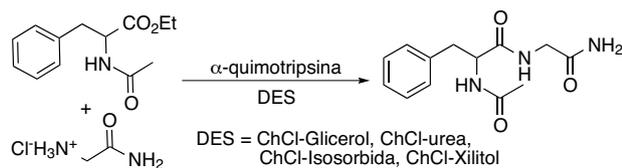
Otros ejemplos recientes de reacciones organocatalizadas enantioselectivas desarrolladas en DES son la adición conjugada de aldehídos a maleimidas organocatalizada por un monocarbamato de una ciclohexano-1,2-diamina quiral [ecuación (a) en Esquema 14],^[57] y la adición Michael de compuestos 1,3-dicarbonílicos a β-nitroestirenos organocatalizada por un derivado quiral de benzimidazol [ecuación (b) en Esquema 14].^[58] En ambos casos el sistema organocatalizador-DES puede ser reusado hasta cuatro veces.



Esquema 14. Adiciones conjugadas enantioselectivas en DES

Reacciones bio-catalizadas

A pesar de que las especies que forman fuertes enlaces de hidrógeno, como los DES, podrían ser capaces de desnaturar las proteínas, o incluso inhibirlas si contienen halógenos (ChCl), se ha encontrado que muchas enzimas retienen su actividad en mezclas eutécticas.^[59] Un ejemplo de importancia industrial es el uso de la hidrolasa α-quimotripsina en una síntesis del péptido *N*-Ac-Phe-Gly-NH₂ a partir de *N*-acetilfenilalanina e hidrocloreuro de glicinamida, en diferentes DES (Esquema 15).^[60] Este procedimiento evita hidrólisis parciales cuando la reacción se realiza en medios acuosos. La enzima suspendida en el DES puede reusarse varias veces tras simple filtración. Además, incluso células completas pueden biocatalizar reacciones en DES permaneciendo estables, como es el caso de la levadura de panadero, que ha sido usada en mezclas de agua y un DES (ChCl-Glicerol) para lograr una reducción enantioselectiva de un grupo cetona,^[61a] un tipo de reducción que se ha aplicado en la síntesis



Esquema 15. Síntesis peptídica biocatalizada en DES

enantioselectiva en DES de la rivastigmina, un fármaco utilizado en el tratamiento del Alzheimer.^[61b]

CONCLUSIONES

Como químicos tenemos la responsabilidad de aportar soluciones medioambientalmente aceptables a los nuevos procesos que desarrollamos, evitando o minimizando al máximo la generación de residuos contaminantes o gases con efecto invernadero, y protegiendo de esta forma los recursos de los que disponemos para garantizar su acceso a generaciones futuras. La respuesta a la generación de residuos derivados del uso de disolventes orgánicos convencionales volátiles radica en el uso alternativo de disolventes considerados sostenibles y/o bio-renovables.

Las mezclas eutécticas de bajo punto de fusión (DES) son uno de estos disolventes considerados sostenibles, dada su baja toxicidad, elevada biodegradabilidad y la escasa huella ecológica de su preparación. Por otra parte, la posibilidad de modificar sus propiedades al variar únicamente su composición los hace ser altamente versátiles. Estos hechos han derivado en un creciente interés de los DES como posible medio de reacción alternativo a los disolventes orgánicos tradicionales.

Sin embargo, el uso de estos disolventes en síntesis orgánica aún no ha sido demasiado estudiado, requiriendo de mucha más investigación para poder alcanzar todo su potencial. Así, un problema a resolver en el inmenso campo de la catálisis es el diseño de catalizadores metálicos que sean compatibles con la estructura del líquido eutéctico, formada por una red tridimensional de enlaces de hidrógeno que contiene además una alta concentración de iones nucleofílicos. Por otra parte, tampoco el uso de organocatalizadores para síntesis asimétrica en este tipo de medios está demasiado estudiado. En este último caso, el diseño del catalizador ha de permitir su interacción con la estructura del líquido eutéctico sin perder su afinidad o modo de acción con los sustratos utilizados.

El potencial de estos DES en numerosos campos, particularmente en química orgánica, resulta enormemente prometedor. Resulta necesario dirigir la investigación en esta área hacia el descubrimiento de nuevos procesos, catalizadores y sistemas eutécticos, sin olvidar el estudio del impacto medioambiental, biodegradabilidad y toxicidad de estos nuevos medios, para poder facilitar su incorporación a nivel industrial.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos al Ministerio de Economía y Competitividad (CTQ2015-66624-P) y a la Universidad de Alicante (UAUS-TI16-10, UAUSTI17-06, VIGROB-173, VIGROB-285) su apoyo económico. X.M. y B.S. agradecen a la Generalitat Valenciana la concesión de sus becas.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] a) <http://www.un.org/millennium/declaration/ares552e.pdf>; b) A. A. Barlett, *Population and Environment* **1994**, *16*, 5.
- [2] D. J. C. Constable, C. Jiménez-González, R. K. Henderson, *Org. Process Res. Dev.* **2007**, *11*, 133.
- [3] a) A. Amelio, G. Genduso, S. Vreysen, P. Luis, B. Van der Bruggen, *Green Chem.* **2014**, *16*, 3045; b) L. Moity, M. Durand, A. Benazzouz, C. Pierlot, V. Molinier, J.-M. Aubry, *Green Chem.* **2012**, *14*, 1132.
- [4] a) *Aqueous-Phase Organometallic Catalysis, 2nd edition* (Eds.: B. Cornils, W. A. Herrmann), Wiley-VC, Weinheim, **2004**; b) *Metal-Catalyzed Reactions in Water*, (Eds.: P. H. Dixneuf, V. Cadierne), Wiley-VC, Weinheim, **2013**.
- [5] H. Zhang, S. Heinonen, E. Levänen, *RSC Adv.* **2014**, *4*, 61137.
- [6] I. A. Shuklov, N. V. Dubrovina, A. Börner, *Synthesis* **2007**, 2925.
- [7] a) P. Wasserscheid, W. Keim, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2000**, *39*, 3772; b) J. Dupont, J. D. Scholten, *Chem. Soc. Rev.* **2010**, *39*, 1780; c) J. P. Hallet, T. Welton, *Chem. Rev.* **2011**, *111*, 3508; d) E. García-Verdugo, B. Altava, M. I. Burguete, P. Lozano, S. V. Luis, *Green Chem.* **2015**, *17*, 2693.
- [8] T. Welton, *Green Chem.* **2011**, *13*, 225.
- [9] S. Aparicio, R. Alcalde, *Green Chem.* **2009**, *11*, 65.
- [10] A. E. Díaz-Álvarez, J. Francos, P. Croche, V. Cadierno, *Curr. Green Chem.* **2014**, *1*, 51.
- [11] M. Pérez-Sánchez, M. Sandoval, M. J. Hernández, P. Domínguez de María, *Curr. Org. Chem.* **2013**, *17*, 1188.
- [12] R. P. Rastogi, P. S. Bassi, *J. Phys. Chem.* **1964**, *68*, 2398.
- [13] R. E. Pincock, *Acc. Chem. Res.* **1969**, *2*, 97.
- [14] a) A. P. Abbott, G. Capper, D. L. Davies, H. L. Munro, R. K. Rasheed, V. Tambyrajah, *Chem. Commun.* **2001**, 2010; b) A. P. Abbott, G. Capper, D. L. Davies, R. K. Rasheed, V. Tambyrajah, *Chem. Commun.* **2003**, 70.
- [15] E. L. Smith, A. P. Abbott, K. S. Ryder, *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 11060.
- [16] C. Ruß, B. König, *Green Chem.* **2012**, *14*, 2969.
- [17] M. Francisco, A. van den Bruinhorts, M. C. Kroon, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 3074.
- [18] Y. Dai, J. van Spronsen, G.-J. Witkamp, R. Verpoorte, Y. H. Choi, *Anal. Chim. Acta* **2013**, *766*, 61.
- [19] M. Hayyan, M. A. Hashim, A. Hayyan, M. A. Al-Saadi, I. M. Al Nashef, M. E. S. Mirghani, O. K. Saheed, *Chemosphere* **2013**, *90*, 2193.
- [20] a) K. Radošević, M. C. Bubalo, V. G. Srček, D. Grgas, T. L. Dragičević, I. R. Redovniković, *Ecotox. Environ. Safe.* **2015**, *112*, 46; b) B.-Y. Zhao, P. Xu, F.-X. Yang, H. Wu, M.-H. Zong, W.-Y. Lou, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2015**, *3*, 2746.

- [21] a) C. Florindo, L. Romero, I. Rintoul, L. C. Branco, I. M. Marrucho, *ACS Sustainable Chem. Eng.*, **2018**, doi: 10.1021/acssuschemeng.7b04235; b) A. Pandey, R. Rai, M. Pal, S. Pandey, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16*, 1559.
- [22] V. Fischer, J. Marcus, D. Touraud, O. Diat, W. Kunz, *J. Colloid. Interface Sci.* **2015**, *453*, 186.
- [23] M. Pal, R. Rai, A. Yadav, R. Khanna, G. A. Baker, S. Pandey, *Langmuir* **2014**, *30*, 13191.
- [24] A. Yadav, S. Pandey, *J. Chem. Eng. Data* **2014**, *59*, 2221.
- [25] a) Y.-T. Liu, Y.-A. Chen, Y.-J. Xing, *Chin. Chem. Lett.* **2014**, *25*, 104; b) Y. Dai, G.-J. Witkamp, R. Verpoorte, Y. H. Choi, *Food Chem.* **2015**, *187*, 14.
- [26] a) Q. Zhang, K. De Oliveira Vigier, S. Royer, F. Jérôme, *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 7108; b) B. Tang, K. H. Row, *Monatsh. Chem.* **2013**, *144*, 1427; c) A. Pavia, R. Craveiro, I. Aroso, M. Martins, R. L. Reis, A. R. C. Duarte, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2014**, *2*, 1063; d) J. García-Álvarez, *Deep eutectic solvents and their applications as new green and biorenewable reaction media*, in *Handbook of Solvents*, Vol. 2 (Ed.: G. Wypych), ChemTec Publishig, Toronto, **2014**, pp. 813.
- [27] a) P. Domínguez de María, Z. Maugeri, *Curr. Opin. Chem. Biol.* **2011**, *15*, 220; b) E. Durand, J. Lecomte, P. Villeneuve, *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **2013**, *115*, 379; c) P. Domínguez de María, F. Hollmann, *Front. Microbiol.* **2015**, *6*, 1257.
- [28] a) I. Lavilla, V. Romero, I. Costas, C. Bendicho, *Trends Anal. Chem.* **2014**, *61*, 1-10; b) F. Pena-Pereira, A. Kloskowski, J. Namieśnik, *Green Chem.* **2015**, *17*, 3687.
- [29] a) D. Carriazo, M. C. Serrano, M. C. Gutiérrez, M. L. Ferrer, F. del Monte, *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 4996; b) F. del Monte, D. Carriazo, M. C. Serrano, M. C. Gutiérrez, M. L. Ferrer, *ChemSusChem* **2014**, *7*, 999.
- [30] a) F. Pena-Pereira, J. Namieśnik *ChemSusChem* **2014**, *7*, 1784; c) G. García, S. Aparicio, R. Ullah, M. Atilhan, *Energy Fuels* **2015**, *29*, 2616.
- [31] a) D. V. Wagle, H. Zhao, G. A. Baker, *Acc. Chem. Res.* **2014**, *47*, 2299; b) A. Abo-Hamad, M. Hayyan, M. A. H. AlSaadi, M. A. Hashim, *Chem. Eng. J.* **2015**, *273*, 551.
- [32] K. De Oliveira Vigier, G. Chatel, F. Jérôme, *ChemCatChem* **2015**, *7*, 1250.
- [33] A. Gertrudes, R. Craveiro, Z. Eltayari, R. L. Reis, A. Paiva, A. R. C. Duarte, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2017**, *5*, 9542.
- [34] Y. H. Choi, J. Van Spronsen, Y. Dai, M. Verberne, F. Hollmann, I. W. C. E. Arends, G.-J. Witkamp, R. Verpoorte, *Plant Physiol.* **2011**, *156*, 1701.
- [35] a) D. A. Alonso, A. Baeza, R. Chinchilla, G. Guillena, I. M. Pastor, D. J. Ramón, *Eur. J. Org. Chem.* **2016**, 612; b) S. Khandelwal, Y. K. Tailor, M. Kumar, *J. Mol. Liq.* **2016**, *215*, 345; c) J. García-Álvarez, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2015**, *2015*, 5147; d) P. Liu, J.-W. Hao, L.-P. Mo, Z.-H. Zhang, *RSC Adv.* **2015**, *5*, 48675.
- [36] B. Singh, H. Lobo, *Catal. Lett.* **2011**, *141*, 178.
- [37] A. S. Singh, S. S. Shendage, J. M. Nagarkar, *Tetrahedron Lett.* **2014**, *55*, 7243.
- [38] S. B. Phadtare, K. J. Jarag, G. S. Shankarling, *Dyes Pigments* **2013**, *97*, 105.
- [39] N. Azizi, M. Edrisi, *Monatsh. Chem.* **2015**, *146*, 1695.
- [40] S. Handy, K. Lavender, *Tetrahedron Lett.* **2013**, *54*, 4377.
- [41] S. Handy, M. Wright, *Tetrahedron Lett.* **2014**, *55*, 3440.
- [42] a) S. Pednekar, R. Bhalerao, N. Ghadge, *J. Chem. Sci.* **2013**, *125*, 615; b) L. Wang, K.-Q. Zhu, Q. Chen, M.-Y. He, *Green Process. Synth.* **2014**, *3*, 457.
- [43] N. Azizi, S. Dezfooli, M. M. Hashemi, *C. R. Chimie* **2013**, *16*, 1098.
- [44] N. Azizi, M. Khajeh, M. Alipour, *Ing. Eng. Chem. Res.* **2014**, *53*, 155561.
- [45] N. Azizi, E. Batebi, S. Bagherpour, H. Ghafari, *RSC Adv.* **2012**, *2*, 2289.
- [46] a) C. Vidal, J. García-Álvarez, A. Hernán-Gómez, A. R. Kennedy, E. Hevia, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 5969; b) C. Vidal, J. García-Álvarez, A. Hernán-Gómez, A. R. Kennedy, E. Hevia, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 16145.
- [47] a) V. Mallardo, R. Rizzi, F. C. Sassone, R. Mansueto, F. M. Perna, A. Salomone, V. Capriati, *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 8655; b) F. C. Sassone, F. M. Perna, A. Salomone, S. Florio, V. Capriati, *Chem. Commun.* **2015**, *51*, 9459.
- [48] F. Ilgen, B. König, *Green Chem.* **2009**, *11*, 848.
- [49] a) C. Vidal, F. J. Suárez, J. García-Álvarez, *Catal. Commun.* **2014**, *44*, 76; b) M. J. Rodríguez-Álvarez, C. Vidal, J. Díez, J. García-Álvarez, *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 12927; c) C. Vidal, L. Merz, J. García-Álvarez, *Green Chem.* **2015**, *17*, 3870; d) M. J. Rodríguez-Álvarez, C. Vidal, S. Schumacher, J. Borge, J. García-Álvarez, *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 3425.
- [50] a) F. Jérôme, M. Ferreira, H. Bricout, S. Menuel, E. Monflier, S. Tilloy, *Green Chem.* **2014**, *16*, 3876; b) M. Ferreira, F. Jérôme, H. Bricout, S. Menuel, D. Landy, S. Fourmentin, S. Tilloy, E. Monflier, *Catal. Lett.* **2015**, *63*, 62.
- [51] G. Imperato, R. Vasold, B. König, *Adv. Synth. Catal.* **2006**, *348*, 2243.
- [52] X. Marset, A. Khoshnood, L. Sotorriós, E. Gómez-Bengoia, D. A. Alonso, D. J. Ramón, *ChemCatChem* **2017**, *9*, 1269.
- [53] X. Marset, G. Guillena, D. J. Ramón, *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 10522.
- [54] R. Martínez, L. Berbegal, G. Guillena, D. J. Ramón, *Green Chem.* **2016**, *18*, 1724.
- [55] D. Brenna, E. Massolo, A. Puglisi, S. Rossi, G. Celentano, M. Benaglia, V. Capriati, *Beilstein J. Org. Chem.* **2016**, *12*, 2620.
- [56] N. Fanjul-Mosteirín, C. Concellón, V. del Amo, *Org. Lett.* **2016**, *18*, 4266.
- [57] J. Flores-Ferrándiz, R. Chinchilla, *Tetrahedron: Asymmetry* **2017**, *28*, 302.
- [58] D. R. Níguez, G. Guillena, D. A. Alonso, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2017**, *5*, 10649.
- [59] N. Guajardo, C. R. Müller, R. Schrebler, C. Carlesi, P. Domínguez de María, *ChemCatChem* **2016**, *8*, 1020.
- [60] Z. Maugeri, P. Domínguez de María, *J. Mol. Catal. B: Enzym.* **2014**, *107*, 120.
- [61] a) Z. Maugeri, P. Domínguez de María, *ChemCatChem* **2014**, *6*, 1535; b) P. Vitale, F. M. Perna, G. Agrimi, I. Pisano, F. Mirizzi, R. V. Capobianco, V. Capriati, *Catalysts* **2018**, *8*, 55, doi:10.3390/catal8020055.

Viaje químico a las atmósferas de los planetas del sistema solar: Una propuesta de aprendizaje contextualizado de la ciencia

Josep Corominas Viñas

Resumen: En este artículo, usando el contexto de un imaginario viaje por los planetas del sistema solar con atmósfera, se trabajan diversos conceptos de química para niveles de ESO y de bachillerato, como son la teoría cinético-molecular, la interacción entre la radiación y la materia, los cambios de estado y algunas reacciones de química de los gases hidrógeno, dióxido de azufre y amoníaco. Los contextos y las actividades forman parte de una de las unidades de química para el bachillerato del proyecto “Química en contexto”, en Cataluña.

Palabras clave: ciencia en contexto, aprendizaje por indagación, estequiometría, química de los gases, atmósferas planetarias.

Abstract: In this article, using the context of an imaginary trip to the planets of the solar system, different chemical concepts for the compulsory school and high school are worked. The kinetic theory for gases, the interaction between radiation and matter, changes of state and some chemical reactions with gases: hydrogen, sulphur dioxide, ammonia. Some of this contexts and activities are part from a project of chemistry in context in Catalonia.

Keywords: Science in context, inquiry learning, stoichiometry, chemical of the gases, planetary atmospheres.

INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas se han desarrollado numerosos proyectos de ciencias basados en contextualizar diferentes aspectos sociales y tecnológicos.^[1,2] En estas contextualizaciones se presentan situaciones relacionadas con la vida cotidiana de los estudiantes haciendo ver su interés en los aspectos personales, profesionales y sociales.^[3] Aunque todos los proyectos de ciencia en contexto comportan caracteres comunes, también tienen individualidades específicas en su concepción y forma, según los temas escogidos para desarrollar las diferentes unidades, siempre con el objetivo de atraer a los estudiantes a una visión de la ciencia relacionada con temas relevantes para ellos.^[4] Uno de los modelos del aprendizaje en contexto consiste en abordar aspectos de ciencia-tecnología-sociedad para cuya comprensión es preciso introducir una serie de conceptos;^[5] este es el enfoque que el autor de este artículo, que ha publicado nu-

merosas actividades para el aprendizaje de la química,^[7] ha escogido para desarrollar la propuesta que se presenta.

Los contextos desarrollados en este artículo tienen su base en una de las unidades del proyecto “Química en contexto” para el bachillerato que se implementa en varios centros de secundaria en Cataluña. En una de las unidades (“Atmósferas y océanos”) el contexto conduce a estudiar la teoría cinético-molecular, los diagramas de fase y ciertos aspectos del equilibrio químico. En este artículo, mediante un imaginario viaje por los planetas de nuestro sistema solar con atmósfera se presentan actividades prácticas adaptables a diferentes niveles educativos, ESO o bachillerato; así como razonamientos sobre estequiometría de la reacción química, cambios de estado, interacción entre la radiación y la materia, y un poco de química descriptiva de los gases hidrógeno, dióxido de carbono, amoníaco y dióxido de azufre presentes en atmósferas tan distintas como las de Venus, la Tierra, Júpiter o Titán.

