



QUÍMICA

NUEVO CATALIZADOR MÁS SOSTENIBLE

para la industria de química fina

Instituto de Tecnología Química (UPV-CSIC)

Un grupo de investigación del Instituto de Tecnología Química (ITQ), centro mixto de la Universitat Politècnica de València (UPV) y el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), ha desarrollado un proceso para obtener benzimidazoles, compuestos orgánicos muy utilizados en la industria de química fina, de forma más sostenible. Se trata de la primera vez que se obtienen estos compuestos a partir de dinitroarenos mediante una ruta catalítica en presencia de hidrógeno molecular, lo que supone una estrategia sintética más sostenible desde el punto de vista medioambiental. De esta forma, se han obtenido más de 40 compuestos, entre ellos, dos con actividad biológica muy utilizados en la industria farmacéutica y agroquímica.

Estos compuestos son el Diabazol, un fármaco espasmolítico, vasodilatador e hipotensor con beneficios cardiovasculares; y Fuberidazol, compuesto químico utilizado en fungicidas. Se han obtenido a partir de reacciones secuenciales «en tándem», que permiten la obtención de benzimidazoles de un modo mucho más compacto y eficiente, generando una cantidad inferior de subproductos y con un menor consumo energético. El nuevo proceso se ha publicado en la revista de acceso abierto *JACS Au*.

Para sintetizar benzimidazoles, el equipo del ITQ liderado por el profesor de investigación del CSIC, Avelino Corma, utilizó un derivado del disulfuro de molibdeno, mineral compuesto de azufre y molibdeno, como catalizador, es decir, como sustancia para modificar la velocidad

de la reacción química y conseguir que esta se produzca.

Para preparar el catalizador, usaron una estrategia innovadora: a diferencia del mineral, en el que su disposición en láminas apiladas hace que las reacciones químicas se den principalmente en las zonas accesibles y con defectos estructurales, es decir, en los bordes, el equipo del ITQ utilizó entidades moleculares de estructura definida de cuyo ensamblaje resultó un material con un gran número de centros activos distribuidos en toda su estructura, esto es, lugares donde se produce la reacción catalítica.

«Este material se ha aplicado como catalizador heterogéneo para el diseño de un nuevo proceso catalítico focalizado en la síntesis de benzimidazoles, y se ha demostrado que presenta una actividad catalítica infinitamente mayor que los catalizadores de disulfuro de molibdeno distribuidos comercialmente», describe Iván Sorribes, investigador del Plan Gen-T de la Generalitat Valenciana en el ITQ que lidera este trabajo. Además, destaca que «se trata del primer proceso catalítico diseñado para preparar benzimidazoles por acoplamiento reductivo entre dinitroarenos y aldehídos en presencia de hidrógeno molecular».

La preparación de benzimidazoles se lleva a cabo a partir de compuestos que se pueden obtener por reducción de compuestos dinitroarenos. Su utilización como reactivos de partida permite reducir el número de etapas sintéticas y, en combinación con el uso de hidrógeno molecular





(considerado el agente reductor más benévolo), se consigue minimizar costes e impacto medioambiental del proceso. Esta metodología no se había aplicado con anterioridad debido a la falta de catalizadores para llevar a cabo esta transformación de forma eficiente.

Productos orgánicos de alto valor añadido

Los benzimidazoles son productos orgánicos con un elevado valor añadido en la industria de química fina, aquella donde se producen cantidades limitadas de productos cuyos precios son más altos. Así, tras la adecuada optimización de las condiciones de la nueva reacción, el grupo del ITQ ha logrado la síntesis de más de 40 ben-

zimidazoles de diferente naturaleza. «En comparación con los procesos sintéticos publicados hasta la fecha, la ruta catalítica utilizada en este trabajo representa una estrategia sintética mucho más sostenible desde el punto de vista medioambiental», explica Sorribes.

Para el investigador, «los resultados obtenidos contribuirán a implementar en la industria procesos más selectivos, energéticamente eficientes y respetuosos con el medio ambiente, que reduzcan el uso de reactivos tóxicos y promuevan una mejor utilización de las materias primas. Es decir, a un futuro más sostenible en la producción de las industrias de química fina», finaliza.

Investigadores del Laboratorio NANOMOL de la UA y autores del artículo. De izquierda a derecha: Erika De Oliveira, Mónica J. Mendoza, Javier García-Martínez y Noemí Linares.



FAMILIA DE CATALIZADORES que mejora numerosos procesos químicos

El Laboratorio de Nanotecnología Molecular (NANOMOL) de la Universidad de Alicante (UA) ha desarrollado una nueva familia de catalizadores con propiedades «a la carta» que pueden fabricarse con las características idóneas para diversos procesos químicos. Estos catalizadores no sólo han mostrado mejoras considerables en la producción de combustibles y otros productos intermedios farmacéuticos, sino que su preparación resulta más sencilla y sostenible que las alternativas actuales. Además, sus características se pueden modificar con gran precisión para adecuarlos a las necesidades de cada proceso. El descubrimiento patentado ha sido publicado en la prestigiosa revista *Journal of the American Chemical Society*.

En concreto, los investigadores han diseñado un nuevo material que combina las características de varias zeolitas. Las zeolitas, tanto naturales como artificiales, son extremadamente útiles como catalizadores con multitud de aplicaciones en la industria química. Sin embargo, una de sus grandes limitaciones es que no permiten la con-

versión de moléculas voluminosas, ya que su estructura está formada por poros muy estrechos. Gracias a la nueva tecnología desarrollada por los investigadores de la UA es posible preparar un material con prestaciones técnicas mejoradas que aúna las excelentes propiedades de distintas zeolitas en un mismo sólido. Para ello, el equipo de trabajo ha utilizado un procedimiento que consiste en la transformación de unas zeolitas en otras más estables. Mediante el control de esta conversión, los investigadores han conseguido aunar en un solo material las características de varias zeolitas, lo que representa un avance único en este campo.

Como indica el catedrático de Química Inorgánica de la UA y director de NANOMOL, Javier García-Martínez, «estos nuevos catalizadores constituyen una oportunidad excepcional para mejorar los procesos químicos que involucran la transformación de moléculas voluminosas. Además, representan un gran avance desde el punto de la sostenibilidad de los procesos químicos y del ahorro de energía y recursos naturales».

NUEVA HERRAMIENTA

para la investigación en nanoimanes moleculares

Un equipo de investigadores del Instituto de Ciencia Molecular (ICMol) de la Universitat de València (UV) ha desarrollado una plataforma interactiva en abierto que aglutina y pone a disposición de la ciencia alrededor de 20.000 datos referentes al diseño químico de nanoimanes moleculares de especial interés en el campo de las memorias magnéticas. SIMDAVIS, como se denomina la aplicación, nace del rastreo manual de resultados de investigación publicados por la comunidad científica a lo largo de 16 años.

Los nanoimanes moleculares son minúsculos sistemas físicos capaces de presentar memoria magnética en una única molécula. Su comportamiento cuántico y su infinita configurabilidad, entre otros factores, los hacen útiles para estudios fundamentales y para potenciales aplicaciones en el campo de las tecnologías cuánticas.

Aunque la ciencia de datos ya ha abierto caminos en la investigación química y el diseño de nuevos materiales, en el caso de los nanoimanes moleculares el azar y la intuición química siguen desempeñando el papel principal.

Con el fin de establecer un marco potente para el diseño químico basado en estadísticas, el equipo del ICMol ha publicado en *Nature Communications*

un artículo que recopila alrededor de 20.000 datos químicos y físicos de nanoimanes basados en lantánidos (elementos químicos con interesantes propiedades magnéticas y ópticas); cataloga más de 1400 experimentos publicados entre 2003 y 2019, y desarrolla un panel interactivo –SIMDAVIS (Single Ion Magnet DATA VISualisation)– para la visualización y procesamiento de los datos. Se trata de una herramienta de *big data* orientada al diseño químico de nanoimanes y nanoestructuras magnéticas, un campo de interés para el futuro de la informática, la electrónica, los dispositivos cuánticos o la biomedicina, entre otros.

«Poner los datos al alcance de la comunidad científica permite comprender los resultados de investigación en su globalidad, ampliar la perspectiva científica y proporcionar conclusiones más precisas», señala Alejandro Gaita-Ariño, investigador CIDEAGENT en el ICMol y responsable del proyecto. «Analizar tanto los resultados positivos como los negativos permite conocer mejor los materiales estudiados y proporciona información para perfeccionar las teorías existentes y desarrollar otras nuevas», añade el científico.

El trabajo ha contado con la colaboración de la sección de estadística del Servicio Central de Soporte a la Investigación Experimental (SCSIE) de la UV.

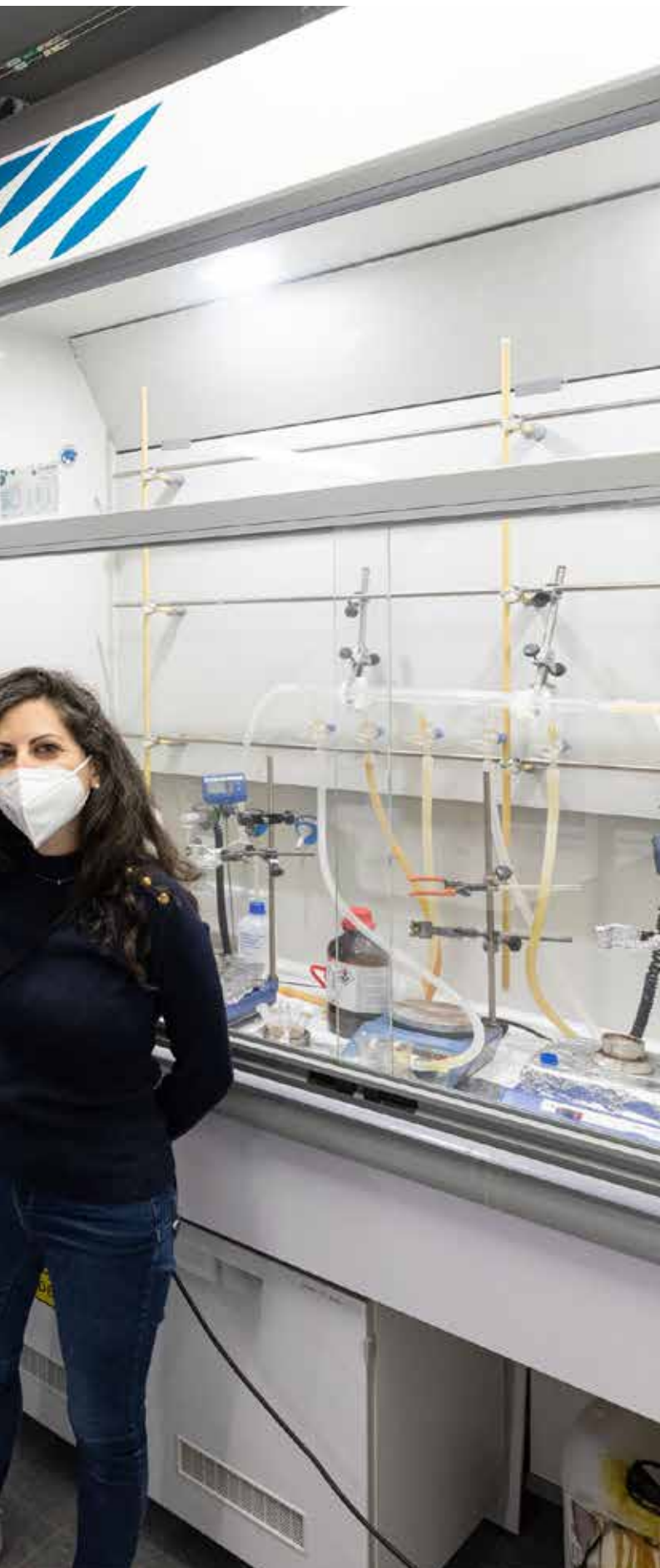
De izquierda a derecha: Alejandro Gaita-Ariño, Silevia Giménez, Lorena Rosaleny-Perutso, Salvador Cardona y José Jaime Baldoz.



Grupo de investigación de la UJI capitaneado por Iván Mora, en el centro de la imagen.

MEJORAN EL RENDIMIENTO DE CÉLULAS SOLARES DE PEROVSKITA DE ESTAÑO





Un equipo de investigación liderado por Iván Mora, catedrático del Instituto de Materiales Avanzados (INAM) de la Universitat Jaume I de Castelló (UJI), ha conseguido mejorar la eficiencia y también la durabilidad de células solares de perovskita de estaño. En concreto, se han superado las 1300 horas de estabilidad operativa, la más alta conocida hasta ahora, gracias a la incorporación de aditivos en la preparación de los dispositivos. El estudio ha sido publicado en la revista *Science*, especializada en energía sostenible.