La variedad de contextos que se presentan y los conceptos y las actividades con ellos relacionadas, permitirán al profesorado escoger entre aquellos que considere más aptos para el nivel de sus alumnos.



J. Corominas
Viñas

Departament de Ciències
Escola Pia de Sitges, 08870 Sitges
C. e.: jcoromi6@xtec.cat

Recibido: 06/02/2018. Aceptado: 28/05/2018.

ATMÓSFERAS PLANETARIAS

Nuestro sistema solar está formado por dos categorías de planetas: los cuatro más cercanos al Sol (Mercurio, Venus, Tierra y Marte) son rocosos con un núcleo interior con elementos pesados y, a excepción de Mercurio, tienen atmósferas. Cuatro gigantes (Júpiter, Saturno, Urano y Neptuno) tienen profundas atmósferas ricas de hidróge-

no y helio. La sonda Voyager-2, ha estudiado con métodos espectroscópicos la composición de los planetas gigantes exteriores.

Sólo en la Tierra la atmósfera es rica en oxígeno, aunque no siempre ha tenido esta composición. La primera atmósfera desapareció durante los cataclismos de la vida temprana del Sistema Solar. La atmósfera posterior contenía compuestos como CO_2 , CH_4 y NH_3 que burbujearon en la superficie terrestre. Tres mil millones de años después había muy poco oxígeno en la atmósfera. Pero cuando las primeras plantas simples aparecieron, empezaron a producir oxígeno mediante la fotosíntesis. Cuando la concentración de oxígeno superó el 10% en volumen, empezaron a evolucionar los animales primitivos, empleando el oxígeno para respirar. Desde entonces, la respiración y otros procesos consumen el oxígeno a medida que se produce y la concentración de oxígeno permanece en un 21% aproximadamente.^[7] La Tabla 1 muestra lo que se conoce actualmente de las atmósferas de los planetas.

Tabla 1. Composición de la atmósfera de los planetas

PLANETA	COMPOSICIÓN DE LA ATMÓSFERA (EN VOLUMEN)
Venus	CO_2 : 96,5 %; N_2 : 3,4 %; SO_2 : 0,0150%
Tierra	N_2 : 78%; O_2 : 21%; Ar: 0,9%; CO_2 : 0,041%
Marte	CO_2 : 95,3 %; N_2 : 2,7%; Ar: 1,6%; CO: 0,07%; H_2O : 0,030%
Júpiter	H_2 : 92,6%; He: 3,25%, pequeñas cantidades de CH_4 , NH_3 y H_2S
Saturno	H_2 : 92,6%; He: 3,25%, pequeñas cantidades de CH_4 , NH_3 y H_2O
Urano	Mayoritariamente H_2 y He.
Neptuno	En capas más externas: H_2 :80%; He: 19%;

A la vista de la composición de las atmósferas, se plantea una pregunta: ¿Por qué en algunos planetas no hay hidrógeno en la atmósfera? ¿Por qué abunda en los planetas gigantes? La respuesta que se sugiere que encuentren los estudiantes reside en dos hechos: el proceso de difusión de un gas y la velocidad de escape de un planeta.

La difusión de un gas es el proceso en el cual sus moléculas se dispersan a través de otro gas. Este proceso tiene lugar siempre que los gases se encuentran en un mismo espacio o cuando están en recipientes diferentes, pero separados por una pared porosa. La difusión es debida al movimiento caótico de las moléculas. De acuerdo con la teoría cinético-molecular, la energía cinética media de las moléculas de un gas depende de la temperatura. A igual temperatura, la energía cinética molecular de dos gases A y B es la misma: $E_{c,A} = E_{c,B}$

$$\frac{1}{2} m_A v_A^2 = \frac{1}{2} m_B v_B^2$$

Pero las velocidades moleculares son diferentes:

$$\frac{v_A}{v_B} = \sqrt{\frac{m_B}{m_A}}$$

Esta ecuación fue encontrada experimentalmente por el químico escocés Thomas Graham en el siglo XIX, por este motivo se conoce como ley de Graham.

Por otra parte, según esta misma teoría la velocidad promedio de las moléculas de un gas, es función de su temperatura absoluta:

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{3RT}{M}} \text{ siendo } R = 8,31 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}, M \text{ la masa molar}$$

y \bar{v} velocidad promedio

La velocidad de escape de un planeta, es la mínima velocidad inicial a la que hay que lanzar un cuerpo para que escape de la atracción gravitatoria. Para la Tierra, el mayor de los planetas rocosos, la velocidad de escape es de 11,2 $\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$. Pero en el caso de Júpiter es de 59,5 $\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$ y para otro de los gigantes gaseosos del sistema solar, Neptuno, es de 23,6 $\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$.

A partir de las ideas de la teoría cinético-molecular y del significado de velocidad de escape, los estudiantes, pueden justificar por qué que los planetas gigantes han podido retener atmósferas de composición muy diferente a la de los planetas rocosos como Venus, Tierra o Marte.

El siguiente experimento permite comprobar que la velocidad de difusión de un gas está en proporción inversa a su masa molar.

Experimento 1. Difusión de los gases

Objetivos

- Usar la teoría cinético-molecular para hacer una predicción sobre las velocidades de difusión de dos gases.
- Comprobar experimentalmente la predicción.
- A partir de los resultados anteriores, justificar que el gas hidrógeno será el que tenga la mayor velocidad de difusión de todos los gases.

Introducción

Los gases que estudiaremos son el cloruro de hidrógeno, HCl y el amoníaco, NH_3 . Estos gases se difundirán a través del aire por el interior de un tubo transparente, en el que hay una tira de papel indicador, que permitirá detectar el avance, al ser uno de los gases de carácter ácido (HCl), por el cambio del indicador a color rojo y el otro de carácter básico (NH_3), que cambiará el indicador a color azul o azul verdoso.

Material y productos

- Tubo transparente (vidrio o metacrilato) de 0,5 m de longitud como mínimo y diámetro entre 2 cm y 2,5 cm.
- 2 tapones agujereados para taponar el tubo.



Figura 1. Montaje para la difusión de los gases

- Bastoncillos de algodón que hay que encajar en los orificios de los tapones (Figura 1).
- Tiras de papel indicador universal o papel de filtro, impregnado con zumo de col lombarda.
- Solución concentrada de HCl(aq).
- Solución concentrada de NH₃(aq).
- Gafas de seguridad.



Procedimiento

- Se coloca una tira de papel indicador a lo largo del interior del tubo, sujetándola por los extremos con cinta adhesiva.
- Preparar los dos tapones provistos de bastoncillos de algodón. Mojar los bastoncillos encajados en uno de los tapones con solución de ácido clorhídrico, HCl(aq) y, usando ahora la solución de amoníaco, mojar los bastoncillos insertados en el otro tapón. En este proceso, mantener los frascos de soluciones lo más alejados posible, así como realizar la operación en una vitrina con sistema de extracción o en un lugar con muy buena ventilación. Tapar inmediatamente los frascos.
- Colocar simultáneamente los dos tapones en ambos extremos del tubo transparente y observar el cambio de color del papel indicador a medida que los dos gases se difunden.
- Cuando se observe que se encuentran los dos gases (sea porque se encuentran ambos colores o por que empieza a aparecer una pequeña nube blanca de cloruro de amonio formado al reaccionar HCl y NH₃), se puede medir la distancia recorrida por ambos gases.

Sacando conclusiones

- El proceso observado permite comparar la velocidad de difusión de dos gases. Usando la expresión de la ley de Graham, ¿en qué relación teórica están las velocidades moleculares promedio? Según este cálculo, ¿a qué distancias de los respectivos extremos deberían haberse encontrado los dos gases? (Para ello, hay que saber la longitud total del tubo).
- ¿Corresponden estas distancias con la predicción realizada al principio? Si no es así, ¿qué explicación podemos sugerir?
- Explicar por qué el gas hidrógeno es el que tendrá una velocidad de difusión más elevada de todos los gases.

Observación final

Como la masa molar del amoníaco es de 17 g/mol y la del HCl de 36,5 g/mol, aplicando la fórmula de la ley de Graham, el valor para la relación de velocidades es de

1,46, es decir las moléculas de NH₃ se mueven 1,46 veces más rápidas que las de HCl, por tanto, deben encontrarse a una distancia 1,46 veces mayor del extremo donde hay el amoníaco que del extremo del HCl. Sin embargo, la relación más a menudo encontrada con este experimento es de 1,27. La razón está en que el proceso que ha tenido lugar no es una simple difusión. El valor real encontrado corresponde a la relación de coeficientes de difusión de ambos gases a través del aire.^[8]

Gestión de los residuos

Una vez finalizado el experimento, llevar el tubo a una vitrina con extractor o cerca de un lugar con muy buena ventilación, quitar los tapones y pasar agua abundante por el interior. El papel indicador se tira a una papelera. Secar el interior del tubo antes de usarlo de nuevo.

EFFECTOS DE LA RADIACIÓN SOLAR EN LOS PLANETAS MÁS CERCANOS AL SOL

Las atmósferas de los tres planetas más próximos al Sol son prácticamente transparentes a la mayor parte de las radiaciones que emite. Pero la radiación solar es absorbida parcialmente por la superficie, la cual aumenta de temperatura, convirtiéndose en un emisor de radiación, en este caso de longitudes de onda superiores a las incidentes. Las longitudes de onda de la radiación emitida por la superficie son del orden de los 10.000 nm, esta radiación se escaparía al espacio si no fuera por los gases presentes a las atmósferas de los planetas. En la Figura 2 se puede comprobar que corresponden a la banda de los IR que absorben las moléculas de CO₂ y también el agua (g), el metano (CH₄) y el monóxido de dinitrógeno (N₂O).

Con este efecto parte de la radiación que se escaparía hacia el espacio, queda retenida por la atmósfera. Es el llamado efecto invernadero y es el mismo mecanismo que actúa en un invernadero: el vidrio es transparente a la radiación IR de onda corta (infrarrojo cercano) pero absorbe y no deja pasar los IR de onda larga que emiten la tierra y los vegetales de forma que la radiación no puede salir y la temperatura es más alta que en el exterior.^[9]

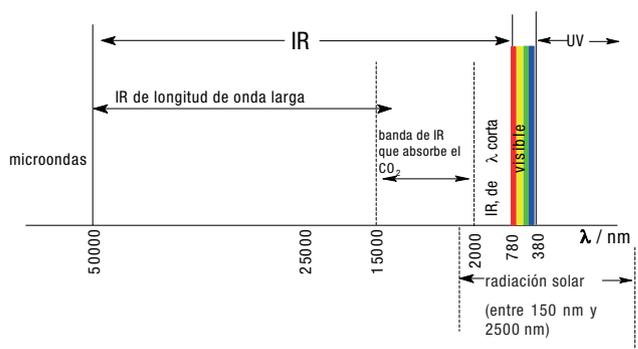


Figura 2. Longitudes de onda de los IR, con las radiaciones emitidas por el Sol y las que absorbe el CO₂

Observando ahora la Tabla 2 se puede entender a partir de la composición de las atmósferas de Venus, Tierra y Marte, que figuran en la Tabla 1, la gran diferencia entre las temperaturas.

Tabla 2. Presión y temperatura en los tres planetas rocosos

PLANETA	PRESIÓN /hPa	TEMPERATURA PROMEDIO /K
Venus	10^5	730
Terra	10^3	288
Marte	5	213

¿Por qué estas diferencias tan brutales de temperaturas entre los tres planetas? Venus, Tierra y Marte se formaron del mismo modo a partir de la nube de materia interestelar. La clave de la respuesta se obtiene cuando se considera que el CO_2 se convierte en carbonatos insolubles si hay agua. El agua podría haber abundado en Venus (Figura 3), pero el agua venusiana contendría 100 veces más del isótopo deuterio, D , que el agua terrestre, esto significa que se producía una desintegración de los átomos de deuterio, formando hidrógeno que se fue escapando del planeta.^[6] Por otra parte, los efectos de la radiación UV que llega a Venus contribuyeron a la foto-disociación de las moléculas de agua, de forma que el hidrógeno fue escapando y el oxígeno fue formando compuestos con los elementos de la superficie.

Nubes y albedo

Venus y la Tierra poseen densas capas de nubes. En el primer caso estas llegan a cubrir totalmente el planeta (Figura 3). La nubes representan una barrera que refleja la radiación al espacio exterior. Venus recibe el doble de



Figura 3. La atmósfera de Venus consiste mayoritariamente en dióxido de carbono, con nubes formadas por gotas de ácido sulfúrico suspendidas en dióxido de azufre, probablemente procedente de erupciones volcánicas. Solamente se han detectado trazas de agua en su atmósfera. Imagen en la banda de UV.

http://nssdc.gsfc.nasa.gov/photo_gallery/photogallery-venus.html

energía por unidad de superficie que la Tierra y cuatro veces más que Marte. A pesar de esto el balance de energía global absorbida por la atmósfera es casi el mismo para los tres planetas. Esto es debido a la gran diferencia de **albedo** en los tres planetas, determinada por la composición de sus atmósferas.

Albedo es el porcentaje de radiación que, incidiendo sobre una superficie, es reflejada. El albedo promedio de la Tierra es del 37-39% de la radiación que proviene del Sol. El de Venus supera el 60%.

Experimento 2 ¿Cómo se forman las nubes?

Objetivo:

- Observar como la presencia de núcleos de condensación, permite condensar en micro gotas el vapor de un líquido.

Material

- Bote transparente en el que se pueda hacer el vacío o disminuir la presión.
- Varita de incienso o cerillas largas.
- Un poco de agua y plastilina para sujetar verticalmente la varita de incienso o la cerilla.

Procedimiento

Observar los tres esquemas siguientes (Figura 4).

- Colocar una pequeña cantidad de agua en el fondo de un bote (1). Encender una varilla de incienso. Cerrar el bote cuando se ha llenado de humo (2). Si la presión disminuye, una parte del agua se evapora y se condensa el vapor, formando una nube (3).

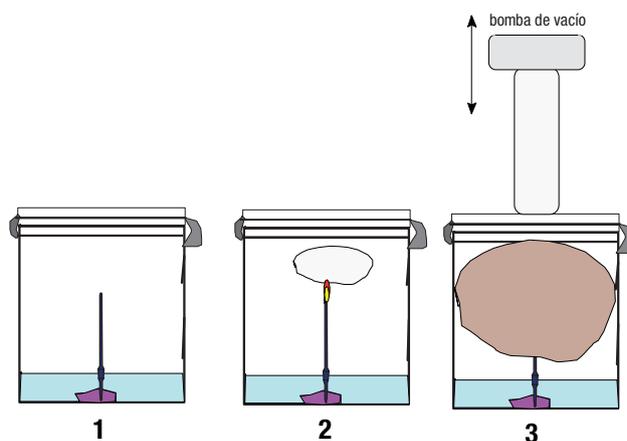


Figura 4. Pasos para “fabricar” una nube

Cuestiones para sacar conclusiones

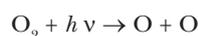
- ¿Qué papel tiene el encender la varita de incienso o la cerilla?
- ¿Se formaría una nube si no hubiera partículas en el interior del bote?

La atmósfera de la Tierra. Ozono: protector y contaminante

Nosotros, los terrícolas, tenemos mucha suerte al tener en nuestra atmósfera algunos gases que absorben muy bien las radiaciones ultravioletas. Actúan como cremas protectoras, evitando que muchas de las radiaciones nocivas lleguen a la Tierra. Muchas de estas absorciones ocurren en la parte alta de la atmósfera, la estratosfera. El gas ozono es especialmente importante, puesto que absorbe radiaciones ultravioletas comprendidas entre $2,97 \cdot 10^2$ nm y $2,14 \cdot 10^3$ nm.

El ozono está presente en la estratosfera en pequeñas cantidades, disperso entre los otros gases atmosféricos.

En primer lugar, la radiación UV de alta energía, disocia la moléculas de oxígeno:

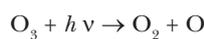


$h\nu$ indica la energía del fotón de radiación ultravioleta que se absorbe.

Los átomos de oxígeno, pueden chocar con moléculas de oxígeno y formar una molécula de ozono:



Cuando el ozono absorbe radiaciones entre los $2,97 \cdot 10^2$ nm y los $2,14 \cdot 10^3$ nm, sus moléculas se disocian:



Esta última reacción es la responsable del efecto protector del ozono en la estratosfera.

En la troposfera, el ozono puede convertirse en un verdadero problema. Cerca del suelo, el ozono causa problemas de salud y se cree que es el responsable, al menos parcialmente, de la muerte de árboles en los bosques nortños de Europa. Es un gas muy reactivo y un poderoso agente oxidante. Reacciona con muchos materiales sintéticos como el plástico, las pinturas, los tintes, causando por ejemplo, que el caucho de las ruedas de los coches se rompa.

Experimento 3. El poder oxidante del ozono

Objetivo:

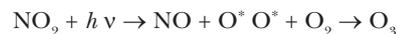
- Observar cómo una atmósfera rica en ozono, es una atmósfera muy oxidante.
- Investigar qué sustancias provocan con más facilidad un ambiente contaminante, característico del llamado "smog fotoquímico" en las ciudades.

Introducción

En este experimento, comprobaremos primero el poder oxidante del ozono, generando, mediante descargas eléctricas en un pequeño volumen, suficiente cantidad para que una solución de iones yoduro, cambie de color por formación de yodo, I_2 .

A continuación, usando el mismo montaje, comprobaremos cómo se forma el "smog fotoquímico". Los óxidos

de nitrógeno, formados en el proceso de combustión en motores de los coches se descomponen por la acción de la luz solar en átomos de oxígeno, los cuales reaccionan con las moléculas de O_2 para formar O_3 .



El asterisco indica que el átomo tiene un electrón desapareado.

Se trata de un radical muy reactivo.

La toxicidad aumenta en presencia de compuestos orgánicos volátiles (conocidos por las siglas VOC) muchos de ellos procedentes de la combustión incompleta de hidrocarburos, pero también usados para dar buenos olores en productos de limpieza. Los terpenos segregados por algunos árboles como los pinos también producen este efecto (Figura 5).

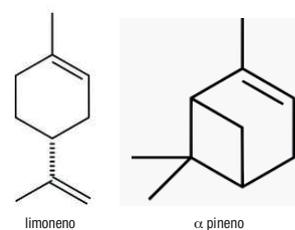


Figura 5. La reacción entre el ozono y estos terpenos produce compuestos con grupos peróxido, altamente irritantes

En las proteínas, el ozono provoca la oxidación de ciertos aminoácidos como el triptófano, la tirosina y la cisteína. Como resultado las proteínas se desnaturalizan, como se ha demostrado por medidas de actividad óptica, perdiendo su actividad biológica.

Material

- Bote transparente con dos electrodos (Figura 6).
- Fuente de alta tensión, 20 kV.
- Solución de KI $1\text{mol}\cdot\text{dm}^{-3}$ (unas gotas en un vidrio de reloj o en un papel de filtro).
- Trozos de piel de limón o naranja.
- Puntero laser.

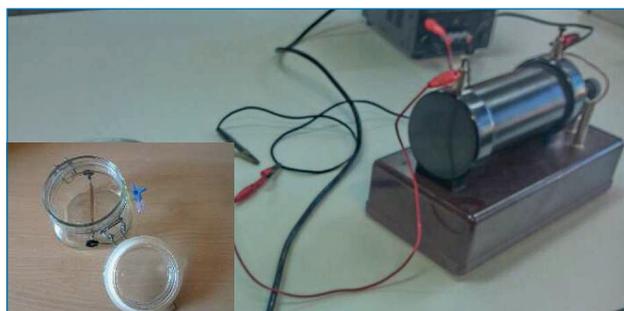


Figura 6. Montaje para el experimento del poder oxidante del ozono. El bote transparente se ve a la izquierda. La fuente de alta tensión es una bobina de Ruhmkorff



Alta tensión. ¡Una vez conectada, no tocar ninguna parte del montaje!