Las perovskitas de haluro a base de estaño son candidatas prometedoras para aliviar problemas de toxicidad asociados con las perovskitas de plomo, cuya toxicidad es un hándicap para su explotación con fines tecnológicos. Actualmente, se exploran derivados de otros elementos como el antimonio, el bismuto, el cobre, el germanio o el estaño, que son menos tóxicos. En el caso del estaño, se ha conseguido, hasta ahora, una eficiencia superior al 14 %, pero presenta graves problemas de estabilidad.

Este trabajo ha introducido, por primera vez, una combinación de yoduro de dipropilamonio y borohidruro de sodio, aditivos que han permitido preparar dispositivos con eficiencias de fotoconversión (PCE) superiores al 10 %, que destacan por su mayor estabilidad y que han mantenido el 96 % del PCE inicial después de 1300 horas bajo iluminación de un sol en atmósfera de nitrógeno. Este es el valor más alto que hoy en día se conoce para células solares basadas en perovskita de estaño. «Hemos observado que el control de la química de haluros es un aspecto clave para delinear el rendimiento de las células solares de perovskita basadas en estaño y los dispositivos optoelectrónicos», comenta Iván Mora.

Aunque la estabilidad de los semiconductores y dispositivos de perovskitas de haluro en condiciones de funcionamiento está todavía lejos de ser competitiva con las tecnologías de silicio (las más empleadas actualmente en el ámbito de las fotovoltaicas), «los resultados de este estudio proporcionan una información valiosa e indican la dirección que debe tomar la investigación para conseguir aditivos más eficientes que controlan la química del haluro y su entrada en el mercado de la tecnología fotovoltaica», explica Iván Mora.

La investigación ha sido desarrollada por el equipo del INAM-UJI, junto con el Instituto de Ciencia de los Materiales (ICMUV) de la Universitat de València (UV) y la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México en Coyoacán.

ALMACENAN HIDRÓGENO EN CRISTALES DE HIELO

a mayor temperatura y presiones bajas

Universidad de Alicante (UA)

Investigadores del Laboratorio de Materiales Avanzados (LMA) de la Universidad de Alicante (UA) han desarrollado una tecnología que permite almacenar hidrógeno a mayor temperatura y a presiones más bajas de las convencionales.

Se basa en un carbón activado poroso y químicamente optimizado que actúa como nanorreactor y puede contener el hidrógeno a nanoescala en forma de cristales de hielo.

La investigación, realizada junto al Laboratorio Nacional de Oak Ridge en EE. UU., ha sido publicada en la revista *Nature Communications*.

«Hemos sido capaces de introducir hidrógeno en cristales, similares al hielo, en tan sólo 7 minutos y a una presión de 1350 bares. Estos cristales están confinados en las cavidades del carbón activado a una temperatura de 0 °C», explica el catedrático de Química Inorgánica de la UA, Joaquín Silvestre.

«Hasta ahora, este proceso se podía llevar a cabo, pero con tiempos muy largos y a presiones superiores a 2000 bares. Nuestro próximo objetivo es conseguir llegar por debajo de 700 bares, que es el estándar superior empleado en automoción», añade Silvestre.

Desde 2015, los investigadores del LMA del Departamento de Química Inorgánica de la UA han trabajado en el desarrollo de técnicas para almacenar hidratos de metano en las cavidades de materiales porosos como el carbón.

«Se trata de un modelo presente en la propia naturaleza, ya que en el fondo de los océanos y en el subsuelo de regiones frías como Siberia se forman estructuras de hielo que contienen metano», señala Silvestre.

Uno de los factores clave de este trabajo es que el grupo de investigación ha conseguido, en cuestión de minutos, un proceso que en la naturaleza requiere de meses e incluso años.

«El reto en esta ocasión ha sido saber si podíamos incorporar hidrógeno, no presente en la naturaleza, en este proceso. Es decir, convertir el agua de las cavidades en cristales de hidrato», detalla Silvestre, que ha trabajado en este nuevo proyecto junto a los investigadores de la UA, Judit Farrando, Manuel Martínez y Carlos Cuadrado.

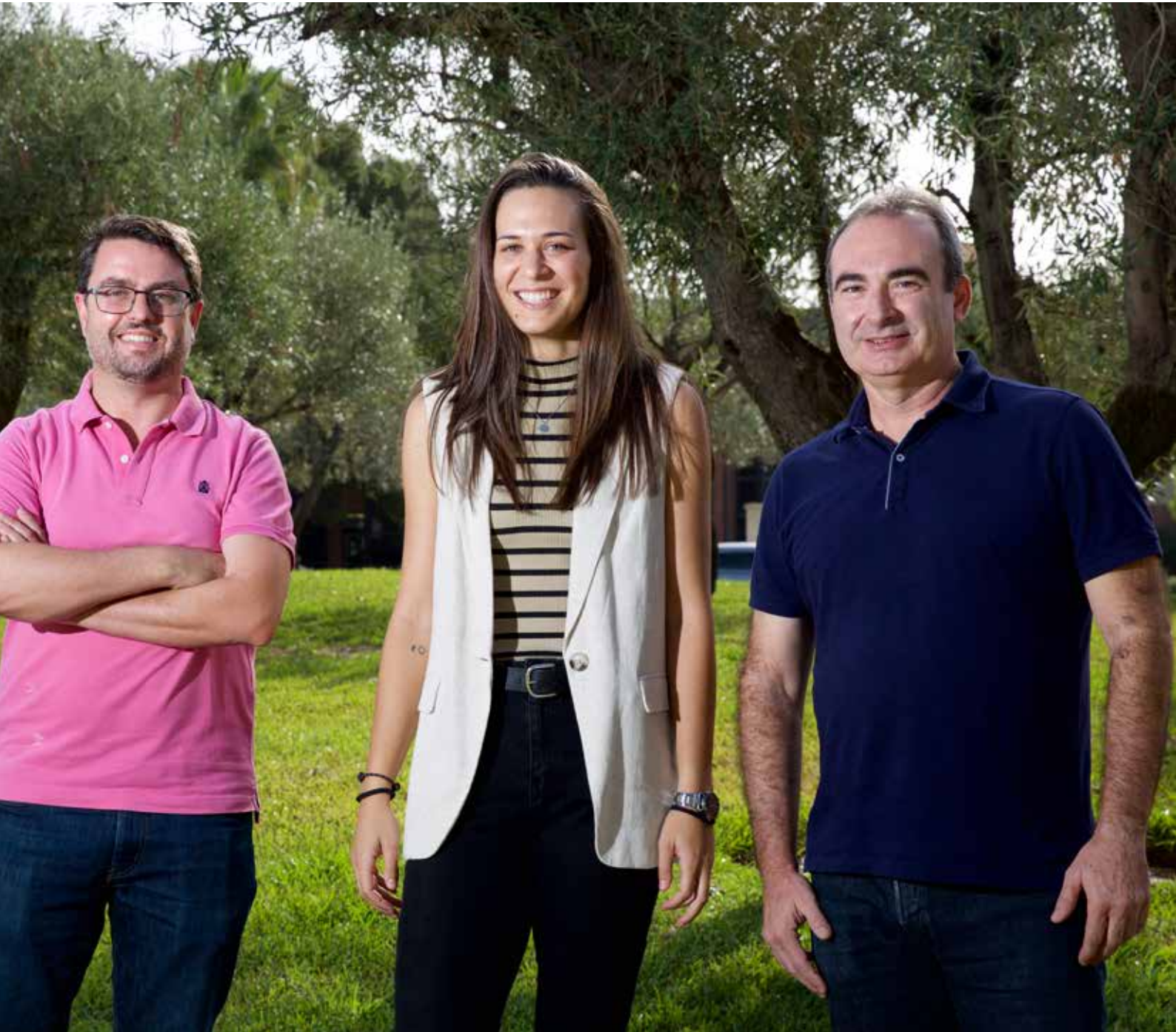
En este sentido, se trata del primer grupo de investigación a nivel mundial que trabaja en el almacenamiento de hidrógeno en base húmeda utilizando el carbón como un nanorreactor.

El hidrógeno es el elemento químico más abundante del planeta capaz de sustituir a los combustibles fósiles y contribuir así a la lucha contra el cambio climático. «Ya sabemos que el hidrógeno es limpio y seguro y sabemos cómo generarlo, pero el reto actual es poder almacenarlo y transportarlo», apunta Silvestre.

Una de las opciones que existen para acumular el hidrógeno es en estado líquido, pero es necesario mantenerlo a una temperatura de -253 °C.



*Arriba, de izquierda a derecha, los Investigadores de la UA, Joaquín Silvestre, Judit Farrando y Manuel Martínez. Foto: Roberto Ruiz (UA).
Debajo, detalle del carbón activado donde se aprecian las cavidades más grandes. Foto: Joaquín Silvestre (UA).*



«Utilizando como nanorreactor el carbón activado, podemos almacenar el hidrógeno a 0 °C, temperatura suficiente para mantener los cristales de hielo», insiste el catedrático de la UA.

En definitiva, las cavidades del carbón permiten almace-

nar una gran cantidad de hidrógeno en un espacio muy pequeño optimizando la presión y las condiciones térmicas. Estos dos factores son claves para dotar de más autonomía no sólo a coches, sino también a transportes que necesitan mucho más combustible, como barcos y aviones.



AVANZAN EN EL DESARROLLO DE PILAS DE COMBUSTIBLE DE HIDRÓGENO MÁS EFICIENTES

Ya hay en el mercado automóviles, autobuses y camiones propulsados por pilas de combustible, pero el elevado coste del platino requerido es uno de los principales inconvenientes de esta tecnología. Una investigación llevada a cabo por una colaboración entre la Universidad de Alicante (UA) y la Universidad de Liverpool (Reino Unido) ha permitido identificar la presencia de especies superficiales a potenciales bajos en el principal catalizador de las pilas de combustible, el platino, lo cual es importante para el desarrollo de la tecnología de las pilas de combustible de hidrógeno (H_2).

En un artículo publicado en la revista *Nature Communications*, los investigadores del Instituto Universitario de Electroquímica de la UA han identificado la adsorción de especies de OH (anión hidroxilo) en átomos de platino de baja coordinación utilizando varias técnicas electro-

químicas y una técnica espectroscópica conocida como SHINERS (Shell Isolated Nanoparticles for Enhanced Raman Spectroscopy). La utilización del SHINERS permitió demostrar la presencia del OH adsorbido a potenciales más negativos de lo que se pensaba.

Reducir el platino

Las pilas de combustible de hidrógeno utilizan platino para catalizar las reacciones en su interior: la reacción de reducción del oxígeno y la reacción de oxidación del hidrógeno. Reducir la cantidad de platino necesaria para las pilas, o incluso sustituirlo por un catalizador más barato y eficiente, requiere un conocimiento profundo, a nivel molecular, de cómo se producen las reacciones en las pilas de combustible sobre la superficie del platino. Hasta ahora se suponía que la superficie del platino



estaba «limpia» de otras especies a los potenciales a los que se producen las reacciones. Sin embargo, este estudio ha demostrado que los aniones hidroxilo se adsorben en la superficie del platino a potenciales muy bajos, lo que tiene un impacto significativo en la comprensión de cómo se produce la reacción de reducción del oxígeno y en la búsqueda de catalizadores más eficientes para esta reacción.

Para obtener estos resultados, utilizaron una combinación de técnicas electroquímicas diseñadas para distinguir entre los diferentes procesos que tienen lugar en la superficie y la espectroscopia Raman, utilizando un desarrollo muy reciente que ha permitido detectar, por primera vez, el anión hidroxilo adsorbido.