Procedimiento

- En el fondo del bote con los dos electrodos, colocar el vidrio de reloj o un trozo de papel de filtro con unas gotas de solución de KI.
- Conectar la fuente de alta tensión durante un tiempo entre dos y tres minutos. Mientras funciona, no tocar ninguna parte del montaje. Al finalizar, desconectarla inmediatamente.
- Observar el cambio de color de la solución de yoduro de potasio. Interpretar el cambio ocurrido.
- Repetir el experimento, pero en lugar del vidrio de reloj con KI, colocar en el bote un trozo de piel de naranja o limón. Conectar la fuente de alta tensión dos o tres minutos.
- Observar que se ha formado una neblina dentro del bote. Los terpenos liberados, han reaccionado con el ozono, para formar una pequeña niebla. Es el *smog*. Un puntero láser dirigido de manera que la luz atraviese el recipiente, permite ver el rayo luminoso, cosa que indica que se ha formado una dispersión de partículas dentro del bote. Estas partículas se han formado por reacción entre el ozono y el terpeno limoneno liberado por la piel de la fruta.

Cuestiones

1. El ozono ha oxidado los iones yoduro a yodo. Escribir la ecuación de esta reacción.
2. Este experimento es un modelo de cómo se forma ozono por descargas eléctricas. En la estratosfera la energía no proviene de descargas eléctricas si no de la radiación UV. ¿Qué energía tienen los fotones de UV de longitud de onda 200 nm? Compara este valor con la energía de una radiación IR de longitud de onda $1,5 \cdot 10^4$ nm.

LA EXPLORACIÓN DE MARTE

Marte y la Tierra son bastantes parecidos, el día marciano dura casi igual que el terrestre, la radiación calienta las correspondientes superficies y la composición de las rocas sedimentarias es a base de carbonatos y de sulfatos. Estos sulfatos se habrían formado a partir de gigantescas emisiones volcánicas de sulfuros. La diferencia fundamental radica en la presión atmosférica, que en Marte es aproximadamente el 0,7% de la presión a nivel del mar en la Tierra. Aunque los desniveles en Marte, donde hay volcanes de 22 km de altura y depresiones de más de 6 km de profundidad, crean grandes diferencias en los valores de la presión. A pesar de la baja presión, en Marte se forman nubes de agua y de dióxido de carbono sólidos en los polos del planeta. Sin embargo no hay presencia de agua líquida en la superficie, a pesar de que los robots (Figura 7) que exploran el planeta, han encontrado pruebas de una antigua erosión por agua.



Figura 7. El robot Curiosity explora Marte desde el verano de 2013
http://www.nasa.gov/mission_pages/msl/multimedia/gallery-indexEvents.html

Experimento 4. ¿Por qué no hay agua líquida en la superficie de Marte?

Objetivo

Observar cómo al disminuir la presión, la temperatura de ebullición del agua disminuye.

Material

- Jeringa de 60 mL provista de un sistema de tapón; por ejemplo, una llave de tres vías.
- Agua a unos 40°C.

Procedimiento

- Asegurarse de que la jeringa se puede cerrar herméticamente.
- Poner unos 5 mL de agua en la jeringa y bajar el émbolo el máximo posible. Cerrar la jeringa. Estirar el émbolo lo máximo posible y observar que el agua llega a hervir, evaporándose una cierta cantidad (Figura 8).



Figura 8. Al estirar el émbolo, el agua hierve a muy baja presión

Cuestiones

1. Un diagrama de fases (Figura 9) permite comparar qué cambios de estado hace el agua según las condiciones de presión y de temperatura.
 - a) ¿En qué estado físico se encuentra el agua en cada uno de los casos siguientes?

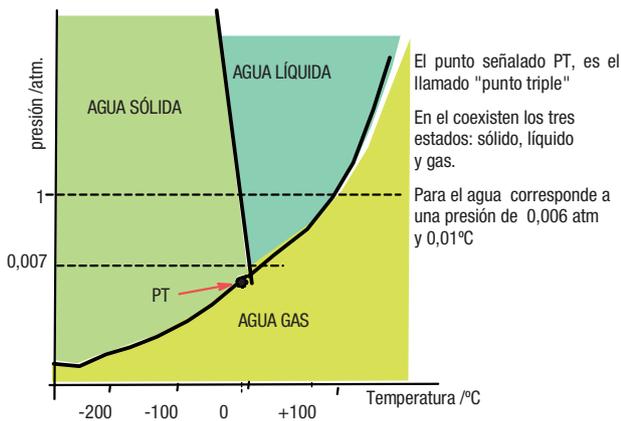


Figura 9. Diagrama de fases para el agua

- 1 atm. y 15°C (como el agua de los mares en la Tierra).
 - 0,007 atm. y -100°C (como en Marte).
 - 1 atm. y 100°C.
- b) Las líneas que hacen de frontera entre cada uno de los estados del agua, representan las condiciones para que haya un cambio de fase del agua. Supongamos que las primitivas condiciones de Marte fueran de 0,5 atmósferas y unos 10°C de temperatura. Si la presión disminuyera hasta la actual en Marte y la temperatura también disminuyera, aunque pocos grados. ¿En qué estado se encontraría el agua que inicialmente era líquida?

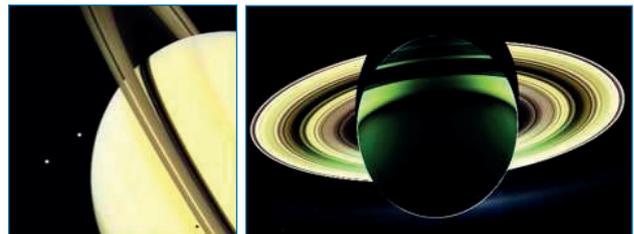
2. Con los datos y respuestas anteriores, debes proponer una explicación al hecho de que actualmente ya no queda agua líquida en la superficie de Marte, aunque los robots exploradores encuentran pruebas de que existió en épocas anteriores

UNA VUELTA POR LOS PLANETAS GIGANTES DEL SISTEMA SOLAR

La composición de la atmósfera de Júpiter es similar a la del Sol, en su mayoría hidrógeno y helio (Tabla 1). A medida que profundizamos en la atmósfera, la presión y la temperatura aumentan comprimiendo el gas hidrógeno hasta el estado líquido. A profundidades de aproximadamente un tercio del camino hacia el núcleo, el hidrógeno tiene el estado metálico y es conductor eléctrico. En el centro, debido a la inmensa presión, es posible que haya un núcleo sólido rocoso del tamaño de la Tierra. La rápida rotación del planeta (algo menos de 10 horas) y la influencia de una fuente de calor interno provocado por el colapso gravitatorio de los fluidos de las capas más profundas, generan una dinámica espectacular en la atmósfera joviana. Con telescopios sencillos es visible desde la Tierra una tormenta con vientos de más de 400 km/h denominada "la gran mancha roja". Diferentes experimentos

confirman que sus colores los causan moléculas orgánicas complejas, átomos de fósforo y compuestos de azufre. La gama de colores que presenta la atmósfera de Júpiter puede ser debida a hidrocarburos como C_2H_2 , C_2H_4 , C_3H_4 y C_3H_6 que existen en forma de gotas de líquido en suspensión y que se habrían formado por foto-disociación de hidrocarburos de cadena larga.

Igual que Júpiter, Saturno está formado principalmente de hidrógeno y helio. Su masa es 112 veces la de la Tierra y su volumen es 755 veces mayor. A pesar de esto Saturno tiene una densidad media de $0,69 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, inferior a la del agua líquida. De estos datos se puede deducir que, si Saturno tiene un núcleo sólido, este tiene que ser de pequeñas dimensiones. Los vientos en la atmósfera superior soplan a 500 m/s (1800 km/h) en la región ecuatorial. Estos vientos rápidos, combinados con el calor que se eleva desde el interior del planeta, forman las bandas amarillas y doradas visibles en la atmósfera (Figura 10). En la década de los años 1980, las sondas Voyager-1 y Voyager-2 revelaron que los anillos de Saturno están hechos principalmente de agua solidificada (Figura 11).



Figuras 10 y 11. Saturno y sus anillos fotografiados por la sonda Cassini. En la imagen de la izquierda se distinguen dos de sus satélites http://solarsystem.nasa.gov/multimedia/display.cfm?Category=Planets&IM_ID=15403

Experimento 5. Hidrógeno y oxígeno, una mezcla explosiva... pero no en Júpiter

Introducción

El gas hidrógeno arde de manera explosiva al combinarse con oxígeno. Unos estudiantes, imaginan que los futuros exploradores que lleguen a Júpiter deberían tomar enormes precauciones para evitar una catástrofe cósmica si llegan a encender una cerilla en aquella atmósfera (Figura 12).

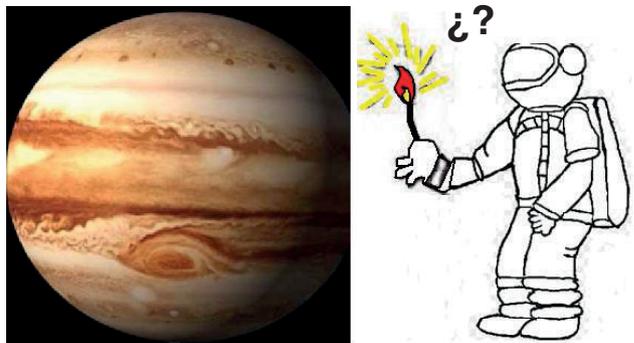


Figura 12. ¿En qué condiciones puede arder el hidrógeno?

Objetivo

Generar un pequeño volumen de gas hidrógeno y comprobar que arde explosivamente sólo en presencia de oxígeno.

Material

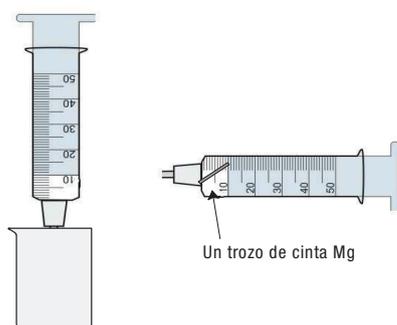
Vamos a hacer este experimento en mili escala, de esta manera nos aseguramos poder trabajar sin peligro.

Este método permite obtener volúmenes pequeños y minimizar riesgos y ahorrar cantidades de reactivos.^[10]

- Dos jeringas de 60 mL.
- Llave de tres vías que permita conectar las dos jeringas.
- Vaso de precipitados de 100 mL.
- Magnesio, cinta (1,5 cm) 
- HCl 2,0 mol·dm⁻³.
- Tubo de ensayo sujeto a un soporte (ver Figura 13).
- Jeringa de 10 mL con dos electrodos sujeta a un soporte (ver Figura 14).
- Encendedor piezoeléctrico de cocina.
- Usar gafas de seguridad.

Procedimiento

- Poner en el vaso de precipitados unos 15 mL de solución de HCl 2,0 mol·dm⁻³. Usar una de las jeringas para llenarla con 10 mL de esta solución. En la otra jeringa, poner un trozo de cinta de magnesio de 1,5 cm de longitud (Figura 13), equivalentes a unos 0,02 g.



tomar 10 mL HCl 2 M

Figura 13. Una de las jeringas tiene la cinta de magnesio, la otra 10 mL HCl 2,0 M

- Conectar las dos jeringas con la llave de tres vías e inyectar lentamente la solución de HCl a la jeringa con el magnesio. Se puede observar cómo se desplaza el émbolo de la jeringa donde hay el magnesio a medida que se genera el gas H₂ (Figura 14).
- Para comprobar la combustión del hidrógeno, en presencia de oxígeno del aire (como ocurre en la Tierra), desconectar la jeringa que contiene el gas hidrógeno, manteniéndola siempre con la llave de tres vías cerrada al paso de gas. Acercarla al tubo de ensayo sujeto con la boca hacia abajo en el soporte (Figura 15). Abrir la llave para poder inyectar unos 10 mL de gas dentro del tubo.

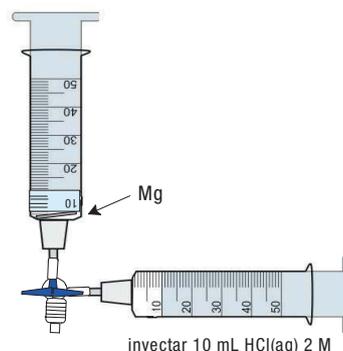


Figura 14. Inyectar la solución de HCl a la jeringa con el Mg

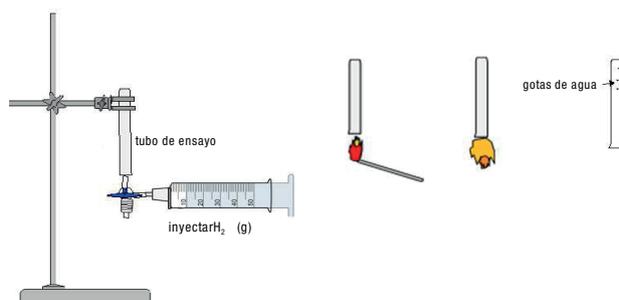


Figura 15. El hidrógeno arde en presencia de oxígeno en la atmósfera de la Tierra

- Acercar una pequeña llama a la boca del tubo: una pequeña explosión y la formación de gotas de agua será el resultado de la combustión del hidrógeno.
- Acercar la jeringa, que todavía contiene un pequeño volumen de gas hidrógeno a la jeringa sujeta en un soporte provista de dos electrodos, que no debe contener nada de aire. Conectar ambas jeringas con la llave de tres vías e inyectar el resto de gas hidrógeno. (Figura 16). Quitar la jeringa que había contenido el hidrógeno, colocar una pequeña porción de plastilina para tapan la posible entrada de aire en la jeringa con electrodos.

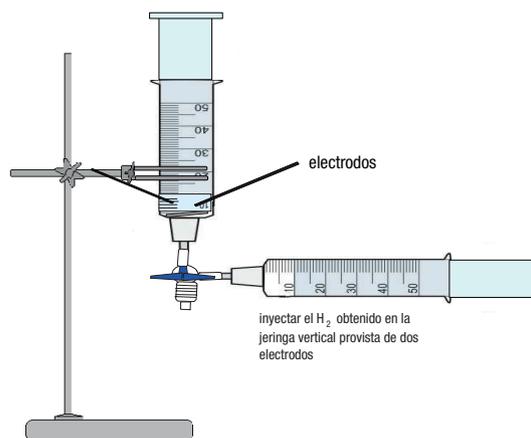


Figura 16. Inyectar el hidrógeno a la jeringa con los electrodos

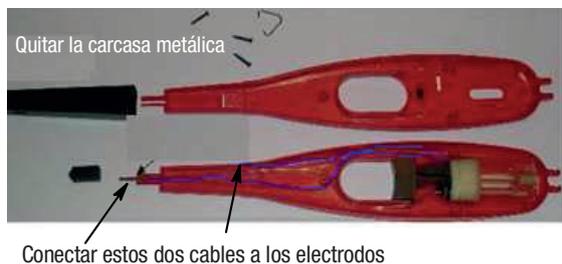


Figura 17. Cómo usar un encendedor piezoeléctrico como fuente de alta tensión

- Usar un encendedor piezoeléctrico de cocina, al que se habrá quitado la carcasa metálica del extremo, como fuente de alta tensión (Figura 17).
- Una vez conectados los electrodos al piezoeléctrico, se observará que, a pesar de que se producen descargas eléctricas en el interior de la jeringa, no hay explosión. El gas hidrógeno, sólo reacciona si en la atmósfera si hay oxígeno, como oxidante (Figura 18).

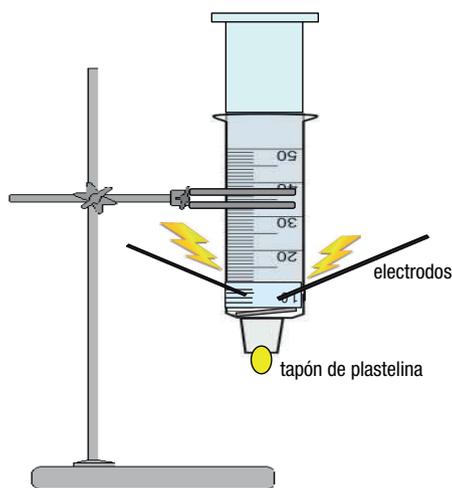


Figura 18. El hidrógeno no reacciona si no hay oxígeno en la atmósfera

Cuestiones

1. El metal magnesio reacciona con el ácido clorhídrico para formar gas hidrógeno y una solución acuosa de cloruro de magnesio. Escribir la ecuación de la reacción. ¿Qué volumen de hidrógeno a 25°C y 1 atmósfera, se puede obtener con 0,020 g de magnesio?

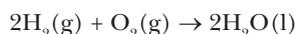
Solución



Aplicando la ecuación de estado de los gases ideales, A 25°C y 1 atmósfera, 1 mol de un gas ocupa 24,4 L.

2. El hidrógeno reacciona con el oxígeno. Escribir esta reacción.

Solución



Otros dos gigantes: Urano y Neptuno

Urano es el otro de los gigantes sistema solar. La atmósfera es principalmente hidrógeno y helio, con una pequeña cantidad de metano y rastros de agua. Urano obtiene su color azul verdoso del gas metano en la atmósfera. La luz solar atraviesa la atmósfera y se refleja nuevamente hacia fuera. El metano absorbe las longitudes de onda del rojo de la luz visible, lo cual resulta en un color azul verdoso (Figura 19). La mayor parte (80% o más) de la masa de Urano está formada por un fluido denso de agua, metano y amoníaco, con un pequeño núcleo sólido.

La atmósfera de Neptuno se extiende a grandes profundidades, con núcleo sólido del tamaño de la Tierra. El color azul de Neptuno es debido al metano en su atmósfera junto con algún otro compuesto actualmente de naturaleza desconocida.

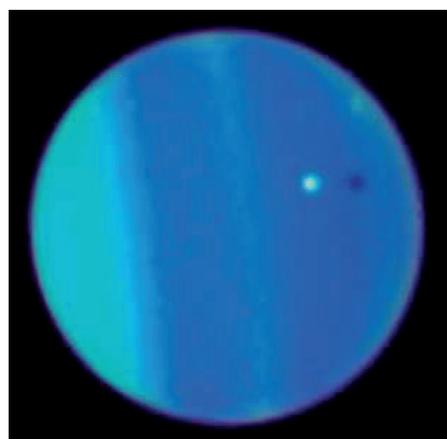


Figura 19. La mancha blanca sobre Urano es uno de los satélites (Ariel) que proyectan la sombra sobre el planeta. Urano es el único planeta del sistema solar que tiene el eje de rotación paralelo al plano de la órbita

<http://solarsystem.nasa.gov/planets/profile.cfm?Object=Uranus>

LOS SATÉLITES ÍO Y TITÁN: DOS MUNDOS EXCEPCIONALES

Esta visión global del satélite de Júpiter (Figura 20), la obtuvo la sonda de la NASA Galileo. Ío, que es ligeramente más grande que la Luna es el planeta más volcánicamente activo en el sistema solar. En esta composición fotográfica, en la que se han retocado los colores, se observan depósitos de dióxido de azufre sólido en tonos entre gris y blanco. Los tonos marrones son probablemente debido a otros compuestos de azufre.

La atmósfera de Ío está en constante cambio, debido a que el dióxido de azufre expulsado pasa de estado sólido durante la noche a sublimar durante el día.

En 2012, la sonda Cassini-Huygens encontró pruebas de que Titán, un satélite de Saturno, es un astro verdaderamente excepcional en el sistema solar. En efecto, junto con la Tierra, son los únicos que poseen ríos, con afluentes que desembocan en mares y océanos, hay nubes y lluvia. Sólo se diferencian en que en la Tierra el líquido es agua y en Titán, son hidrocarburos como metano y compuestos nitrogenados como amoníaco.

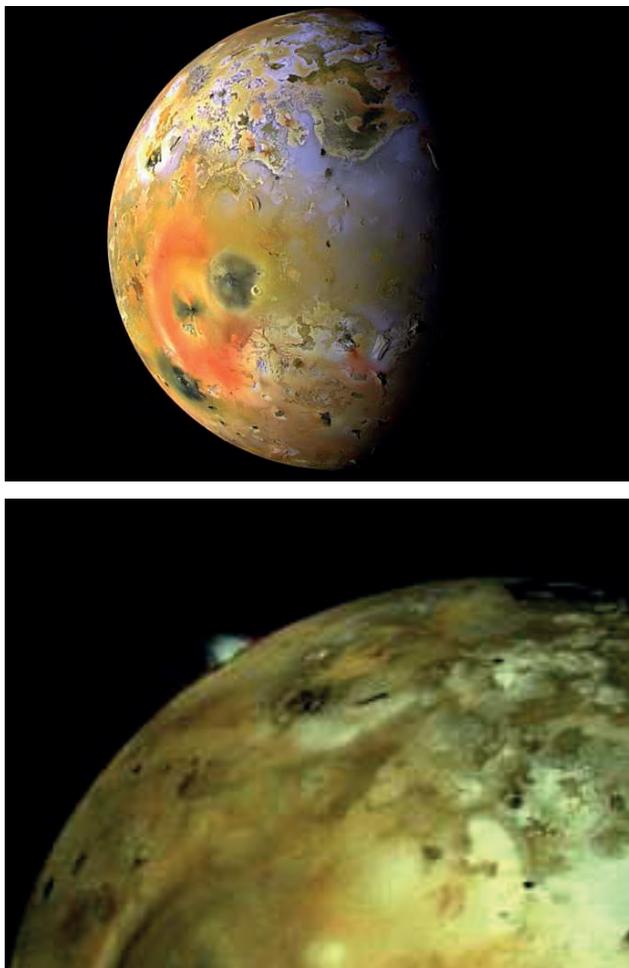


Figura 20. Lo fotografiado por la sonda Galileo. A la derecha, una enorme erupción volcánica se destaca contra el fondo oscuro del espacio
<http://photojournal.jpl.nasa.gov/catalog/PIA01081>

Experimento 6. Propiedades del dióxido de azufre

Objetivo

Obtener pequeños volúmenes de SO_2 para estudiar algunas de sus propiedades químicas.

Material

- Frasco de vidrio o metacrilato que cierre (Figura 19) herméticamente provisto de una llave de tres vías.
- Papel de aluminio.
- Jeringa de 60 mL.
- Vaso de precipitados de 50 mL con solución de indicador.
- Azufre en polvo.
- Encendedor.
- Usar gafas de Seguridad.

Procedimiento

- Proteger la parte inferior del frasco con papel de aluminio. Poner encima una pequeña cantidad de polvo de azufre.
- Acercar la llama del mechero para que empiece a arder el azufre y cerrar inmediatamente el fras-



Figura 21. Frasco que cierra herméticamente y jeringa de 60 mL. A la derecha, en el momento de poner en su interior una pequeña cantidad de azufre

co. El azufre reacciona con el oxígeno dentro del frasco.

- Cuando se observe que el azufre ya no continua ardiendo, el frasco se habrá llenado con el dióxido de azufre producido. **En ningún momento hay que abrir el frasco.**
- Conectar ahora una jeringa de 60 mL a la llave tres vías y absorber un poco de gas de dióxido de azufre. Inyectar el gas en una solución acuosa con indicador universal y observar el cambio de color (Figura 21).

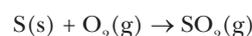
Gestión de los residuos

Sin abrir el frasco y mediante la jeringa, inyectar agua. Debe hacerse varias veces, en total unos 200 mL. El SO_2 , al ser muy soluble en agua, se disolverá, dando una solución ácida. Agitar bien. Ahora ya puede abrirse el frasco y eliminar el líquido lavando con agua abundante.

Cuestiones

1. Escribir la ecuación de la reacción de combustión del azufre. Si el bote usado tiene un volumen de 500 mL, ¿Qué cantidad de azufre hay que quemar para que se obtengan unos 200 mL de SO_2 a 25°C y 1 atm.?

Solución

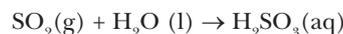


Como ya se describió anteriormente, a 25°C y 1 atmósfera,
 1 mol de un gas ocupa 24,4 L

$$m = \frac{1 \text{ mol S}}{1 \text{ mol SO}_2} \cdot \frac{1 \text{ mol SO}_2}{24,4 \text{ L SO}_2} \cdot 0,2 \text{ L SO}_2 \cdot \frac{32,0 \text{ g S}}{1 \text{ mol S}} = 0,262 \text{ g S}$$

2. En el interior del frasco queda nitrógeno del aire inicial, que no ha reaccionado. El único gas que ha reaccionado con el azufre es el oxígeno. Si la presión inicial dentro del frasco era de 1 atm., razonar si al terminar de arder el azufre la presión total ha disminuido, ha aumentado o no ha cambiado.
3. Deducir del cambio de color del indicador si el dióxido de azufre es un óxido ácido o básico. Escribir la ecuación de la correspondiente reacción del gas con el agua.

Solución



Se trata de un óxido ácido

Experimento 7. Amoníaco en Titán. ¿Qué propiedades químicas caracterizan al amoníaco?

Objetivo

Obtener un pequeño volumen de amoníaco para estudiar alguna de sus propiedades químicas.

Material

- Frasco de vidrio o metacrilato que cierre herméticamente provisto de una llave de tres vías (Figura 22).
- Jeringa de 60 mL.
- Hidróxido de sodio, NaOH, 1,0 g.
- Nitrato de amonio, NH_4NO_3 , 1,0 g.
- Agua caliente (basta unos 5 mL).
- Usar gafas de seguridad y guantes.



Procedimiento

- Poner en el interior del frasco 1,0 g de NaOH y 1,0 g de nitrato de amonio. Cerrar el frasco.
- Antes de iniciar la reacción, se conecta la jeringa a la llave de tres vías del frasco (Figura 20), se cierra el frasco y se hacen tres o cuatro extracciones de aire, de manera que se bombee aire del interior del frasco al exterior. Esto asegurará que cuando se genera gas amoníaco, la presión en el interior del frasco no aumentará por encima de la presión atmosférica, con lo cual nos aseguramos que se mantiene hermético. Una vez hecho esto, desconectar la jeringa del frasco.



Figura 22. Frasco provisto de llave de tres vías con una jeringa conectada a la llave

- Tomar, con la jeringa unos 10 mL de agua caliente (entre 50°C y 60°C), conectarla mediante la llave de tres vías al frasco con los reactivos. Abrir la llave, de manera que el agua entre en el frasco (ya que la presión interior es menor que la atmosférica). Cerrar la llave de tres vías. La reacción generará un volumen de gas amoníaco. **En ningún momento hay que abrir el frasco.**
- Conectar ahora una jeringa de 60 mL a la llave tres vías y absorber un poco de gas amoníaco. Inyectar el gas en una solución acuosa con indicador universal y observar el cambio de color.

Cuestiones

1. Calcular qué cantidad de sustancia de cada uno de los reactivos se ha empleado. Deducir a partir de la ecuación de la reacción, si alguno de los reactivos está en exceso y cuál sería el limitante.

Solución

$$(NaOH) = 1,0g NaOH \cdot \frac{1 mol NaOH}{40 g NaOH} = 0,025 mol NaOH$$

$$(NH_4NO_3) = 1,0 g NH_4NO_3 \cdot \frac{1 mol NH_4NO_3}{80 g NH_4NO_3} = 0,0125 mol NH_4NO_3$$

La reacción es:



Como la proporción en los reactivos es de 1:1, el hidróxido de sodio está en exceso y el reactivo limitante es el nitrato de amonio

2. ¿Qué volumen de gas amoníaco se puede obtener a 25°C y 1 atmósfera con las cantidades empleadas de reactivos?

Solución

Como ya se describió anteriormente, a 25°C y 1 atmósfera, 1 mol de un gas ocupa 24,4 L

$$V = 0,0125 mol NH_4NO_3 \cdot \frac{1 mol NH_3}{1 mol NH_4NO_3} \cdot \frac{24,4 L}{1 mol NH_3} = 0,305 L$$

3. Deducir del cambio de color del indicador si una solución acuosa de amoníaco es ácida o básica.

Gestión de los residuos

Sin abrir el frasco y mediante la jeringa, inyectar agua. Debe hacerse varias veces, en total unos 200 mL. El amoníaco, al ser muy soluble en agua, se disolverá, así como el exceso de hidróxido de sodio, dando una solución básica. Agitar bien. Ahora ya puede abrirse el frasco y eliminar el líquido lavando con agua abundante o, si se dispone de ello, echar el residuo en el correspondiente contenedor de residuos básicos.

FIN DEL VIAJE. CONCLUSIONES

En este artículo, siguiendo los contextos relativos a la composición de las atmósferas de los planetas,^[11] se introducen diferentes conceptos de química, para el bachillerato y para los últimos cursos de la ESO. Los diferentes contextos y actividades propuestas, que forman parte del proyecto "Química en contexto"^[12] se han probado durante los tres últimos años en varios centros de secundaria en Cataluña. En algunos casos, la propuesta descrita en este artículo, se ha experimentado siguiendo los tres primeros apartados en el primer trimestre de segundo curso de bachillerato.

Los apartados 4 y 5 en los que se trabaja especialmente, obtención, propiedades de los gases y estequiometría de la reacción química en el curso 4.º de ESO.

En todos los casos, al terminar, se ha pasado una breve encuesta entre el alumnado que indica que los estudiantes han encontrado las clases más interesantes (un 60%) o mucho más interesantes (un 30%) que en una presentación de los conceptos desligada de cualquier contexto. Parecidos resultados se han obtenido acerca de las preguntas relativas a la exigencia en el estudio de los conceptos relacionados. Más de un 80% consideran que lo más interesante han sido las actividades prácticas, relacionadas con los contextos presentados.^[13]

En el caso de los profesores preguntados, la mayoría consideran muy interesante la presentación de proyectos de química contextualizados, pero todos reconocen la enorme dificultad para implementar en el aula proyectos de esta naturaleza, debido a la falta de tiempo para preparar las clases, la escasa ocasión para la formación y los pocos recursos que en los centros hay para realizar las actividades prácticas.

AGRADECIMIENTOS

Las actividades prácticas se han llevado a cabo con alumnos de diversos centros que aplican el proyecto de Química en contexto, en especial en la Escola Pia de Sitges (Barcelona).

BIBLIOGRAFÍA

^[1] D. C. Orlich, R. J. Harder, R. C. Callahan, M. S. Trevisan, A. H. Brown, D. E. Miller; *Teaching Strategies. A Guide to Effective*

Instruction, 10.^a ed., 2012, Wadsworth Cengage Learning, Belmont, California.

^[2] M. Rocard, *Science Education Now: A Renewed Pedagogy for the Future of Europe* (2007). <http://bit.ly/1ixEQz5> (visitada el 05/02/2017).

^[3] The Salters Institute. <http://saltersinstitute.co.uk/> (visitada el 05/02/2017).

^[4] A. Caamaño, Alambique. *Didáctica de las ciencias experimentales*, 2011, 69.21-34.

^[5] D. Couso Las secuencias didácticas, modelos para su diseño y validación, en Caamaño (cord.), 2011, *Didáctica de la física y de la química*. Graó, Barcelona.

^[6] T. Encrenaz, *Atmosphères planétaires. Origine et evolution*. 2000, Belin CNRS Éditions. París.

^[7] Autor, 2011.

^[8] B. Z. Shakhshiri, Ratio of diffusion coefficients: The ammonium Chloride Ring. 1985, *Chemical Demonstrations*, vol. 2 (Eds. The University of Wisconsin press) Madison.

^[9] Corominas J (2014) "Los primeros minutos del efecto invernadero" *Revista electrónica EUREKA sobre enseñanza y divulgación de las ciencias*, vol. 11, núm. 1, 100-107, <http://rodin.uca.es/xmlui/handle/10498/15716> (Visitada el 20/02/2017).

^[10] J. Corominas (2011), *Química dels gasos en petita escala. Química talla S Educació Química*, núm. 9. Societat catalana de química-IEC. <http://publicacions.iec.cat/repository/pdf/00000179%5C00000095.pdf> (visitada el 02/02/17).

^[11] F. W. Taylor Review Planetary atmospheres Meteorol. *Appl.* 2010 17, 393-403.

^[12] CESIRE-CDEC. Grup de treball de química en context al batxillerat (coord. J. Corominas y F. Guitart). <https://sites.google.com/a/xtec.cat/quimica-en-context/> (visitada el 09/02/2017).

^[13] J. Corominas, F. Guitart (2016) *Chemistry in context. A Curricular Project for Hight Education. Strengths and Weaknesses from teachers' and students' feedback*. Comunicación en ECRICE. Barcelona.

Radio Eslovaquia Internacional y la Teoría Atómica Moderna

Nuria Ruiz Morillas

Resumen: Este artículo es un ensayo de carácter divulgativo sobre la teoría atómica moderna. A partir del concepto de orbital, se presenta una analogía entre los números cuánticos correspondientes a los orbitales atómicos y la estructura arquitectónica en forma de pirámide invertida de Radio Eslovaquia Internacional.

Palabras clave: Teoría atómica, átomo, electrón, orbital atómico, números cuánticos.

Abstract: This article is an essay about the modern atomic theory. From the concept of orbital, an analogy is presented between the quantum numbers corresponding to the atomic orbitals and the architectural structure in the form of an inverted pyramid of Radio Slovakia International.

Keywords: Atomic theory, atom, electron, atomic orbital, quantum numbers.

El pasado verano tuve ocasión de viajar a Eslovaquia y apreciar en Bratislava la singularidad arquitectónica de la sede de Radio Eslovaquia Internacional, una unidad autónoma de la radio pública eslovaca. Se trataba de una pirámide invertida (Figura 1). El edificio había celebrado recientemente sus treinta años de antigüedad. Sinceramente, me sentí como un electrón que llegaba a su átomo y me pregunté si los arquitectos Štefan Ďurkovič, Barnabáš Kissling y Štefan Svetko crearon el proyecto inicial de este edificio pensando en el modelo atómico moderno. Os voy a explicar por qué.

Sabía que las teorías atómicas habían evolucionado y que el antiguo modelo de Bohr había dado paso a la moderna mecánica cuántica. Hacía años que había empezado una nueva era en la física y en la química, pero algunos conceptos aparentemente sencillos no eran tan fáciles de entender. Por ejemplo, no resultaba fácil explicar la distribución de los electrones en un átomo utilizando los términos “orbital”, “función de onda” o “probabilidad”. El edificio ante el que me encontraba podía ayudarme a explicarlo.

Me fui a una cafetería que había frente a Radio Eslovaquia Internacional, elegí una mesa con buenas vistas y



Figura 1. (Dominio público): Radio Eslovaquia Internacional

me planteé cómo explicarle a alguien dónde podría localizarme con más probabilidad si yo fuera un electrón en el interior de un átomo. Tomaría la estructura del edificio de Radio Eslovaquia Internacional como referencia.

Con las modificaciones realizadas sobre el modelo de Bohr, el electrón ya no estaba circunscrito a girar en órbitas alrededor del núcleo a longitudes fijas. Según Heisenberg, todo era mucho más incierto. Ya no era posible conocer con certeza la velocidad y la posición de un electrón de forma simultánea. Es como si al salir de paseo no pudieras saber al mismo tiempo lo rápido que vas y el sitio en el que estás. Puede parecer fácil pero la realidad es mucho más compleja. Schrödinger describió el comportamiento del electrón de un átomo de hidrógeno de tal forma que ya no utilizaba el concepto de órbita sino el de orbital. Los orbitales son soluciones matemáticas (funciones de onda) de la ecuación de Schrödinger. La función de onda no tiene significado físico pero el cuadrado de la función de onda es una magnitud relacionada con las probabilidades. No obstante, el electrón puede estar en cualquier sitio del universo y la ecuación de Schrödinger conduce a veces a



N. Ruiz Morillas

Universitat Rovira i Virgili
Departament de Química Física i Inorgànica
C/ Marcel·lí Domingo, 1, 43007-Tarragona
C. e.: nuria.ruizm@urv.cat

Recibido: 21/03/2018. Aceptado: 30/05/2018.

situaciones algo contraintuitivas. Para simplificar algo tan complejo, aunque los orbitales no son regiones físicas en el espacio, el electrón se describirá a través de un orbital y será habitual referirnos a él como que se encuentra en dicho orbital.^[1]

Se creó, pues, un sistema de identificación para el electrón. Era una especie de documento de identidad compuesto por una serie de números que daban información acerca del orbital en el que se encontraba. Se definieron cuatro números cuánticos: el número cuántico principal (n), el número cuántico del momento angular (l), el número cuántico magnético (m_l) y el número cuántico de espín (m_s).

¿Cómo se combinaban estos números? ¿Cualquier combinación era posible? Pues no, no todas las combinaciones eran válidas. La cosa se complicaba, pero la estructura arquitectónica de pirámide invertida del edificio que estaba observando me ayudaría a explicarlo, especialmente si pensaba en él como un edificio organizado en plantas, departamentos en cada planta y salas de trabajo en cada departamento.

Imaginemos que el núcleo del átomo se encuentra en el sótano de este edificio. El electrón puede estar en cualquier planta, pero no entre ellas. Si subiera por un ascensor, el electrón ganaría energía al subir y la perdería al bajar.

Bien, pues siguiendo esta estructura, vamos a dar sentido a los números cuánticos.

El número cuántico principal (n) solo puede tener un valor entero positivo, distinto de cero. Es lo que en el edificio sería el número de la planta, iniciando la numeración por la planta 1 y ascendiendo sucesivamente a la planta 2, planta 3, etc. (Figura 2). En un átomo, el valor de n está relacionado con la energía y con la distancia del electrón al núcleo. Cuanto mayor es el valor de n , mayor es la energía electrónica y más lejos está el electrón del núcleo. Lo mismo sucede en un edificio como el que hemos descrito. Si el núcleo está en el sótano y la energía aumenta al subir

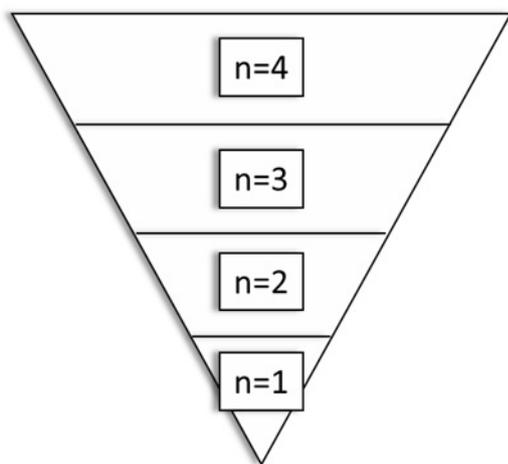


Figura 2. (Elaboración propia): Esquema de la distribución de los números cuánticos principales (n) según una pirámide invertida

por el ascensor, cuanto mayor es el número de la planta en la que se sitúa el electrón, más energía tiene y más alejado respecto al sótano (núcleo) se encuentra.

El número cuántico del momento angular (l) determina la subcapa, o la distribución angular del espacio en el que se puede encontrar el electrón. En otras palabras, el valor de l describe la forma tridimensional de la región del espacio que más probablemente ocupa el electrón. O lo que sería lo mismo, en el edificio, el número l determinaría las diferentes formas espaciales, de los departamentos de cada planta. El número y la forma de los departamentos estarían ligados a la planta en la que se han construido.