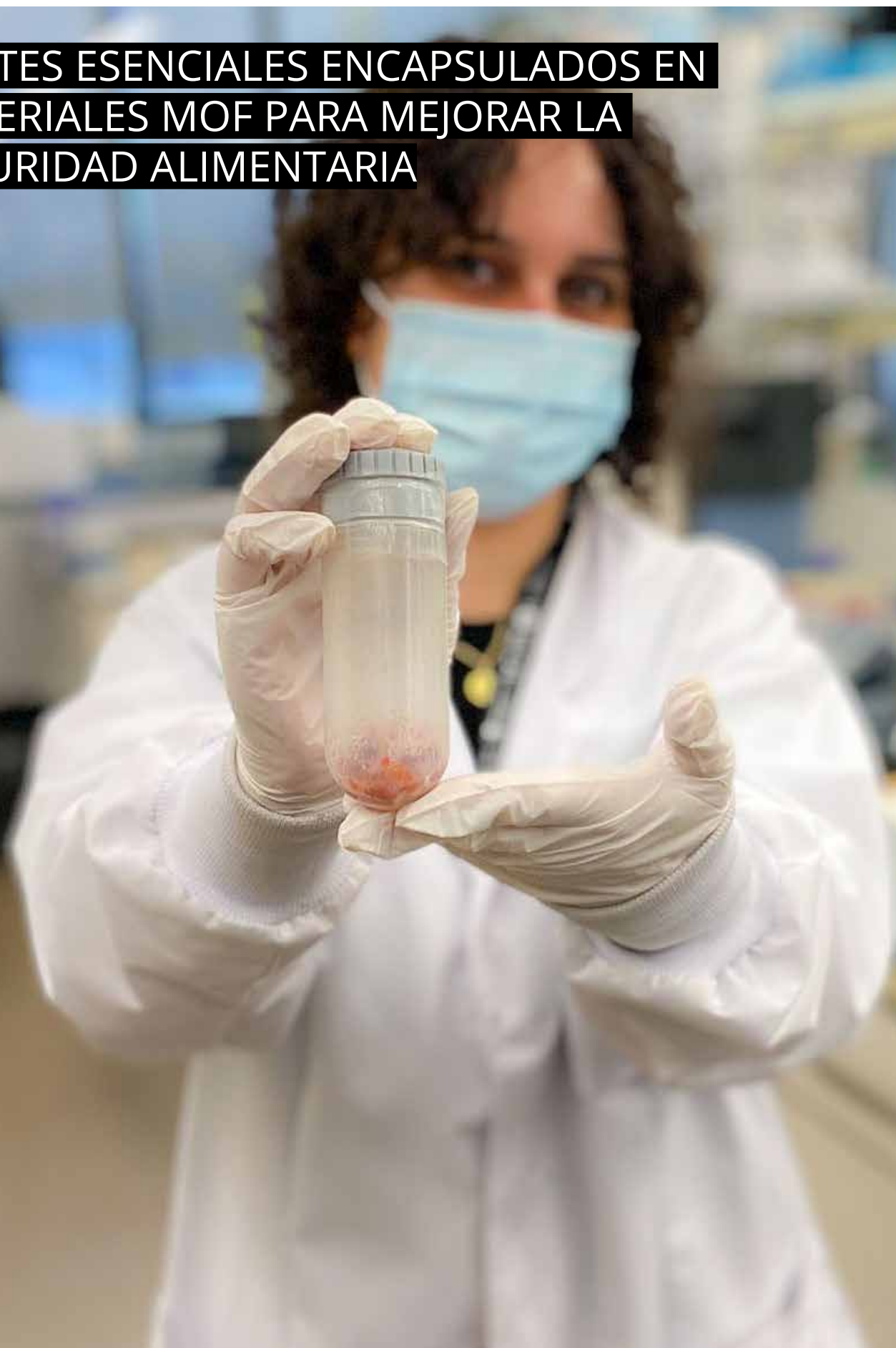
El investigador posdoctoral en el Instituto de Electro-

química de la UA, Rubén Rizo, ha liderado las mediciones electroquímicas junto a los catedráticos Enrique Herro y Juan Feliú. Según el autor, «el hallazgo de hidroxilo adsorbido a potenciales bajos abre una nueva puerta en el estudio del mecanismo de muchas reacciones electroquímicas relevantes. Gracias a este descubrimiento, estamos más cerca de una mejor comprensión del sistema que, en última instancia, es esencial para alcanzar el objetivo final de obtener catalizadores óptimos para aplicaciones electroquímicas de interés tecnológico».

La investigación ha sido posible gracias al apoyo del Ministerio de Ciencia e Innovación y de la Generalitat Valenciana (España) y a la experiencia generada a través del proyecto de degradación de la Institución Faraday (Reino Unido).

La investigadora del ICMol, Katia Caamaño, sostiene una muestra del composite basado en MOF con propiedades antimicrobianas.

ACEITES ESENCIALES ENCAPSULADOS EN MATERIALES MOF PARA MEJORAR LA SEGURIDAD ALIMENTARIA





Un equipo de investigación liderado por el Instituto de Ciencia Molecular (ICMol) de la Universitat de València (UV) ha desarrollado un polímero «inteligente» basado en el uso de esencias naturales encapsuladas en estructuras tipo MOF (*Metal Organic Framework*). Este material actúa contra dos bacterias responsables de intoxicaciones alimentarias en los consumidores. El trabajo se ha publicado en *Applied Materials & Interfaces*.

Prolongar la eficacia de la acción antibacteriana para la protección de alimentos mediante compuestos bioactivos naturales, encapsulados en estructuras moleculares y liberados bajo control (*delivery*) es un campo muy prometedor para la industria de la alimentación. Sirve para mejorar la seguridad alimentaria, la calidad nutricional de los productos y su nivel de salubridad. Todos ellos, factores clave en el llamado «consumismo verde».

El trabajo presenta el desarrollo de un material basado en un polímero metal orgánico que alberga moléculas de aceite esencial y que, al liberarlas de un modo singular, fomenta una actividad antibacteriana prolongada. El sistema se ha testado contra dos bacterias (*Escherichia coli* y *Listeria innocua*) responsables de algunas intoxicaciones alimentarias en los consumidores. Según describe el artículo, el material empleado para este tipo de *delivery* es el MIL-100(Fe) y la molécula natural activa es el carvacrol, presente en la esencia del orégano y el tomillo. Liderado por el Crystal Engineering Lab (CEL) del ICMol, el trabajo cuenta con la colaboración del Instituto de Agroquímica y Tecnología de los Alimentos (IATA) del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) y la Universidad de Lisboa.

Los materiales MOF permiten la captación, el almacenaje y el suministro controlado de moléculas activas gracias a una configuración adecuada de su estructura química. Esa estructura no sólo protege y estabiliza la molécula activa (en este caso, el carvacrol), sino que, además, proporciona un sistema de administración prolongada sin precedentes que potencia su efecto antimicrobiano de manera extraordinaria.

«Aunque el carvacrol ya se empleaba habitualmente como aditivo alimentario para prevenir la contaminación por bacterias, lo interesante de este nuevo método de encapsulado es que, además de ser biocompatible, permite el suministro prolongado de la molécula almacenada y alarga así su acción antibacteriana», comenta Mónica Giménez, investigadora Ramón y Cajal en el ICMol y responsable del proyecto.

Equipo investigador de la UA, con Ana Beltrán, Arantzasu Valdés, Soledad Prats, Raquel Sánchez, Yameris Velásquez y Adriana Juan, de izquierda a derecha.