Para cierto valor de n , l podría adquirir todos los valores enteros posibles desde 0 hasta $(n-1)$. Así, para $n=1$ (planta 1), l solo podría tomar el valor 0. Es decir, en la primera planta habría un solo departamento, por ejemplo, un departamento de administración, de una forma espacial determinada. En la puerta colgaremos un cartel con el número 0.

Para $n=2$ (planta 2), l podría ser 0 o 1. Es decir, en la segunda planta encontraríamos dos departamentos de formas espaciales distintas. En la puerta de un departamento colgaremos un cartel con el número 0 y en la otra, un cartel con el número 1. Así, en la segunda planta habría otro departamento de administración, similar al de la primera planta y, además, por ejemplo, un departamento de edición de contenidos. Y así, sucesivamente. En definitiva, en un edificio que siguiera este modelo, habría tanta variedad de departamentos como indicara el número de la planta. El nombre dado a cada tipo de departamento sería independiente de la planta (n) en la que se encontrara. Solo dependería del valor de l . Es decir, los departamentos etiquetados con el mismo número serían similares, tendrían la misma forma espacial, aunque, a medida que subiéramos de planta, serían algo más grandes.

Dado que etiquetar los departamentos con un número resulta algo aburrido y además podría confundirse con el número de planta, vamos a ser originales y vamos a darles una letra. Así, dispondríamos de estudios tipo s ($l=0$), p ($l=1$), d ($l=2$) y f ($l=3$). Aunque el nombre de cada tipo de departamento parece un tanto caprichoso, tiene un sentido histórico. Las letras s , p , d responden a la calificación que los físicos dieron a una serie de líneas que detectaban en sus experimentos atómicos: sharp (finas), principales (intensas) y difusas. Después de la letra d , decidieron seguir el orden alfabético y asignaron la letra f (fundamental) a $l=3$. Seguiremos, pues, su propuesta y cambiaremos los números 0, 1, 2 y 3 de los departamentos por las letras s , p , d y f .

Así, los dos primeros números cuánticos nos determinarán la capa y la subcapa en la que se situaría el electrón y, en nuestro edificio, dichos números corresponderían a la planta y al tipo de departamento (Figura 3). Por ejemplo, en la puerta del departamento de administración de la primera planta ($n=1$, $l=0$) estaría colgado el cartel "1s". En la puerta del departamento de gestión de contenidos de la segunda planta ($n=2$, $l=1$), el cartel "2p". Con la misma lógica, se explicarían el resto de carteles.

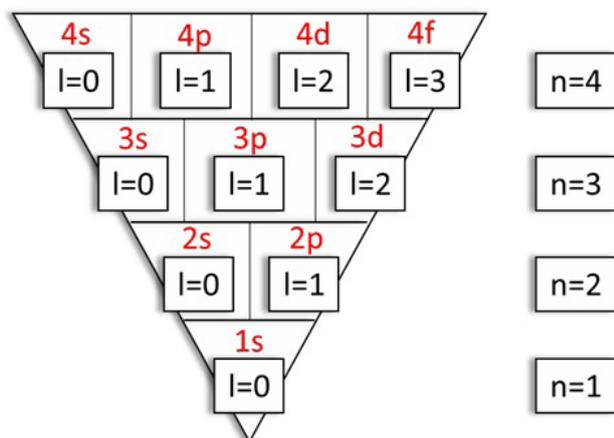


Figura 3. (Elaboración propia): Esquema de la distribución de los números cuánticos principales (n) y de los números cuánticos del momento angular (l) según una pirámide invertida

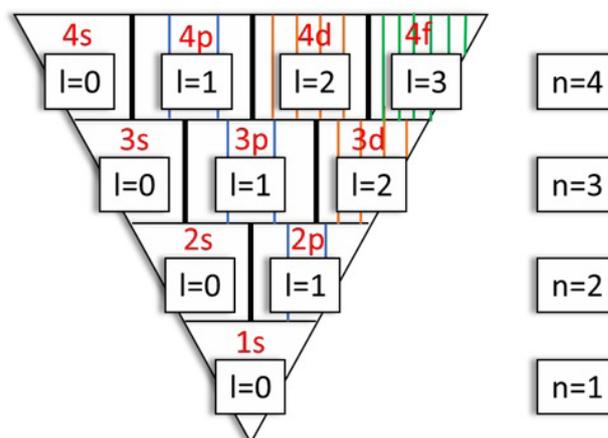


Figura 4. (Elaboración propia): Esquema de la distribución de los números cuánticos principales (n), de los números cuánticos del momento angular (l) y de los números cuánticos magnéticos (m) según una pirámide invertida

El número cuántico magnético (m_l) describe la orientación del orbital en el espacio. Así, en el edificio, una vez definida la planta (n) y el tipo de departamento (s , p , d o f), analizaríamos cuántas salas de trabajo puede tener cada uno de los departamentos. Si hay más de una, podrían diferenciarse entre ellas simplemente por su orientación o por alguna otra complejidad añadida. El valor del número cuántico magnético m_l dependerá del valor del número cuántico del momento angular (l).

Para cierto valor de l , ml puede tomar los valores comprendidos entre $+li$ $-l$. Por ejemplo, para $l=0$, ml solo puede tomar el valor 0. Así, en el edificio, los departamentos de tipo s ($l=0$), que habíamos asumido que eran los departamentos de administración, tendrían una única sala de trabajo. Para $l=1$, los valores de ml pueden ser -1 , 0 y $+1$. En el edificio, los departamentos del tipo p ($l=1$), que habíamos propuesto que serían departamentos de edición de contenidos, dispondrían de tres salas de trabajo que se diferenciarían por su orientación espacial. Siguiendo el mismo razonamiento, los departamentos del tipo d tendrían cinco salas de trabajo y los de tipo f , siete (Figura 4).

Ya tenemos definidos tres de los cuatro números cuánticos que identifican a un electrón. Estos tres primeros números describirían la región del espacio en la que más probablemente se situaría dicho electrón, es decir, su orbital. En el edificio, la combinación de los tres números nos permitiría seleccionar una de las salas de trabajo (si hay más de una) de uno de los departamentos (si hay más de uno) de una planta concreta.

Si añadimos que en cada orbital pueden alojarse un máximo de dos electrones, habrá que distinguirlos con un cuarto número cuántico, el número cuántico de espín (m_s). Este número muestra los dos posibles giros del electrón, uno en el sentido de las manecillas del reloj y el otro en el sentido contrario. Puede tomar dos valores: $+1/2$ o $-1/2$. Si trasladamos la situación a nuestro edificio, en cada sala de trabajo podría haber dos sillas giratorias de tal forma que cada una de ellas girara en un sentido distinto.

Teniendo en cuenta las restricciones presentadas, cada combinación permitida de los cuatro números cuánticos (principal, momento angular, magnético y de espín) identificaría al electrón y lo situaría en un orbital, es decir en una zona del espacio donde muy probablemente se alojaría dicho electrón. Además, le daría un sentido de giro.

¡Reto conseguido! La estructura de este edificio me sirve para explicar dónde se localizaría con más probabilidad un electrón en el interior de un átomo si dispongo de sus cuatro números cuánticos. En otras palabras, si solo hay una persona en el edificio, los cuatro números de su identificación me indicarán la zona del edificio donde más probablemente se encontrará.

Pero me surge una duda: ¿y si hay más gente? ¿Podría localizar a todas las personas siguiendo este modelo? Intentemos aproximarnos a esta situación compleja.

Para un átomo de un solo electrón (átomo hidrogenoide) como el que hemos descrito, el nivel de energía depende solo del número cuántico principal n . A medida que n aumenta (número de planta mayor), la energía aumenta. El electrón de un átomo de hidrógeno en estado fundamental se encuentra en el nivel de energía más bajo ($n=1$) pero en los estados excitados, el electrón ocupa orbitales con valores mayores de n . En otras palabras, es mejor quedarnos en la planta más baja, pero podríamos subir.

Para un átomo multielectrónico, la distribución final de los electrones (plantas, departamentos y salas de trabajo) también debe poder garantizar un valor mínimo de energía en su conjunto. Deberán irse llenando los orbitales de menor a mayor energía. No obstante, la situación no es tan simple como ir ocupando plantas (n) de forma ascendente porque en un átomo multielectrónico algunos niveles energéticos se alteran y el orden de ocupación de los orbitales por parte de los electrones puede cambiar. Necesitaríamos un modelo de edificio en el que la numeración de las plantas no correspondiera exactamente con la planaridad porque en algún caso se llenan primero orbitales con n superiores que tienen niveles de energía menores. Complicado, ¿verdad?

Además, existen dos condiciones adicionales: la regla de Hund y el principio de exclusión de Pauli.

Según la regla de Hund, en orbitales con la misma energía (n y l iguales), los electrones ocupan inicialmente estos orbitales de forma individual (m_l distinto) y después se aparean. Como consecuencia, un átomo tiene tantos electrones desapareados como le sea posible. En nuestro edificio, las salas de trabajo (m_l) de un mismo departamento (n y l iguales) tenderán a ocuparse inicialmente de forma individual. Es decir, solo se ocuparía una de las dos sillas de cada sala hasta que todas las salas estuvieran semillenas. A partir de ese momento, se empezarían a ocupar las otras sillas, llenando completamente cada una de las salas de un mismo departamento.

Por último, el principio de exclusión de Pauli impide que haya dos electrones de un mismo átomo con los cuatro números cuánticos iguales. Claro, en cada silla solo puede sentarse una persona.

Efectivamente, es mucho más difícil explicar la estructura electrónica de átomos multielectrónicos que describir

un electrón en un átomo sencillo, pero nos hemos aproximado bastante.

Concluyendo, si algún día vas a Radio Eslovaquia Internacional, dirígete al ascensor, marca el número cuántico principal (planta), y en función del número que hayas marcado, elige un número cuántico del momento angular (departamento) y a su vez, un número cuántico magnético (sala de trabajo). Finalmente, elige un número cuántico de espín (silla). Cuando hayas acabado, envía un mensaje de texto a un amigo con los cuatro números cuánticos según el formato (n, l, m_l, m_s). Puede que te encuentre. O puede que no.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] R. H. Petrucci, F. G. Herring, J. D. Madura, C. Bissonnette, *Química General*, Pearson Educación, Madrid, 10.^a edición, 2011, 324-342.



Jesús Jiménez Barbero, Medalla de Oro RSEQ, 2018

Jesús Jiménez Barbero es profesor de Investigación Ikerbasque y Director Científico de CIC bioGUNE desde noviembre de 2014. Estudió Química en la Universidad Autónoma de Madrid (1982) y se doctoró en 1987 en el IQOG-CSIC. Entre 1988 y 1992 realizó estancias en Zúrich, en el Instituto Nacional de Investigación Médica (Mill Hill) y en Carnegie Mellon (Pittsburgh). Tras su vuelta a Madrid, como científico titular del CSIC, comenzó a trabajar en el área del reconocimiento molecular, especialmente utilizando RMN. Ha sido profesor invitado en la École Normale Supérieure (París, 2004), Universidad Pierre et Marie Curie, (París, 2009), en Milano-Bicocca (2009-2012) y lo es en la UPVEHU, desde 2016.

En 1996 consiguió la promoción a Investigador Científico del CSIC y en 2002, a Profesor de Investigación, trasladándose al nuevo Centro de Investigaciones Biológicas, donde desarrolló su actividad hasta 2014. Los resultados más relevantes de su investigación están recogidos en más de 500 publicaciones, dos libros y 7 patentes. Asimismo, ha pronunciado más de 250 conferencias en distintas instituciones y simposia en todo el mundo y dirigido más de 25 Tesis Doctorales.

Ha sido galardonado con el Premio Janssen-Cilag 2003 de Química Orgánica de la RSEQ, con el Bruker 2008 del grupo de Resonancia Magnética de la RSEQ, con el Gamboa-Winkler 2017 de la Sociedad Química de Hungría y con el International Whistler Award in Carbohydrate Chemistry 2010. También ha sido elegido como ChemPubSoc Fellow y miembro de la Academia Europea de Ciencias.

Ha sido Presidente de la Real Sociedad Española de Química (desde enero de 2012 a enero de 2018) y Gestor del Programa de Química Básica del Plan Estatal de Inves-



Jesús Jiménez Barbero

tigación (2009 hasta junio de 2018). Ha sido Presidente de la International Carbohydrate Organization (2012-2014). Forma parte del Comité Editorial de numerosas revistas (*Chem Eur J*, *ACS Chem Biol*, *ACS Omega*, *ChemBioChem*, *ChemMedChem*, y otras) y es miembro del comité consultivo externo de varias instituciones científicas, como el IRBB (Barcelona), ICIQ (Tarragona), CIQUS (Santiago), BIO-NAND (Málaga) y CIPF (Valencia).

Sus intereses científicos se centran en el campo de la Biología Química, especialmente en descubrir los mecanismos de reconocimiento molecular de carbohidratos en procesos de interés biomédico esenciales para la vida.

Todas las noticias deberán enviarse a la Secretaría de Publicaciones pyanezs@ucm.es
Su publicación es discrecional al Comité Editorial de *Anales*.

Premios de Reconocimiento a la Carrera Distinguida de la RSEQ, 2018

MIGUEL A. MIRANDA

Miguel A. Miranda es Doctor por la Universidad Autónoma de Madrid y Catedrático de la Universitat Politècnica de València. Ha sido Director del Instituto de Tecnología Química UPV-CSIC (2010-2014) y Presidente de la *European Society for Photobiology* (2009-2011).

Su investigación se centra en la fotoquímica, tanto en sus aspectos fundamentales como en sus implicaciones biológicas y medioambientales. Destacan sus estudios mecanísticos sobre la formación de daños en biomoléculas y sus contribuciones al establecimiento de las bases moleculares de la fotosensibilización por fármacos.

Ha sido Investigador Principal de más de 40 proyectos de investigación: 8 europeos, 14 nacionales, 10 autonómicos y 8 de diferentes instituciones, fundaciones y compañías privadas. Ha impartido más de 100 conferencias plenarios e invitadas en diferentes congresos, universidades y centros de investigación y ha publicado más de 500 artículos en revistas científicas internacionales, un buen número de ellos en las revistas de química multidisciplinar del más alto impacto.

Miguel A. Miranda ha recibido el Premio Honda-Fujishima de la *Japanese Photochemistry Association* (2007); el Premio Janssen-Cilag (Química Orgánica) de la Real Sociedad Española de Química (2008), el Premio Theodor Förster de la *Gesellschaft deutscher Chemiker* y la *Bunsen Gesellschaft für physikalische Chemie* (2010), el ESP Award for Excellence



Miguel A. Miranda

in Photobiological Research de la *European Society for Photobiology* (2017) y el Reconocimiento a una Carrera Distinguida de la Real Sociedad Española de Química (2018).

Finalmente, Miguel A. Miranda ha dirigido 45 tesis doctorales y ha supervisado a más de 30 investigadores postdoctorales de diferentes nacionalidades.

MANUEL YÁÑEZ MONTERO



Manuel Yáñez Montero

Manuel Yáñez, Catedrático del Departamento de Química de la Universidad Autónoma de Madrid (UAM), nació en Lugo y se licenció en 1970 en la Universidad de Santiago de Compostela. Fue Premio Nacional Fin de Carrera en 1971. Defendió su Tesis Doctoral en 1973 en la UAM, con Premio Extraordinario. En el período 1974-76 fue Postdoc con J. A. Pople, que sería galardonado con el Premio Nobel de Química en 1998. Ha recibido diferentes premios por su actividad investigadora entre ellos el de la FUAM en 1993, el de la RSEQ en Química Física en 2001, y el Premio Francés *Betancourt-Perronet* en 2003. Fue Editor de la Revista *Anales de Química* de la RSEQ en el período 2009-2012. En la actualidad es Editor de la revista *Computational and Theoretical Chemistry*. Es el coordinador de un Master Europeo que recibió el reconocimiento de Master Erasmus Mundus en 2009 y que involucra a Universidades de seis países distintos, renovado en la actualidad como Master Erasmus+. Igualmente ha promovido y coordina un *European Joint*

Doctorate on Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM), aprobado como un proyecto ITN de la Unión Europea, que involucra a 13 Universidades europeas de nueve países y un número equivalente de compañías del sector no-académico. En cuanto a su actividad investigadora, ha sido invitado a contribuir a la *Encyclopedia of Computational Chemistry* y a la *Encyclopedia of Mass Spectrometry*. Cuenta con más de 480 artículos científicos que acumulan más de 9.600 citas y un promedio de citas por artículo superior a 22 y varios capítulos de libros. Es el representante español en

el Comité de la World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC) y en la European Division of Computational Chemistry, de la que fue Vicepresidente. Ha organizado varios Congresos y Workshops, destacando el WATOC-2011 en Santiago de Compostela, con más de 1.300 participantes de 67 países. Ha sido Profesor Visitante en Universidades Europeas, Americanas y Australianas. Fue investido Doctor *Honoris Causa* por la Universidad del País Vasco en 2017 y es académico de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales.

Premios a la Excelencia Investigadora de la RSEQ, 2018

SOFÍA CALERO

Sofía Calero es Catedrática de Universidad (Química Física) en la Universidad Pablo de Olavide de Sevilla (UPO) y es la responsable del Grupo RASPA, Grupo de Materiales Nanoestructurados con Aplicaciones Tecnológicas (www.upo.es/raspa) desde su creación en 2009. Su actividad investigadora está orientada al estudio de procesos que, combinados con algún tipo de control a nivel molecular, pueden ser relevantes tanto en ciencia básica como en la industria. Ha publicado más de 170 artículos en revistas internacionales indexadas y ha impartido en torno a un centenar de ponencias en congresos y en eventos científicos, muchas de ellas como invitada. Pertenece a redes científicas de ámbito nacional e internacional y es editora de la revista *Adsorption*. Forma parte del equipo directivo de la International Adsorption Society, es vocal del Grupo Español de Zeolitas y vicepresidenta del Grupo Especializado de Adsorción de la Real Sociedad Española de Química. La trayectoria científica de Sofía Calero se ha visto reconocida con una beca predoctoral FPU (1996), becas posdoctorales MEC (2001) y Marie



Sofía Calero

Curie Individual Fellowship (2002-2003), un contrato Ramón y Cajal (2004), el Premio Extraordinario de Doctorado (2000), el Premio Sigma-Aldrich a Investigadores Noveles RSEQ (2005), el Premio Marie Curie Excellence Award (2005), una ERC Consolidator Grant (2012) y la VPP de la Academia Holandesa (2017).

JUAN CASADO CORDÓN



Juan Casado Cordon

Juan Casado Cordon (47 años) es Catedrático de Química Física en la Universidad de Málaga desde 2016. Cursó estudios de la Licenciatura en Ciencias Químicas en 1989-1994 (Premio Extraordinario) y se Doctoró en Química en la Universidad de Málaga (Directores, los profesores Juan T. López Navarrete, Francisco J. Ramírez y Víctor Hernández Jolín) en 1999 con estudios de propiedades espectroscópicas de modelos moleculares de portadores de carga en polímeros conductores (politiofenos). En el período 2000-2002 realizó una estancia postdoctoral en el "Department of Chemistry (University of Minnesota, USA)" en el laboratorio del profesor Larry L. Miller, realizando estudios electroquímicos de moléculas con estructura tipo quinoide.

Una segunda estancia la llevó a cabo en el “Steacie Institute for Molecular Sciences in Ottawa (profesor Marek Zgierski, National Research Council of Canada)” en estudios de espectroscopía molecular de moléculas altamente conjugadas. En 2003 se reincorpora como investigador a la Universidad de Málaga gracias al recién creado “Programa Ramón y Cajal”. Es miembro de la Real Sociedad Española de Química desde 1999 y actualmente es Fellow of the Royal Society of Chemistry. En 2005 obtuvo el premio de la RSEQ para “Jóvenes Investigadores” y en 2006 el Premio “Andalucía de Investigación, Tercer Milenio”. Es autor de alrededor 220 artículos científicos en las revistas más relevantes de Química

(recientemente seleccionado por Angewandte Chemie en su sección de “Author profiles”). Sus intereses científicos son la espectroscopía de moléculas orgánicas conjugadas y su uso para la elucidación de mecanismos fotofísicos y de transferencia de carga. Es especialista en el campo de la estructura electrónica de dirradicales orgánicos tipo kekulé, sobre su actividad magnética y en su aplicación en fotovoltaica basada en excisión de singletes. Más recientemente destacan sus estudios en espectroscopías quirales. Mantiene colaboraciones con los más destacados laboratorios nacionales e internacionales en el campo de la “Electrónica Molecular”.

CONCEPCIÓN GIMENO

Concepción Gimeno es investigadora del Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH), experta en la preparación y estudio de nuevos compuestos conteniendo metales nobles como el oro o la plata, y en el desarrollo de nuevas propiedades para estos compuestos. En concreto, del laboratorio de la profesora Gimeno han salido nuevos materiales con propiedades ópticas muy especiales, dispositivos LED con luz emitida de diferentes colores, en cierta medida modulados en el proceso preparativo, que han merecido el desarrollo de varias patentes. El mismo tipo de compuestos de oro, en los que el grupo de la doctora Gimeno es referente internacional, con pequeños cambios en su estructura, se están ensayando como agentes antitumorales a la vez que como transportadores de fármacos de modo selectivo hacia las células cancerígenas. Una línea, de relativa nueva creación, consiste en utilizar estos compuestos de oro, funcionalizados con otros metales como Renio, Rutenio o Iridio, como agentes de imagen para mejorar la visualización celular, de manera selectiva a tipos de células específicas.

Ha recibido recibido múltiples galardones entre los que destacan el premio “IUPAC 2017 Distinguished Women in Chemistry and Chemical Engineering”, el de “Exce-



Concepción Gimeno

lencia Investigadora del Grupo Especializado de Química Organometálica” de la Real Sociedad Española de Química en 2017, el Premio Tercer Milenio del Heraldo de Aragón dentro del apartado de “Innovación y futuro” de 2017 y recientemente la Medalla de las Cortes de Aragón 2018 en representación de todas las mujeres científicas.

XAVI RIBAS



Xavi Ribas

Xavi Ribas nació en Santa Coloma de Farners (Girona) en 1974. Su trayectoria académica empieza con la obtención del doctorado en 2001 en la Universitat de Girona (UdG), seguidos de tres años de postdoc en el ICMAB-CSIC y dos años de Juan de la Cierva, hasta la consecución de una plaza de Profesor Agregat en la UdG en Nov de 2006, donde empezó su carrera como investigador independiente y group leader. Su investigación en los últimos años ha pivotado entre tres líneas principales: a) Estudios mecanísticos fundamentales sobre activación organometálica de enlaces C-X y C-H con metales de transición, b) Estudio de modelos estructurales y funcionales de oxigenasas Fe, Mn y Cu no-hemo y su aplicación como catalizadores de oxidación

selectiva, c) Auto-ensamblaje de nanocápsulas basadas en la coordinación dirigida por metal para host-guest y transformaciones catalíticas.

Recibió un premio ICREA-Acadèmia (Generalitat de Catalunya) en 2010 y un proyecto ERC-Starting Grant en 2011, este último centrado en funcionalización C-X y C-H en el marco de estudio de la reactividad de especies de Cu(III). Es IP de dos proyectos CTQ del MINECO (CTQ2013 y CTQ2016) y consiguió un segundo premio ICREA-Acadèmia en 2015 y un ERC-Proof of Concept Grant en 2015. También lidera el proyecto catalán 2017-SGR 264 y los proyectos de investigación de la Universitat de Girona MCP-UdG2016 y CdR-CompetUdG2017.

Ha publicado más de 110 artículos en revistas indexadas, con un índice H de 37 y 4500 citas. También ha publicado 5 capítulos de libros y es editor del libro titulado "Funcionalización C-H y C-X. Transition metal mediation", publicado por RSC-Publishing en 2013. Además, es coautor de 5 patentes españolas. Ha asistido a 150 conferencias internacionales y ha impartido más de 30 conferencias en congresos internacionales y universidades. En el campo de la transferencia de tecnología, es cofundador de la futura spin-off GiOxCat, centrada en la producción de peróxido de hidrógeno marcado isotópicamente con oxígeno-18 ($H_2^{18}O_2$).

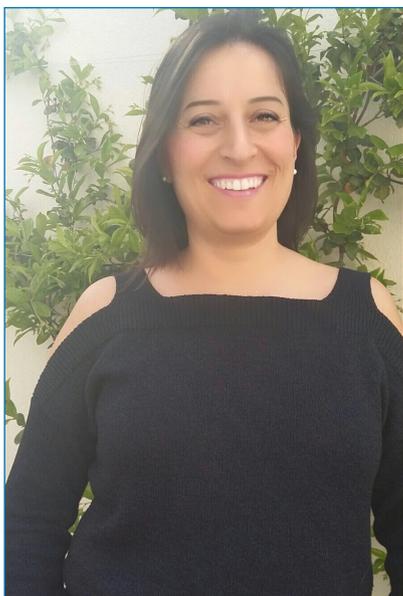
Premios Jóvenes Investigadores de la RSEQ, 2018

CARMEN ATIENZA

Carmen M.^a Atienza Castellanos se licenció en C.C Químicas por la Universidad Autónoma de Madrid y obtuvo el diploma de estudios avanzados (DEA) bajo la dirección del profesor Antonio Echavarren. Realizó los estudios de doctorado en la Universidad Complutense de

Madrid bajo la supervisión del profesor Nazario Martín y el profesor Carlos Seoane trabajando en aspectos fundamentales de la química de fullereno y tetratetrafulvalenos (TTFs). Durante este período, realizó una estancia en los laboratorios del profesor François Diederich, desarrollando nuevos sistemas TTF-CEES para óptica no lineal (ONL). Después de obtener el doctorado (2005), realizó su primera estancia postdoctoral en el grupo del profesor Dirk M. Guldi en la Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (Alemania). Su trabajo se centró en el estudio de las propiedades químicas, físicas y fotofísicas de nuevos híbridos electroactivos moleculares. Posteriormente, realizó un segundo período postdoctoral en los laboratorios del profesor Julián Rodríguez en la UCLM, desarrollando complejos dendriméricos luminiscentes basados en lantano. En Octubre de 2007 se reincorporó como Profesor Visitante en la UCM. Más tarde consiguió un contrato como investigadora en el Programa Juan de la Cierva (2009-2011) desarrollado en el grupo del profesor Nazario Martín y en 2012, obtiene un contrato de investigador en el programa Ramón y Cajal.

Su labor investigadora está centrada en el uso de biomoléculas como andamios para la construcción de nuevos materiales electroactivos de tipo n/p altamente ordenados con propiedades de fotocorriente. Su carrera investigadora ha dado lugar a la publicación de 38 artículos en revistas internacionales de alto impacto.



Carmen Atienza

ALBERTO FERNÁNDEZ TEJADA

Alberto Fernández Tejada es líder de grupo del laboratorio de Inmunología Química en CIC bioGUNE (Bilbao) desde 2017 y Profesor de Investigación Ikerbasque.

Realizó su tesis doctoral en el grupo de Química Biológica de la Universidad de La Rioja dirigido por los profesores Francisco Corzana y Jesús M. Peregrina, doctorándose en Química en el año 2009 por la misma Universidad. En 2010, comenzó su etapa postdoctoral en el Memorial Sloan Kettering Cancer Center, primero con una Beca MEC-Fulbright en el grupo del profesor Gin (2010-2012), y en el laboratorio del profesor Danishefsky con una Beca Internacional Marie Curie IOF (2012-2014). A su vuelta a España se incorporó al grupo del profesor Jesús Jiménez-Barbero, primero en el CIB-CSIC (Madrid) y posteriormente en CIC bioGUNE. En 2015 se trasladó a la Universidad de Oxford con una Beca Intra-Europea Marie Curie IEF (2015-2017) para trabajar en los laboratorios del profesor Ben Davis.

Tras conseguir sendos contratos de Investigación Ramón y Cajal e Ikerbasque en las convocatorias de 2015 y 2016, respectivamente, Alberto logró la prestigiosa ERC Starting Grant del Consejo Europeo de Investigación (ERC) en 2016 y ha establecido su propio grupo de investigación en Inmunología Química como Profesor de Investigación Ikerbasque en CIC bioGUNE.



Alberto Fernández Tejada

Ha publicado más de 25 artículos en revistas de alto impacto, 10 de ellos como autor de correspondencia y más de 15 como primer autor. Su principal línea de investigación, en la frontera entre la química y la biología, se centra en la síntesis química y evaluación biológica de vacunas contra el cáncer así como en la elucidación de su mecanismo de acción.

MARCOS GARCÍA SUERO

Marcos García Suero se licenció en química por la Universidad de Oviedo en 2003. Durante el período 2002-2003, trabajó con los profesores José Gimeno y M. Pilar Gamasá en química de complejos cumuleno de rutenio, con una beca de iniciación a la investigación. En febrero de



Marcos García Suero

2009, se doctoró bajo la supervisión de los profesores José Barluenga y Josefa Flórez en el Instituto de Química Organometálica Enrique Moles y Facultad de Química de la Universidad de Oviedo.

Su tesis, financiada a través del programa FPU del Ministerio de Educación y Ciencia, se basó en el desarrollo de nuevos procesos estereoselectivos multicomponente con complejos carbenos de Fischer, enolatos de litio y organomagnesianos. Durante la tesis, realizó una estancia en el grupo del profesor Andrew Myers de la Harvard University, trabajando en la síntesis de nuevos antibióticos tetraciclina y pentaciclina.

En 2010, recibió una beca Marie Curie e inició una etapa posdoctoral en el equipo del profesor Matthew Gaunt de la University of Cambridge, trabajando en procesos catalíticos de carbocupración de alquinos con especies de Cu(III)-arilo, y en el descubrimiento de una nueva reacción de bioconjugación en restos metionina.

En octubre del 2014, inició su carrera investigadora independiente en el Instituto Catalán de Investigación Química (ICIQ) bajo el programa "Starting Career Programme" financiada por el Programa Severo Ochoa y la Fundación Cellex.

Su grupo de investigación es pionero en la generación catalítica de radicales carbenoide y de carbinos, y sus últimos descubrimientos han sido publicados en la revista *Nature*.

JAVIER MONTENEGRO

Javier Montenegro recibió su master (2003) y su Doctorado (2009) de la Universidad de Santiago de Compostela, bajo la dirección de la profesora Susana López, trabajando en el campo de los retinoides sintéticos. En 2005 realizó una estancia predoctoral con el profesor Steven Ley en la Universidad de Cambridge (Síntesis Total) y en 2007 fue investigador visitante en el Scripps Research Institute (La Jolla, California) trabajando con el profesor Reza M. Ghadiri en química prebiótica y polímeros dinámicos supramoleculares. En 2009 se trasladó a la Universidad de Ginebra (Suzia) para sus estudios postdoctorales con el profesor Stefan Matile en biosensores por generación de patrones y sistemas sintéticos de transporte y entrega controlada.

En 2012 volvió a España con un contrato Juan de la Cierva para trabajar en el CIQUS asociado al profesor Juan Granja. En 2015 obtuvo un contrato Ramón y Cajal asociado al Departamento de Química Orgánica y al CIQUS en la Universidad de Santiago de Compostela, en 2015 consiguió una ERC - Starting Grant del Consejo Europeo de Investigación (ERC) y en 2017 una Young Investigator Grant del prestigioso Human Frontier Science Program (HFSP).

La investigación en el grupo del Dr. Montenegro se basa en la síntesis orgánica y supramolecular aplicada a la



Javier Montenegro

química biológica, la biología sintética y los materiales moleculares. En la actualidad, el grupo del Dr. Montenegro investiga nuevas moléculas auto-ensamblables con aplicaciones en terapia y edición génica, aleaciones nanométricas tubulares y fabricación de miméticos artificiales sencillos del citoesqueleto celular.

CARLOS ROMERO NIETO

Carlos Romero Nieto se licenció en Ciencias Químicas en la Universidad de Castilla-La Mancha. En diciembre de 2009 obtuvo el título de Doctor en Química en la misma Universidad bajo la supervisión de los profesores Julián Rodríguez López y Sonia Merino Guijarro del área de Química Orgánica de la Facultad de Ciencias Químicas de Ciudad Real. Su tesis se centró en la investigación de dendrímeros basados en heterociclos de fósforo. Durante su doctorado, pasó más de un año en el grupo del profesor Baumgartner en la Universidad de Calgary (Canadá), investigando sobre la síntesis y propiedades de nuevas moléculas derivadas de fosfol.

En 2010 comenzó como investigador postdoctoral en el grupo del profesor Guldi en el departamento de Química Física de la Universidad de Erlangen-Nuremberg (Alemania) realizando estudios espectroscópicos sobre sistemas orgánicos dador-aceptor, especialmente centrados en nanoestructuras de carbono (nanotubos y grafeno) así como moléculas porfirínicas.

En 2013 obtuvo la financiación Liebig con la que comenzó su carrera como investigador independiente y líder de grupo en el Instituto de Química Orgánica de la Universidad de Heidelberg (Alemania). En 2016, la Uni-



Carlos Romero Nieto

versidad de Heidelberg le concedió en su 630 aniversario el premio Hengstberger para jóvenes investigadores. En la actualidad, las investigaciones de su grupo se centran en el diseño, síntesis y propiedades de nuevas moléculas funcionales basadas en fósforo y boro, así como en el desarrollo de nuevos agentes quimioterapéuticos.

Premio a Tareas Educativas y Divulgativas a Profesores de Enseñanzas Preuniversitarias

Josep Corominas Viñas, es licenciado en ciencias químicas por la Universidad de Barcelona en 1977, ha sido profesor de física y química en la Escuela Pía de Sitges dando clases en BUP, ESO y bachillerato, colaborando al mismo tiempo en los ICE de la Universidad Politécnica de Cataluña y de la Universidad de Barcelona, siendo además profesor formador del CAP (curso de Aptitud Pedagógica). Miembro de la Junta del Colegio de Doctores y Licenciados de Cataluña durante 16 años. Ha impartido numerosos cursos de formación del profesorado y escrito alrededor de 70 artículos sobre trabajos prácticos de química y de física en diversas publicaciones nacionales y extranjeras. Además, ha colaborado en varios libros de didáctica de la química. Ha ganado cuatro primeros premios y dos menciones honoríficas en el concurso nacional “Ciencia en acción” en demostraciones de química y posee la medalla de *Ciencia en acción* por su trabajo en la divulgación de la ciencia. En 2017 ha ganado el premio *Salvador Senent* de las RSEF y RSEQ. Actualmente es profesor formador del Departament d’Ensenyament de la Generalitat de Catalunya. Es uno de los coordinadores del proyecto de *Química en context* para el bachillerato y es co-



Josep Corominas Viñas

laborador del CESIRE-CDEC (centros específicos para la innovación e investigación educativa) del Departament d’Ensenyament de Catalunya.



Noticias de los Grupos Especializados

Medallas del Grupo Especializado de Química Orgánica de la RSEQ (Convocatoria, 2018)

El Grupo Especializado de Química Orgánica concede anualmente entre sus socios, en convocatoria abierta, las medallas Fèlix Serratosa, la Medalla Ignacio Ribas y la Medalla José Barluenga. Los galardonados para las medallas en la convocatoria 2018 son:

- La medalla Fèlix Serratosa, profesor Albert Moyano.
- La medalla Ignacio Ribas, profesor Diego Peña Gil.
- La medalla José Barluenga, doctora Ángela Sastre Santos.

La ceremonia de entrega de medallas tendrá lugar el 20 de junio en Santiago de Compostela durante la celebración de la XXVII Bienal del Grupo de Química.



Albert Moyano

Diego Peña Gil nació en Santiago de Compostela en 1974. Obtuvo el doctorado en 2001 en la Universidad de Santiago de Compostela (USC), bajo la supervisión de Dolores Pérez y Enrique Guitián. Fue doctorando visitante en la Universidad de Harvard (1999, grupo Eric N. Jacobsen), LMU Munich (2000, grupo Paul Knochel) y UAM Madrid (2001, grupo Antonio Echavarren). Durante los años 2002 y 2003 se incorporó al grupo de Ben L. Feringa (premio Nobel 2016, Universidad de Groningen, Países Bajos) como becario postdoctoral Marie Curie, trabajando

Albert Moyano nació (en el año 1955) y se educó en Barcelona. Se licenció en Química en la Universidad de Barcelona (1978), donde también obtuvo, en el año 1984, el Doctorado en Química Orgánica (Premio Extraordinario), bajo la dirección del profesor Fèlix Serratosa, en el tema de la síntesis de poliquinanos. Después de una estancia postdoctoral en la Universidad "Joseph Fourier" en Grenoble (1985-1986) en el laboratorio del profesor Andrew E. Greene, trabajando sobre cicloadiciones asimétricas, volvió a la Universidad de Barcelona, de la cual es Catedrático de Química Orgánica desde el año 2003. Su actividad científica a lo largo de las últimas cuatro décadas ha involucrado investigaciones sobre química orgánica teórica (orbitales moleculares localizados, teoría de la aromaticidad), en la aplicación de la química organometálica a la síntesis orgánica (desarrollo de versiones enantioselectivas de la reacción de Pauson-Khand), y sobre la síntesis catalítica asimétrica de compuestos biológicamente activos y de metalocenos quirales. En la actualidad, sus líneas de investigación se centran en el desarrollo de nuevos métodos de organocatálisis asimétrica para síntesis orgánica, y en el estudio de la autocatálisis asimétrica y de los procesos que transcurren con ruptura espontánea de la simetría especular. Alberto Moyano coordina desde el año 2009 el Grupo de Investigación en Emergencia, Amplificación y Transferencia de Quiralidad (Grupo de Investigación Consolidado por la Generalitat de Catalunya, 2017 SGR 02), y es Asesor Científico de ENANTIA, una empresa surgida en el año 2003 como spin-off de la Universidad de Barcelona. El Dr. Alberto Moyano es el autor o co-autor de unas 220 publicaciones científicas, incluyendo artículos de revista de investigación original, artículos de revisión, patentes, libros y capítulos de libro, y ha dirigido o co-dirigido 18 Tesis Doctorales, y numerosas Tesis de Máster. Su índice h, actualizado a marzo de 2018, es de 46.

en catálisis asimétrica. En el año 2004 regresó a la USC como investigador Ramón y Cajal y en 2007 recibió el Premio Joven Investigador de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ). Desde 2008 es Profesor Titular en la USC e investigador del CiQUS. En 2015 obtuvo la acreditación a Catedrático. En 2016 obtuvo una beca de movilidad Salvador de Madariaga, realizando una estancia de investigación en CRANN (Trinity College Dublin).

Diego Peña ha publicado más de 70 artículos (>2900 citas, índice h 28), incluidos varios trabajos recientes en

Science y Nature Chemistry. Sus principales intereses en investigación son el descubrimiento de nuevas metodologías sintéticas, la síntesis de grandes compuestos aromáticos, la preparación de materiales de tipo grafeno mediante métodos químicos y el desarrollo de la química orgánica sobre superficie, en colaboración con físicos especialistas en microscopía de fuerza atómica y de efecto túnel.