PLÁSTICO BIOACTIVO y sostenible mediante residuos de piña

Un grupo de investigadoras del Departamento de Química Analítica, Nutrición y Bromatología de la Universidad de Alicante (UA) trabaja, desde finales de 2021, en el proyecto *Desarrollo de bioaromas naturales para aumentar la vida útil de alimentos frescos y reducir el desperdicio alimentario*, que tiene como objetivo principal lograr nuevos materiales plásticos sostenibles de origen natural que, obtenidos a partir de residuos de piña, tanto del corazón como de la corteza, tengan sistemas activos naturales sinérgicos de doble acción.

En esta línea, las investigadoras han logrado el primero de los resultados del proyecto: un nuevo material que contiene compuestos naturales activos con capacidad antioxidante. En concreto, el material plástico no sólo tiene la capacidad propia de ser continente, sino que interactúa sobre el alimento que almacena y le incrementa su capacidad de conservación, por lo que aumenta su vida útil.

La investigación estudia, además, la incorporación de compuestos activos potenciadores del aroma, que procederían también de residuos de la piña y que estarían destinados a mejorar la experiencia sensorial del consumidor a través del sentido del

olfato. Según Arantzasu Valdés, «nuestra función principal es el desarrollo de películas comestibles de origen natural con extractos antioxidantes y con capacidad aromática obtenidas de residuos de la piña para su posterior aplicación en la industria del envasado de alimentos».

En el mismo sentido, matiza Ana Beltrán que «dichos residuos podrían ser una buena fuente de compuestos antioxidantes, muy útiles en la prevención del deterioro oxidativo de alimentos grasos, así como fuente de aroma afrutado y dulce útil para su incorporación en productos alimenticios y envases activos como aditivo potenciador del aroma en alimentos y bebidas. Así, se le otorga una segunda vida a unos residuos que pueden superar el 50 % del peso total de cada pieza».

Según exponen desde el grupo investigador, el desperdicio de alimentos en el mundo se estima en 1300 millones de toneladas al año, lo que «supone la creciente y preocupante aparición de algunos problemas para el ser humano, ya que representan el 8 % de las emisiones de gases de efecto invernadero, el 20 % del consumo de agua dulce y el 30 % del uso de la tierra agrícola global», indica Valdés.

MATERIALES QUE ELIMINAN sustancias radioactivas nocivas para el organismo

La Universidad de Alicante (UA) ha concluido con éxito el proyecto europeo *Nanoporous and nanostructured materials for medical applications (NanoMed)*, coordinado por el Laboratorio de Materiales Avanzados (LMA) del Departamento de Química Inorgánica. Tras seis años de trabajo, junto a más de una docena de socios del mundo académico y del sector industrial en Portugal, Reino Unido, Francia, Hungría, Grecia, Eslovaquia, Moldavia, Ucrania y Kazajistán, el consorcio ha desarrollado materiales aptos para el uso humano capaces de adsorber toxinas radioactivas del organismo.


El equipo de trabajo se ha centrado en el desarrollo de materiales adsorbentes a partir de la combinación de carbón activado, pectinas y zeolitas para el tratamiento de problemas de salud provocados por la exposición prolongada a fuentes de radiación externa o contaminantes radioactivos. Este es un problema particularmente grave en dos de los países que han participado en el proyecto, Ucrania y Kazajistán, concretamente, en la zona de Chernóbil donde se produjo un accidente nuclear, en 1986.

A escala de laboratorio, han podido comprobar la efectividad de nanomateriales de carbón activado capaces de eliminar isótopos radiactivos en caso de accidente nuclear o por exposición prolongada a radiación ionizante (radioterapia).

Además, según el líder del proyecto, el investigador del LMA, Joaquín Silvestre, «tras todo este trabajo colaborativo también se han podido desarrollar suplementos alimenticios con pectinas que ayudan a eliminar sustancias nocivas como metales pesados. Este producto ya ha empezado a comercializarse en zonas de Ucrania y Rusia, países muy expuestos a radioactividad».

Es la primera vez que la UA ha coordinado, en el marco de financiación H2020, una acción Marie Skłodowska Curie RISE (Research and Innovation Staff Exchange) con el objeto de reforzar la colaboración internacional en I+D+i para afrontar retos mundiales globales por medio del intercambio de conocimiento e ideas que acerquen la investigación básica al mercado.





DESARROLLAN UNA TEORÍA QUE MEJORA
LA EFICIENCIA ENERGÉTICA DE LOS
DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS

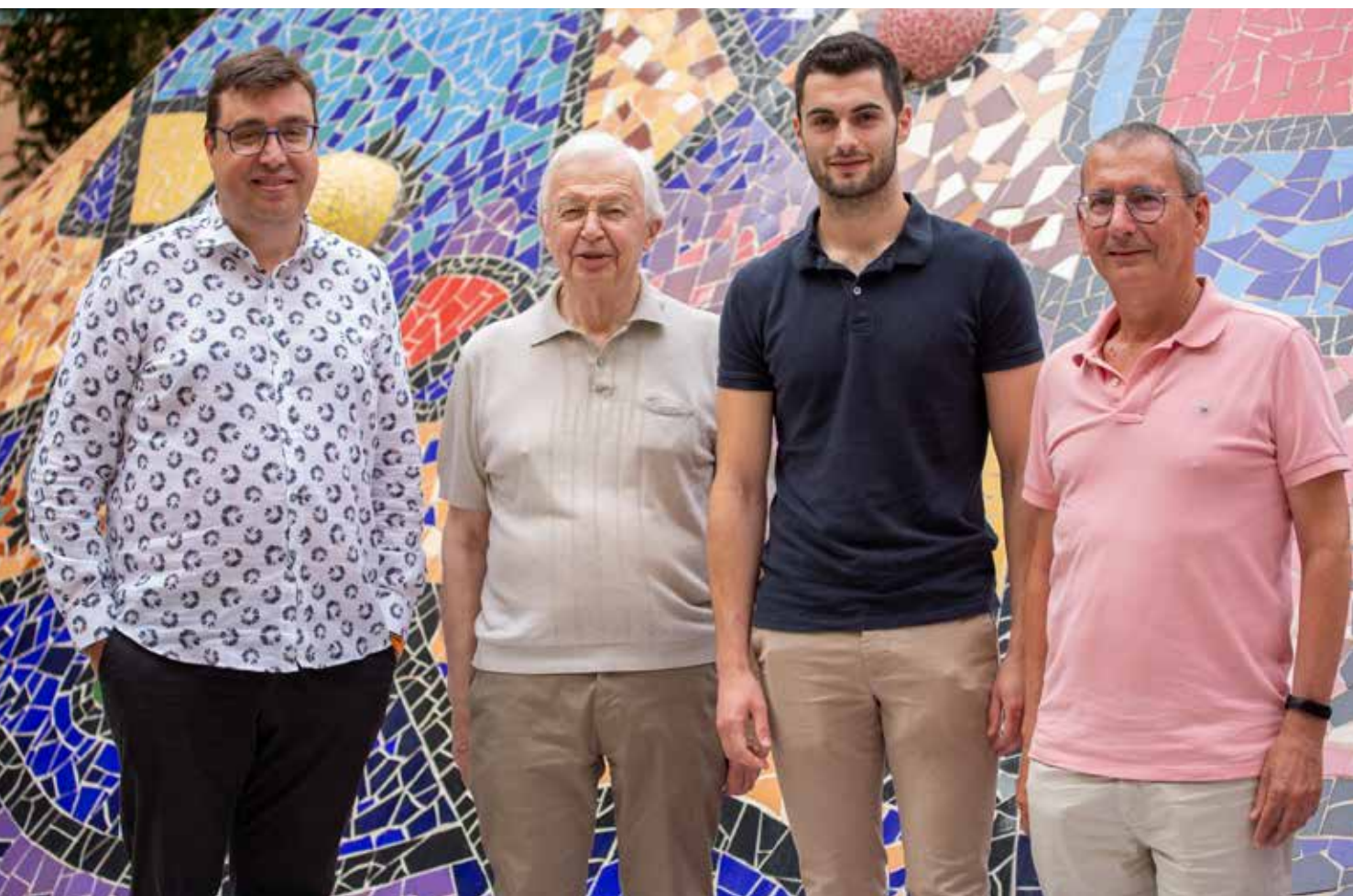


El grupo de Química Cuántica de la Universidad de Alicante (UA) ha predicho la existencia de un nuevo fenómeno natural en la interacción materia-radiación, confirmado de forma experimental. Esta constatación es el objeto de la reseña que el investigador del grupo, Juan Carlos Sancho, ha publicado en la prestigiosa revista *Nature*, por invitación de la publicación en su sección llamada *News & Views*. «Es un ejemplo exitoso de cómo la teoría y la simulación permiten avanzar y predecir fenómenos que luego se confirman por experimentos, con su correspondiente impacto posible en los avances tecnológicos que pueblan la sociedad y el mundo actual», asegura Sancho, quien explica que este tipo de artículos no se escriben por los propios autores de un descubrimiento de mucha relevancia, sino por otros expertos, de forma más divulgativa, que suelen apreciar o haber trabajado antes en el tema de investigación y con los que contacta directamente la revista *Nature* en este caso.

La reseña recoge la constatación empírica de una predicción publicada previamente por el equipo de la UA utilizando cálculos propios de la mecánica cuántica. Se basa en el efecto de «correlación electrónica» que se produce en este tipo de moléculas estudiadas y gracias al cual es posible aprovechar el 100 % de la energía que se emite en forma de luz visible en cualquier pantalla. El investigador explica que cada uno de los píxeles de una pantalla que compone cualquier dispositivo como teléfonos móviles, tabletas, etc. está formado por moléculas que emiten los tres colores básicos (rojo, verde y azul). La batería activa esas moléculas para emitir luz (electroluminiscencia) de manera que alcanzan primero su máximo nivel de «excitación» para después decaer, y es esa pérdida de energía la que se traduce en una emisión de color.

En la actualidad, se utiliza un mecanismo poco eficiente en el que se pierde el 75 % de la energía en cada emisión de la luz, de modo que sólo se aprovecha el 25 % restante. «Nosotros ya predijimos que es posible aprovechar el 100 %», asegura el químico, quien, por otra parte, señala que con su aplicación «se conseguiría un ahorro energético mundial importantísimo». Este menor gasto llevaría, además, aparejada la disminución de la demanda energética y, en consecuencia, de las emisiones de carbono, lo que ayudaría en la consecución de los Objetivos de Desarrollo Sostenible marcados por Naciones Unidas.

En la actualidad, no existe ningún dispositivo en el mercado que esté aplicando este fenómeno recién descubierto, «pero estoy seguro de que lo veremos en un plazo corto de tiempo», señala Sancho.



HOMOQUIRALIDAD BIOLÓGICA

y sus complejos mecanismos de formación

La naturaleza emplea caminos elegantes para construir arquitecturas complejas, como los macrociclos (moléculas que contienen un anillo de doce o más átomos) o las jaulas (estructuras moleculares tridimensionales que poseen cavidades para albergar otras moléculas en su interior). Desde el nacimiento de la química supramolecular se han utilizado macrociclos o macrobicitos para aplicaciones sofisticadas, pero la síntesis de especies tridimensionales preorganizadas ha sido habitualmente un desafío.

Por otro lado, la naturaleza emplea un número muy importante de moléculas quirales donde los átomos pueden organizarse en el espacio de dos maneras diferentes —de igual manera que lo hacen los dedos de la mano derecha y la mano izquierda— que parecen idénticas, pero no son superponibles. Sorprendentemente, en la construcción de muchas de las moléculas naturales como las proteínas (a partir de aminoácidos) o los hidratos de carbono (a partir de azúcares) se observa la participación de una sola de estas dos disposiciones (las proteínas se forman con aminoácidos de tipo S y no R), dando lugar al fenómeno que se denomina «homoquiralidad». Entender cómo se ha llegado a esta homoquiralidad biológica es un tema esencial en las ciencias de la naturaleza.

El equipo de investigación de Química Sostenible y Supramolecular del Departamento de Química Inorgánica y Orgánica Universitat Jaume I de Castelló (UJI), formado por los profesores Eduardo García-Verdugo, Belén Altava, Santiago V. Luis y Ferran Esteve, junto con el Premio Nobel, Jean-Marie Lehn, ha conseguido describir el autoensamblaje covalente dinámico de novedosas jaulas moleculares macrobicitos seudopeptídicas doblemente quirales, con una autoselección muy eficiente de homoquiralidad. Este trabajo ha sido publicado en la revista *Chem*.

LOS METALOCICLOS abrazan nanotubos de carbono

La modificación química de los nanotubos de carbono constituye el paso más crítico para poder mejorar sus propiedades. Los procesos de modificación de nanotubos se pueden realizar a través de una modificación covalente o una funcionalización supramolecular de su superficie. Estos materiales modificados tienen aplicaciones en, por ejemplo, la obtención de sensores ópticos y dispositivos electrónicos.