Ángela Sastre Santos es Catedrática de Química Orgánica de la Universidad de Miguel Hernández de Elche (UMH, 2010) y Subdirectora del Instituto de Bioingeniería de la UMH (2006-). Se licenció Ciencias Químicas (especialidad Química Orgánica) en la Universidad Autónoma de Madrid (UAM) (Junio 1990), donde realizó su tesis doctoral (Junio 1995), bajo la dirección del profesor Tomás Torres, por la que obtuvo el premio extraordinario de doctorado. Después realizó varias estancias postdoctorales, 6 meses (Septiembre 1995-Febrero 1996) en la *École Supérieure de Physique et Chimie Industrielles* (París, Francia, Jacques Simon), año y medio (Marzo 1996-Agosto 1997) en el *Institute for Polymers and Organic Solids, University of California*, Santa Barbara (EE. UU.) y 6 meses (Septiembre 1997-Febrero 1998) en el *Department of Chemistry and Biochemistry, University of California*, Los Angeles (EE. UU.),



Diego Peña Gil



Ángela Sastre

trabajando en ambos casos en el grupo del profesor Fred Wudl y colaborando con el premio Nobel de química 2000, Alan Heeger.

A continuación (Marzo 1998), regresó a la UAM como investigadora contratada por el Ministerio de Educación y Ciencia gracias al subprograma de reincorporación de Doctores en España. En octubre de 1998 se incorporó a la UMH como Profesora Titular de Universidad y en 2010 promocionó a Catedrática de Universidad. En 2001 realizó una estancia de investigación en Kent State University (Kent, Ohio, EEUU) donde colaboró con el premio Nobel de química 2014, William Moerner.

Actualmente dirige un grupo de investigación dentro del Instituto de Bioingeniería de la UMH enfocado principalmente a la síntesis de sistemas moleculares y supramoleculares electroactivos con aplicaciones nano- y biotecnológicas.

Es coautora de más de 130 artículos en revistas científicas internacionales (índice h 32). Es miembro de la *American Chemical Society*, *Electrochemical Society*, *Society of Porphyrins and Phthalocyanines* y de la Real Sociedad Española de Química y de la Real Sociedad Española de Física; dentro de estas últimas, es la presidenta del Grupo Especializado de Nanociencia y Materiales Moleculares (Marzo 2013-). Co-fundadora de la start-up ANFECHM S.L.

Otras noticias

El profesor Luis Oro, Premio Lord Lewis de la Royal Society of Chemistry

El investigador del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Luis Oro, ha recibido el Premio Lord Lewis de la Royal Society of Chemistry “por sus importantes contribuciones en química organometálica y al progreso de la investigación científica y la política de financiación a nivel europeo”. Es la primera vez que esta distinción se concede a un químico no británico.

Luis Oro trabaja en el Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea, un centro mixto entre el CSIC y la Universidad de Zaragoza. El investigador destaca con sus contribuciones en química organometálica y catálisis homogénea y en los últimos años ha dirigido su atención a la activación del dióxido de carbono.

Oro fue distinguido como “Highly Cited Researcher” en la Web of Knowledge. Que es miembro de varias académicas científicas, entre las que destacan la Academia Nacional de Ciencias de Alemania y Francia, es uno de los investigadores más citados en literatura científica.

En el área de política científica, actualmente es miembro del Consejo Rector de la Agencia Estatal de Investigación. Ha sido presidente de la Asociación Europea de Ciencias Químicas y Moleculares y vicepresidente de la



Luis Oro

European Science Foundation. En la Unión Europea fue miembro de la Asamblea Europea de Ciencia y Tecnología. Junto a otros investigadores redactó el documento presentado en el Parlamento Europeo “Chemistry: Developing solutions in a changing world”. En España fue Director General de Investigación Científica y Técnica y Secretario General del Plan Nacional de Investigación.

Premio Lilly “Joven Investigador 2018” al doctor Martín Fañanás Mastral



Martín Fañanás Mastral

La Real Sociedad Española de Química (RSEQ) y Lilly han concedido el Premio Lilly “Joven Investigador 2018” al Doctor Martín Fañanás Mastral, Investigador Ramón y Cajal en el Centro Singular de Investigación en Química Biológica y Materiales Moleculares (CIQUS) de la Universidad de Santiago de Compostela.

Este galardón, que anualmente distingue la excelencia en la calidad científica y en la trayectoria profesional de investigadores españoles menores de 40 años, ha reconocido en esta ocasión un trabajo centrado en el diseño de metodologías sintéticas que permiten la transformación directa, sostenible y eficiente de materias primas simples abundantes, tales como los hidrocarburos, en compuestos más complejos de alto valor añadido.

Martín Fañanás se licenció en Química por la Universidad de Oviedo en 2002 y cursó sus estudios de doctorado en el Instituto de Química Organometálica “Enrique Moles” de la misma universidad, bajo la supervisión de los profesores José Barluenga y Fernando Aznar. Durante sus estudios de doctorado, realizó una estancia en el grupo

del profesor Steve Ley (Universidad de Cambridge, Reino Unido), en la que trabajó en la síntesis total del Benczol A. En noviembre de 2007, recibió el título de doctor con la máxima calificación de sobresaliente “cum laude” y su tesis fue premiada con el Premio Extraordinario de Doctorado de la Universidad de Oviedo. Durante el año 2008 trabajó como investigador postdoctoral en la Universidad de Oviedo y en el año 2011 fue contratado por la Universidad de Groningen dentro del programa CatchBio (consorcio entre universidades y empresas holandesas). Después de este periodo, fue promocionado por la Universidad de Groningen a investigador postdoctoral senior. En octubre de 2014, Martín Fañanás se incorporó como Investigador Ramón y Cajal al Centro Singular de Investigación en Química Biológica y Materiales Moleculares (CIQUS)

de la Universidad de Santiago de Compostela, donde lleva a cabo actualmente su labor científica. Su investigación se centra en el desarrollo de nuevas metodologías catalíticas que permitan transformaciones sostenibles y de alta eficiencia atómica orientadas a la formación enantioselectiva de enlaces C-C, funcionalización de hidrocarburos y síntesis de compuestos de fósforo biológicamente activos. Como resultado de su carrera científica, Martín Fañanás Mastral ha publicado 55 artículos en algunas de las revistas más prestigiosas y de mayor índice de impacto en su campo y su trabajo ha sido presentado en diversos congresos internacionales (20 conferencias, 11 de ellas invitadas). Recientemente, ha sido galardonado con el premio “Thieme -3- Chemistry Journal Award 2015” y con el “Premio Sigma-Aldrich 2016 a Jóvenes Investigadores”.

La doctora Nuria Martínez Sáez ganadora del premio Young Investigator Award 2018 (ICO)



Nuria Martinez Saez

La Organización Internacional de Carbohidratos (ICO) ha otorgado el premio “Young Researcher Award, 2018” a la doctora. Nuria Martínez Sáez, de la Universidad de Utrecht, Países Bajos. La Organización Internacional de Carbohidratos estableció este premio en 2014 para reconocer los mejores logros en cualquier aspecto de la glicoquímica y/o glicobiología. El premio le será entregado en el próximo Simposio Internacional de Carbohidratos (ICS), que se celebrará en Lisboa, los días 15-19 de julio de 2018.

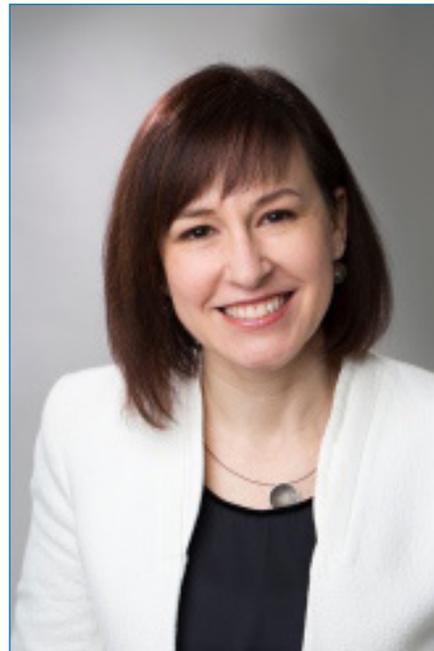
La doctora. Nuria Martínez Sáez (1986) estudió Química en la Universidad de La Rioja donde completó sus estudios de doctorado (2013) con los profesores Jesús Manuel Peregrina y Francisco Corzana. Tras una estancia postdoctoral en el grupo del Dr. Gonçalo Bernardes en la Universidad de Cambridge (2014-2016), se trasladó a la Universidad de Utrecht como Marie Skłodowska Curie Fellow en el grupo del profesor Geert-Jan Boons. Su trabajo se centra en el desarrollo de vacunas antimicrobianas basadas en carbohidratos.

Belén Martín-Matute Premio Göran Gustafsson 2018

Belén Martín-Matute, catedrática de Química Orgánica de la Universidad de Estocolmo ha sido galardonada con el premio Göran Gustafsson 2018 en el área de química por el desarrollo de nuevos métodos de catálisis organometálica. El premio es concedido por la fundación Göran Gustafsson y la Real Academia de las Ciencias Suecas con el objetivo de promover la investigación básica en biología molecular, física, química, matemáticas y medicina.

Belén Martín-Matute obtuvo su doctorado en la Universidad Autónoma de Madrid. Tras una estancia postdoctoral en el grupo del profesor J. E. Bäckvall en la Universidad de Estocolmo, fue nombrada Profesora Titular en 2008 y Catedrática en 2014.

Sus intereses de investigación incluyen el desarrollo de reacciones catalizadas por metales de transición homogéneas y heterogéneas, eficientes y selectivas para la construcción de enlaces carbono-carbono y carbono-heteroátomo, y la catálisis heterogénea mediante el uso de estructuras metalo-orgánicas (MOFs). Recibió el Premio de Investigadores Noveles de la Real Sociedad Española de Química en 2007 y el Premio Lindbomska de la Academia de las Ciencias de Suecia en 2013.



Belén Martín-Matute

Concepción Gimeno Medalla de las Cortes de Aragón 2018



Concepción Gimeno

Concepción Gimeno, ha sido galardonada con la Medalla de las Cortes de Aragón. Con este galardón, las Cortes quieren reconocer el “esfuerzo de todo un colectivo para el progreso de la Comunidad Autónoma, y en pos del avance y el desarrollo de la humanidad”.

María Concepción Gimeno es investigadora del Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea de Zaragoza. En 2017, fue reconocida como una de las doce mejores químicas del mundo y galardonada como “Mujer Distinguida en Química” por la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada. Lleva años dedicada al estudio de los compuestos, fundamentalmente oro y plata, buscando propiedades especiales para su aplicación, por ejemplo, en medicina, como antitumorales o antibacterianos. Ha sido galardonada con el Premio a la Excelencia Investigadora de la RSEQ, 2018.

II Jornada La Ciencia tiene nombre de Mujer

En su segundo año consecutivo, la Universidad Miguel Hernández de Elche (UMH) se ha querido sumar a conmemorar el Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia, y el pasado 26 de febrero se celebró la II Jornada “La Ciencia tiene nombre de Mujer” en la que participaron más de doscientas chicas y chicos de Institutos y de la propia universidad, y una centena de profesores.

Desde su proclamación en 2015 por la Asamblea General de las Naciones Unidas, todos los 11 de febrero desde el año 2016 se celebra a nivel mundial el Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia. Gozando desde su inicio de una buena acogida en nuestro país, son muchas las actividades que se han organizado en diversos puntos de nuestra geografía, difundiendo muchas de ellas a través del blog 11defebrero.org (<https://11defebrero.org/>), el cual recoge material, noticias, e informes sobre la situación de la Mujer en la Ciencia y canaliza las diversas iniciativas para celebrar este día. Dentro de las disciplinas STEM (*Science, Technology, Engineering and Mathematics*), las ingenierías son posiblemente las que tienen un menor porcentaje de mujeres, tanto a nivel de estudiantes de Grado como de profesionales que las ejercen. Por ello, esta segunda edición la hemos querido centrar en las ingenierías con el objetivo de mostrar referentes femeninos en estas áreas, alentado así a que las chicas (y también los chicos) se acerquen a estas disciplinas sin estereotipos. Pero esta jornada no iba dirigida únicamente

al público joven de secundaria y bachillerato, sino también a sus profesores, quienes juegan un papel importante a la hora de guiarles en la elección de estudios. Por ello, la sesión de la tarde ha sido parte de un curso del CEFIRE para la formación del profesorado de Educación Secundaria en temas de género. El programa incluyó talleres tecnológicos y breves conferencias: unas divulgativas y otras para relatar experiencias personales como mujer e ingeniera.

En la fotografía, las organizadoras de esta 2.^a edición (M.^a José Alarcón, Purificación Heras, Cristina Mora, Ángela Sastre y M.^a del Mar Sánchez) junto a las conferenciantes de la jornada. Esta 2.^a edición no hubiese sido posible sin la financiación de la Unidad de Igualdad y del Vicerrectorado de Investigación e Innovación de la UMH. Agradecemos asimismo el apoyo recibido de la RSEQ y la RSEF a través de su sección territorial y local, respectivamente, y del grupo especializado de Nanociencia y Materiales Moleculares, del Instituto de Bioingeniería y de los departamentos de la UMH que han organizado los talleres, en particular agradecemos a las profesoras Julia Arias y Susana Fernández de Ávila la coordinación de los mismos.

Esperamos que esta 2.^a edición haya despertado en las jóvenes asistentes vocaciones en ingeniería y haya contribuido a romper estereotipos. Las conferencias del evento pueden seguirse en: <https://www.youtube.com/playlist?list=PLCIKGnzRFYe7upvEixX7BysVMpJbIdvyW>



M.^a DEL MAR SÁNCHEZ LÓPEZ
Universidad Miguel Hernández
ÁNGELA SASTRE SANTOS
Universidad Miguel Hernández

De izquierda a derecha, Sirona Valdueza, Fátima Sánchez, Cristina Mora, Nuria Solsona, Purificación Heras, M.^a José Alarcón, Ángela Sastre, Presidenta del grupo especializado de Nanociencia y Materiales Moleculares de la RSEQ y de la RSEF, M.^a Luz Rodríguez, Carmen Vázquez y M.^a del Mar Sánchez López, Presidenta de la Sección Local de Alicante de la RSEF

Manuel Bernabé Pajares

In memoriam

El pasado 13 de abril fallecía en Madrid Manuel Bernabé Pajares, profesor de investigación del CSIC, a los ochenta y dos años de edad. Pertenecía al grupo de investigadores que, ingresados en el organismo en los últimos sesenta y los primeros setenta del pasado siglo, fue testigo de la importante transformación que experimentó nuestro sistema de ciencia y tecnología en los años ochenta y, desde el CSIC, participó activamente en ella. Nacido en Huelva en 1936, fue siempre un andaluz en ejercicio a pesar de haber estudiado y desarrollado toda su carrera en Madrid. Hijo de maestro nacional represaliado tras la Guerra Civil, tuvo durante toda su vida una actitud profundamente tolerante, liberal, abierta y progresista. Dotado de una fina inteligencia y una natural bonhomía, fue, para varias generaciones, un científico reconocido y un compañero especialmente querido y respetado.

Manolo Bernabé obtuvo la licenciatura en Ciencias Químicas por la Universidad Complutense en 1962 y realizó su tesis doctoral en el Instituto de Química del Patronato Juan de la Cierva –heredero del Instituto “Alonso Barba”, que luego se convertiría en el Instituto de Química Orgánica General– bajo la supervisión de Eldiberto Fernández Álvarez. En aquellos años, una de las áreas de investigación prioritarias en el Instituto, dirigido aún por don Manuel Lora que sería nombrado ministro aquel mismo año, era la química médica y, dentro de ella, el grupo que lideraba Fernández Álvarez estaba enfocado en la búsqueda y la preparación de inhibidores de enzimas relacionadas con el sistema nervioso central, en particular la monoamino oxidasa (MAO) y la catecol O-metil transferasa (COMT). Bernabé, llevó a cabo la síntesis de una serie de indolil hidrazidas y estudió su actividad como inhibidores de MAO. Defendió su tesis en la misma Universidad Complutense en 1965, ingresó como colaborador científico del CSIC en 1966 y, entre 1968 y 1970, realizó estudios postdoctorales en el laboratorio de Alfred Burger –uno de los padres fundadores de la química médica y que había puesto en marcha el *Journal of Medicinal Chemistry* en 1958– en la Universidad de Virginia, en Charlottesville. Tras esta experiencia americana se reintegró al Instituto de Química Orgánica General en 1971, año en que promocionó a investigador científico, y allí –en el grupo de Fernández Álvarez que había pasado a ser la sección de Enzimoquímica– continuó sus trabajos en la misma línea general de investigación que se amplió con un nuevo tema sobre síntesis de sustratos e inhibidores de la descarboxilasa de aminoácidos aromáticos en la que también participó activamente. Además de los conocimientos de química médica, Bernabé aportó –al



De izquierda a derecha, Manuel Bernabé junto a Manuel Martín Lomas y Jesús Jiménez Barbero en 2017, cuando se le entregó la medalla de la RSEQ de los 50 años

grupo y, en general al Instituto, a su regreso de los Estados Unidos– un conocimiento muy superior al usual entre los químicos orgánicos de aquel tiempo en la aplicación de la espectroscopía de RMN a la determinación estructural de moléculas orgánicas. Con un espectrómetro de 60 MHz era capaz de descubrir y descifrar sutilezas estructurales que hubiese llevado muchas horas de trabajo resolver por métodos convencionales y esto contribuyó a aumentar su prestigio y su popularidad en aquel entorno químico de la calle Serrano.

En 1974 se creó el Instituto de Química Médica, dirigido por Ramón Madroño, al que se trasladó toda la actividad del Instituto de Química Orgánica en esta área con la excepción de la que realizaba la sección de Enzimoquímica, que continuó adscrita al Instituto de Química Orgánica. Aquel mismo año uno de nosotros, con un bagaje inicial en química de hidratos de carbono, se incorporó a la sección y trató de establecer allí proyectos relacionados con la síntesis, la estructura y la actividad de oligosacáridos de interés biológico. Uno de estos proyectos, nacido de la curiosidad por indagar en los productos secundarios de la reacción de glicosilación usando la modificación de Helferich de la reacción de Königs-Knorr, se centró en el análisis conformacional de derivados 1,2-cianoetilidénicos de piranosas y, por extensión, de derivados bicíclicos de monosacáridos constituidos por anillos piranoides fusionados en 1,2-cis con ciclos de dioxolano. Manolo Bernabé, sin abandonar su línea de investigación sobre inhibidores enzimáticos, se interesó inmediatamente en este tema y se hizo cargo del registro, el análisis y la interpretación de los espectros de RMN. Con la ayuda de la difracción de ra-

yos X, que aportaron Félix H. Cano y Conchita Foces en el Instituto "Rocasolano", analizó las conformaciones de un buen número de compuestos y llegó establecer las pautas de su comportamiento. En estos trabajos, que se extendieron durante varios años, Bernabé utilizó la espectroscopía de RMN a un alto nivel técnico, algo poco frecuente entre los químicos orgánicos de la época –uso de equipos de alto campo, métodos computacionales iterativos para analizar los espectros, espectroscopía a temperatura variable, medidas de efectos Overhauser nucleares, determinación de constantes de acoplamiento heteronucleares $^3J_{C,H}$ por métodos bidimensionales, cálculos de mecánica molecular– e hizo una serie de interesantes aportaciones como la asignación de la quiralidad de centros asimétricos a partir de los ángulos configuracionales cristalográficos, el análisis crítico de la idoneidad de diferentes ecuaciones de Karplus para calcular los ángulos de torsión en este tipo de sistemas bicíclicos a partir de las constantes de acoplamiento vecinales homonucleares $^3J_{C,H}$ o la evidencia experimental de importantes desviaciones de una relación tipo Karplus de las constantes de acoplamiento vecinales heteronucleares $^3J_{C,H}$ con la orientación y la electronegatividad de los sustituyentes en derivados de hidratos de carbono conformacionalmente rígidos.

Estas investigaciones tuvieron una importante vertiente formativa y un buen número de doctorandos –comenzando por uno de los autores de este artículo– se iniciaron, tras una educación inicial en química orgánica, en la aplicación de la espectroscopía de RMN a la elucidación de estructuras complejas. Por otra parte, los conocimientos y la experiencia adquiridos permitieron encarar, un poco más adelante, temas estructurales de mayor complejidad inspirados en los estudios que entonces llevaba a cabo Ray Lemieux sobre reconocimiento molecular en complejos carbohidrato-proteína en los que, con un riguroso conocimiento de la estructura tridimensional de los oligosacáridos implicados, se utilizaba una estrategia basada en el reemplazamiento de grupo funcional para diseccionar la contribución de los grupos hidroxilo individuales a la energía libre de enlace en el complejo. Bernabé, con la maestría adquirida en el uso de la espectroscopía de RMN, jugó un papel crucial en el arranque y el desarrollo de estos trabajos y también en los que, casi simultáneamente, puso en marcha Soledad Penadés sobre reconocimiento molecular con receptores artificiales que después derivaría hacia estudios sobre la interacción carbohidrato-carbohidrato y que tendría luego un largo recorrido.

Los trabajos mencionados, realizados en las décadas de los ochenta y los noventa, fueron esenciales para consolidar en Madrid la investigación sobre estructura y reconocimiento molecular de hidratos de carbono pero en modo alguno constituyeron las únicas contribuciones de Bernabé

en aquellos años. Durante algún tiempo continuó sus trabajos en el área de la química médica –si bien con un mayor énfasis en aspectos estructurales y mecánicos– e hizo un buen número de aportaciones sobre la síntesis estereoselectiva de ciclopropil y ciclopropenil aminoácidos y ciclopropilglicinas y sobre la stereoquímica de oxazolonas y espirooxazolonas, aunque sus contribuciones más interesantes no se centraron en este campo sino en el de la aplicación de la espectroscopía de RMN en el complicado mundo de la estructura de polisacáridos. Sin conocimientos previos en la espectroscopía de biomacromoléculas pero haciendo uso de la sólida experiencia adquirida en los estudios previamente mencionados, se embarcó, en una colaboración con el laboratorio de Juan Antonio Leal, del Centro de Investigaciones Biológicas, en un extenso programa sobre polisacáridos de hongos en los que consiguió aportar datos estructurales precisos que fueron de singular importancia en estudios taxonómicos y de evolución.

Bernabé se jubiló en 2006 pero aún permaneció activo durante algunos años como profesor de investigación *ad honorem*. En ese tiempo continuó trabajando en el proyecto de los polisacáridos de hongos, colaboró en proyectos sobre estructura y reconocimiento molecular de hidratos de carbono dirigidos por uno de nosotros, mantuvo vivas algunas de sus colaboraciones anteriores –particularmente una de larga duración con el laboratorio de Antonio Ballesteros, en el Instituto de Catálisis, sobre acilación enzimática de azúcares– y estableció otras varias porque siempre estuvo abierto y dispuesto a colaborar en la resolución de un problema estructural que pudiese surgir y requiriese su saber y su experiencia. Era su costumbre acudir todos los días puntualmente al laboratorio de RMN del Centro Nacional de Química mucho antes de las ocho de la mañana, con un puñado de muestras preparadas el día anterior, para poder aprovechar al máximo el tiempo de utilización de los equipos antes de que llegasen los técnicos encargados del servicio y dedicar luego el día a analizar los espectros, interpretar los resultados y programar el trabajo experimental de la mañana siguiente.

Manolo Bernabé estuvo casado desde 1967 con Amelia Lara, andaluza también, que ha sido su fiel e inseparable compañera durante más de cincuenta años, su apoyo en los muchos momentos difíciles y la madre de su hijo, otro Manolo Bernabé, licenciado en Ciencias Exactas, que, siguiendo la tradición de su abuelo, enseña matemáticas también. A ellos nos unimos en el dolor por su pérdida en nombre propio y en el de todos los compañeros que a lo largo de tantos años tuvimos la fortuna de conocerle, convivir y trabajar con él.

JESÚS JIMÉNEZ BARBERO
MANUEL MARTÍN LOMAS

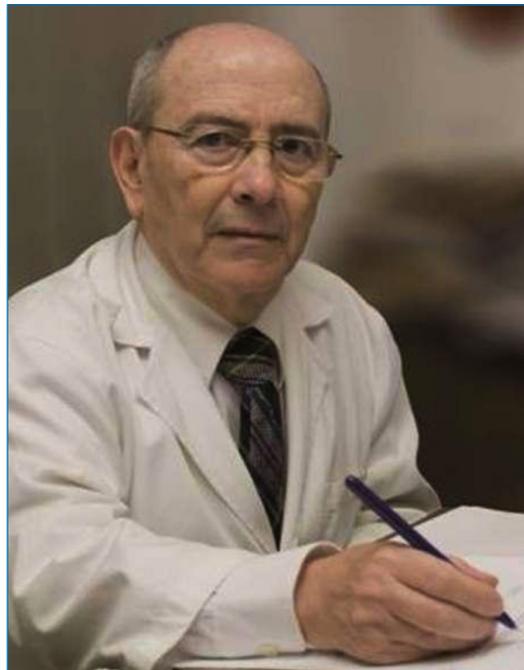
Julio Casado Linarejos

In memoriam

El pasado día 2 de abril falleció el catedrático de Química Física don Julio Casado Linarejos. Nacido en Palencia en el año 1939, se doctoró en Ciencias Químicas por la Universidad de Valladolid en 1965 y posteriormente realizó una estancia postdoctoral con el profesor Børge Bak en la Universidad de Copenhague sobre Espectroscopia de Microondas. A su regreso, y ya como profesor Adjunto en la Universidad de Valladolid, estableció el primer laboratorio de microondas en España. En el año 1973, con tan solo 34 años, fue nombrado catedrático de Química Física de la Universidad de Santiago de Compostela, donde trabajó más de una década, dejando una imborrable huella, tanto en el ámbito científico como académico, creando un grupo de investigación en cinética química de reconocido prestigio internacional. Son de destacar además, durante su período en la Universidad de Santiago, sus labores como Vicerrector y Director del ICE (Instituto de Ciencias de la Educación). Posteriormente se trasladó a la Universidad de Salamanca, donde creó un grupo de investigación sobre los mecanismos de formación de compuestos bioactivos. Recibió la Medalla de Investigación de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) en 1992 y el Premio de Investigación Aldrich Química. Fue miembro de la Junta de Gobierno de la RSEQ, de la Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora (CNEAI) y Director de la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva (ANEP) durante el período 1996-2000.

Este palentino de nacimiento, gallego de adopción y ciudadano del mundo, que se relacionaba con la misma simpatía con gentes de todas las clases sociales y de todas las ideas políticas, dejó un honda huella en cada persona que tuvo la fortuna de relacionarse con él. Y eso en todos los momentos y actividades de su vida. Sus alumnos en la universidad le consideraban como uno de los mejores docentes, e incluso aquellos alumnos a los que la disciplina de la Química Física les resultaba bastante difícil de asimilar, reconocían su gran dedicación en la preparación cuidadosa y amena de sus clases. Gracias a sus amplios conocimientos en todas las áreas, sus conferencias –de toda índole– eran realmente magistrales y sorprendían por citar tanto a clásicos, como Cicerón o Sócrates, como a su admirado Ortega, pero también figuraban filósofos, científicos, escritores, historiadores, etc. que venían a aportar tanto rigurosidad y profundidad, como frescura y amenidad a sus exposiciones. Su especial característica de gran conversador la mantuvo hasta el final, incluso cuando la enfermedad le inmovilizó entre las cuatro paredes de su piso, totalmente abigarrado de libros.

“Uno de los logros mas impresionantes de la mente humana ha sido ese conocer lo que no vemos; tanto en el ámbito de lo infinitamente pequeño como de lo infini-



Julio Casado Linarejos

ta-mente grande” decía el profesor Casado en una de sus conferencias sobre la Química y las Ciencias de la Vida, hace apenas una década. Y añadía la frase de Ortega “...es la vida un proceso químico en cadena, cada una de cuyas reacciones dispara inevitablemente la sucesiva hasta recorrer la serie predeterminada y fatal. Desde el primer momento, como un móvil en su trayectoria, va la vida lanzada a su consumación... No cabe variar el proceso inexorable: sólo es posible artificialmente frenarlo, hacer que cada reacción tarde más en producirse...” Y pareciera como si en aquellas palabras presintiera lo que iba a estar haciendo durante sus últimos años en su continuada guerra personal con la enfermedad, hasta que plácidamente, como si entrase en un sueño, dejó que la cinética agotase totalmente sus reactivos y llegara a su final. Detrás queda una larga vida de dedicación y formación de varias generaciones de químicos que nunca olvidarán todo lo que aprendieron, tanto científica como humanamente, de este gran maestro y profesor, que nunca renunció a hacer ciencia e investigación de calidad, aún cuando los medios eran muy escasos; así como a transmitir el empeño por la rigurosidad y el buen hacer en todas las tareas de la vida. Y también deja la estela de lo que significa una amistad profunda en todos los que llegaron a conocerle. Que su alma descanse en paz.

M. ARTURO LÓPEZ-QUINTELA

Helmuth Möhwald

In memoriam

El pasado 27 de marzo, a la edad de 72 años, nos dejó el profesor Helmuth Möhwald. El profesor Möhwald había sido hasta 2014 director del Departamento de Interfases del Max Planck Institute (MPI) for Colloids and Interfaces en Potsdam-Golm (Alemania) centro de referencia internacional que él mismo fundó en 1993 junto a otros MPI directors. El profesor Möhwald seguía en activo: dirigía un grupo emérito en el MPI, asistía regularmente a conferencias y seminarios para apoyar a colegas (en especial jóvenes investigadores) y desarrollaba labores editoriales en varias revistas de gran prestigio, por ejemplo como Editor Asociado en la revista ACS Nano.

Su vocación por impulsar la investigación a nivel global ha tenido por supuesto calado también en nuestro país, siendo reconocido con el Premio Elyuhar-Goldschmidt de la RSEQ en 2014. El profesor Möhwald ha sido siempre un investigador diferente, de esas personas únicas en el mundo que presentan nuevos conceptos en todos sus trabajos. El profesor Möhwald es una de las principales referencias en la ciencia de Coloides e Interfases a nivel internacional. Estableció ideas gracias a las cuales hemos entendido el comportamiento de monocapas de moléculas anfifílicas, con perspectivas tecnológicas y biológicas. De las monocapas a las multicapas de surfactantes y polímeros, le debemos la fabricación y caracterización de dispositivos orgánicos con un gran número de funcionalidades y aplicaciones. El profesor Möhwald siempre dirigió su investigación hacia la generación de conocimiento químico-físico, de los cuales vinieron aplicaciones técnicas de forma espontánea.

De 2010 a 2013, tuve la suerte de trabajar con el profesor Möhwald en el MPI como becario postdoctoral Humboldt. Con el paso del tiempo, cada día le he estado más agradecido. Sin duda le debo mucho de lo que ahora soy. Cada discusión con él me dejaba la sensación de haber asistido a un pensamiento genial, a esa visión diferente tan difícil de alcanzar. Creo que muy pocos investigadores nos quedarán como él, con esa visión tan integral, tan profunda, que se reclama ahora como ideal. El profesor Möhwald se enorgullecía, por encima de sus publicaciones, patentes, o métrica al uso, del número de investigadores que nos hemos formado con él y obtenido posiciones estables como investigadores: casi un centenar de



Helmuth Möhwald

profesores e investigadores repartidos por todo el mundo hemos pasado por su escuela.

En absoluto descuidó el resto de apartados: el profesor Möhwald publicó más de 1.000 artículos en revistas de prestigio, recibió más de 63.000 citas, obteniendo un índice-h de 126. Además del Premio Elyuhar-Goldschmidt de la RSEQ mencionado anteriormente, obtuvo recientemente la Medalla Overbeek de la Sociedad Europea de Coloides e Interfases, el Premio Gay-Lussac del ministerio francés de ciencia y tecnología, el “Langmuir Lectureship Award” de la American Chemical Society y el “Distinguished Scientist” de la Chinese Academy of Sciences.

Profesor Möhwald, queremos reconocer y agradecer tu legado. Dejas una escuela que intentaremos honrar con el mejor trabajo que sepamos hacer.

JUAN JOSÉ GINER-CASARES
Secretario del Grupo Especializado de Coloides
e Interfases (GECI) de la Real Sociedad de Química (RSEQ)
y Real Sociedad de Física (RSEF)

Entre la Alquimia y la Química

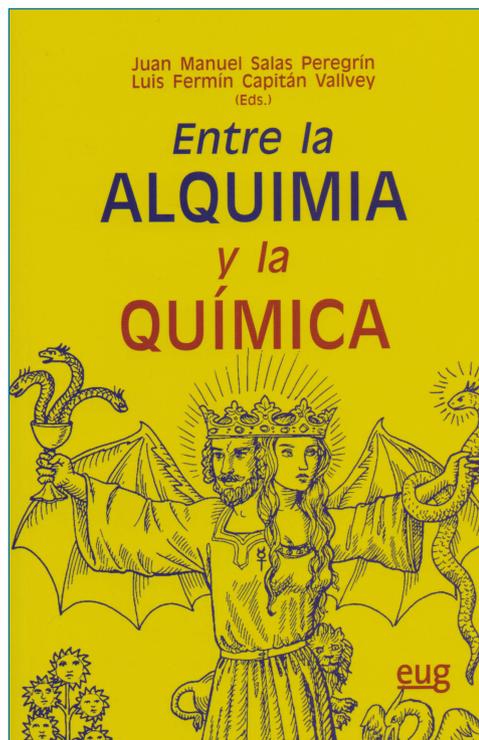
Libro que recoge cuatro conferencias relacionadas con diferentes temas de Historia de la Química que se celebraron en la Universidad de Granada y una sobre Química en los tiempos actuales de la Universidad de Alcalá de Henares.

El primer capítulo: conferencia pronunciada por el profesor Capitán Valley con el título “Químicos y alquimistas” es una historia completa de la Alquimia que comienza en el siglo IV a.C. y termina en el siglo XVIII aunque durante este largo período ha pasado por diferentes enfoques pero tienen en común la transmutación de los metales. Hace un interesante resumen de las distintas etapas: Greco-egipcia, Árabe, Medieval Cristiana y Renacentista.

El segundo capítulo: conferencia del profesor Bermejo Patiño sobre “Antonio Lavoisier: mi visión de su obra”. Después de una detallada biografía de Lavoisier y de su esposa Marie Anne Paulze describe todas las aportaciones que Lavoisier hizo a la Química: contribuir a la demolición de la teoría del flogisto, demostrar que el agua, la tierra y el aire no eran elementos, indicando los experimentos que le permitieron esta conclusión. Participar en la invención de la nomenclatura química. Escribir con la ayuda de su esposa en 1789 el famoso *Traité Elementaire de Chimie*. Insiste en la importancia que le daba al trabajo en equipo y a tener buenos libros. Por último, describe la muerte de Lavoisier y la influencia de Anne en la reivindicación de la figura de su marido.

La conferencia del profesor Román Polo “Espionaje y azar en el aislamiento del wolframio” es el tercer capítulo y contiene una detallada biografía de los hermanos Delhuyar, con cuadros de los hechos más importantes. Explica cómo se aisló el wolframio, hecho que fue presentado el 4 de marzo de 1784 en la Real Academia de Ciencias, Inscripciones y Bellas Letras de Toulouse y recogido en las principales revistas científicas de Alemania, Francia, Gran Bretaña, Italia y Suecia. A Juan José Elhuyar lo destinaron al Reino de Nueva Granada (Colombia) en lugar de haber aprovechado sus importantes conocimientos en química y minería para la fabricación de cañones en España. Falleció a los 42 años en Santa Fe de Bogotá.

“De átomo para la guerra a Átomos para la paz. Uso político y repercusión mediática en el Franquismo (1945-1965)”, conferencia del profesor Mateo Alarcón, es el capítulo cuarto y describe los hechos entre 1942 y 1945 con el título de átomos para la guerra, explicando el proyecto Manhattan y el lanzamiento de la bomba atómica. Hace un estudio detallado de la campaña internacional sobre átomos para la paz. Por último, un tercer apartado se refiere a Átomos para la paz en España y la creación en 1948 de la Junta de Investigaciones Atómicas que en 1951 fue reemplazada por la Junta de Energía Nuclear con Otero Navasquez dependiente del Ministerio de Industria.



“Química en la época del antropoceno” del profesor García Martínez, es el último capítulo, describe su trabajo en el tema de nanopartículas y lo que supuso trabajar en el MIT; y la creación de una empresa que revolucionó la madera de producir combustibles mejores y más baratos. Al final dejó la empresa y se incorporó de profesor a la Universidad de Alicante. Hace gala de su formación en la que sin duda ha influido por un parte los problemas que tuvo que resolver en la empresa y por otra parte la lectura de libros fundamentalmente el de Primo Levi. Habla de los peligros actuales como el repunte del odio nazi y el fanatismo religioso debido a los problemas económicos pero piensa que nunca ha habido tantos medios para ser científico como en la actualidad.

Todos estos temas descritos con rigor por especialistas en la materia hacen que el libro sea recomendable para personas de distintas edades y niveles interesadas por la Historia de la Ciencia o por la situación actual de la Química.

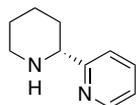
Los profesores Salas Peregrin y Capitán Valley merecen la enhorabuena por organizar estas conferencias y gestionar que las publicara la Universidad de Granada.

MANUELA MARTÍN SÁNCHEZ
mmartins@ucm.es



New Building Blocks for Chemical Synthesis

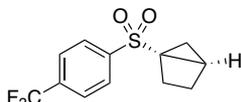
To complement the myriad building blocks we offer synthetic chemists, we have collaborated with academic and industrial innovators to bring you the newest building blocks to explore new chemical and synthetic space. New scaffolds, reactivities, and dimensional orientations open the possibilities for synthesis.



900589

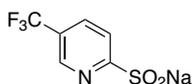
Explore 3D Chemical Space

Interrogate 3D chemical space with our offering of new chiral building blocks from Liverpool ChiroChem. These enantioenriched heterocycles contain a variety of interesting substituents and chemical handles to allow for easy synthetic manipulation and elaboration during hit identification (**900589**).



ALD00574

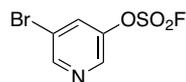
Incorporate the privileged propellane 3D motif to your hits and leads with propellamine (**ALD00504**), popularized for synthetic use by Prof. Phil Baran. Strain-release chemistry developed in the same lab also allows for incorporation of cyclobutyl- and enantioenriched cyclopentyl motifs (**ALD00574**).



900760

Cross-Couple 2-Pyridyl Nucleophiles with Ease

Prone to protodeboronation, 2-pyridyl boronic acid derivatives have always required special consideration in Suzuki-Miyaura type cross-coupling. Working with Prof. Michael Willis, we introduced a collection of 2-pyridyl sulfonates (**900760**) that undergo cross-coupling at high yield under moderate reaction conditions.



ALD00580

SuFEx: Building Blocks for the 'Next Click Reaction'

In collaboration with Prof. Barry Sharpless and Lyn Jones, we have introduced over 100 sulfonyl fluoride-containing building blocks (**ALD00580**) for the SuFEx reaction. These stable reagents react chemoselectively with nucleophiles, and their context-selective reactivity make them ideal warheads for chemical probes.

To view these and other new products, visit SigmaAldrich.com/newchemistry.

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the U.S. and Canada.

© 2017 Merck KGaA, Darmstadt, Germany and/or its affiliates. All Rights Reserved. Merck, the vibrant M, and Sigma-Aldrich are trademarks of Merck KGaA, Darmstadt, Germany or its affiliates. All other trademarks are the property of their respective owners. Detailed information on trademarks is available via publicly accessible resources.

2017 - 08567 12/2017

MERCK