Una forma alternativa de modificar las propiedades de los nanotubos es la obtención de nanotubos enlazados mecánicamente (MINTs, según sus siglas en inglés). Esta técnica, desarrollada durante los últimos años por Emilio Pérez, permite el diseño de productos con una estabilidad similar a los nanotubos modificados covalentemente, pero con la ventaja de que se preserva la estructura original de los tubos. Algunas de las aplicaciones de los MINTs se pueden encontrar en la obtención de polímeros reforzados, en el campo de la catálisis o la fabricación de bits cuánticos o qubits.

Un grupo de investigadores liderado por Emilio Pérez (Grupo de Química de Materiales de Bajas Dimensiones del Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia) y Eduardo Peris (Grupo de Química Organometálica y Catálisis homogénea del Instituto de Materiales Avanzados de la Uni-

versitat Jaume I de Castelló) ha dado un importante paso más en la síntesis de MINTs al preparar este tipo de estructuras combinando nanotubos de carbono con una estructura metalocíclica.

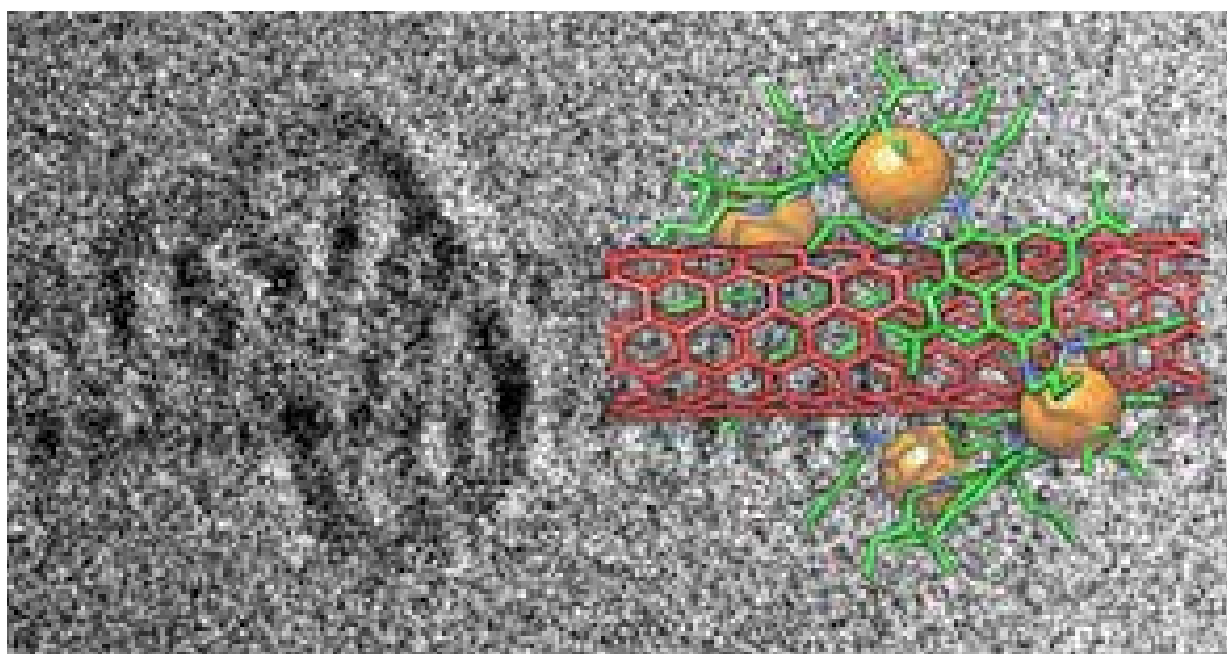
La estructura metalocíclica utilizada en este trabajo contiene cuatro átomos de paladio unidos por cuatro ligandos orgánicos, lo cual genera un compuesto con una estructura cuya geometría se asemeja a un cuadrado en la que los átomos de paladio ocupan los vértices. El nuevo MINT está formado por un nanotubo que atraviesa la cavidad formada por la estructura metalocíclica.

La presencia de átomos metálicos rodeando la estructura del nanotubo introduce una nueva dimensión en la estructura del material resultante. Por ejemplo, el centro metálico puede mejorar las propiedades fotoelectroquímicas de los MINTs y puede ayudar a encontrar nuevas aplicaciones.

Los resultados ejemplifican cómo el control direccional de las geometrías de coordinación se puede utilizar para la preparación de estructuras autoensambladas más allá del nivel molecular. «Creemos que nuestro trabajo abre un nuevo campo de oportunidades para los MINTs», afirma el profesor Pérez.

Encapsulación de nanotubos de carbono dentro de una molécula cíclica basada en el metal paladio.

Foto: Angewandte Chemie.



CREAN UN MÉTODO MÁS ECONÓMICO

para obtener fragancias comerciales

Instituto de Tecnología Química (UPV-CSIC)

Un grupo de investigación del Instituto de Tecnología Química (ITQ), centro mixto de la Universitat Politècnica de València (UPV) y el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), ha desarrollado una tecnología para obtener alquenos, moléculas orgánicas de amplio uso industrial, a partir de moléculas análogas hasta 50 veces más baratas que las empleadas ahora. Utilizando pequeñas cantidades de rutenio como catalizador, el equipo ha demostrado que se trata de una tecnología viable a nivel industrial, produciendo la síntesis a gran escala de fragancias comerciales en colaboración con una empresa internacional del sector. El nuevo método se publica en *Nature Communications*.

Los alquenos son hidrocarburos que contienen un doble enlace químico de carbono C-C. Abundan en la naturaleza y sus derivados químicos son productos de gran interés en la industria, ya que se utilizan para la producción de millones de toneladas al año de detergentes, lubricantes, cosméticos, fragancias o polímeros (plásticos, neumáticos). En concreto, los alquenos empleados en el estudio son los denominados «alquenos internos», que se obtienen a partir de moléculas análogas llamadas «alquenos terminales».

La manera más simple de obtener alquenos internos es mediante reacciones de isomerización (cambiar los átomos de orden) de alquenos terminales, pero esto requiere altas temperaturas (más de 250 °C) y sus productos no se pueden utilizar en industria de química fina, además de producir otros no deseados.

Los alquenos internos se obtienen también mediante otros métodos sintéticos más selectivos, pero menos eficientes, que utilizan grandes cantidades de productos (catalizadores, ligandos, aditivos o disolventes), lo que hace que no sean viables para implementarse a nivel industrial por su alto coste y la cantidad de residuos que generan.

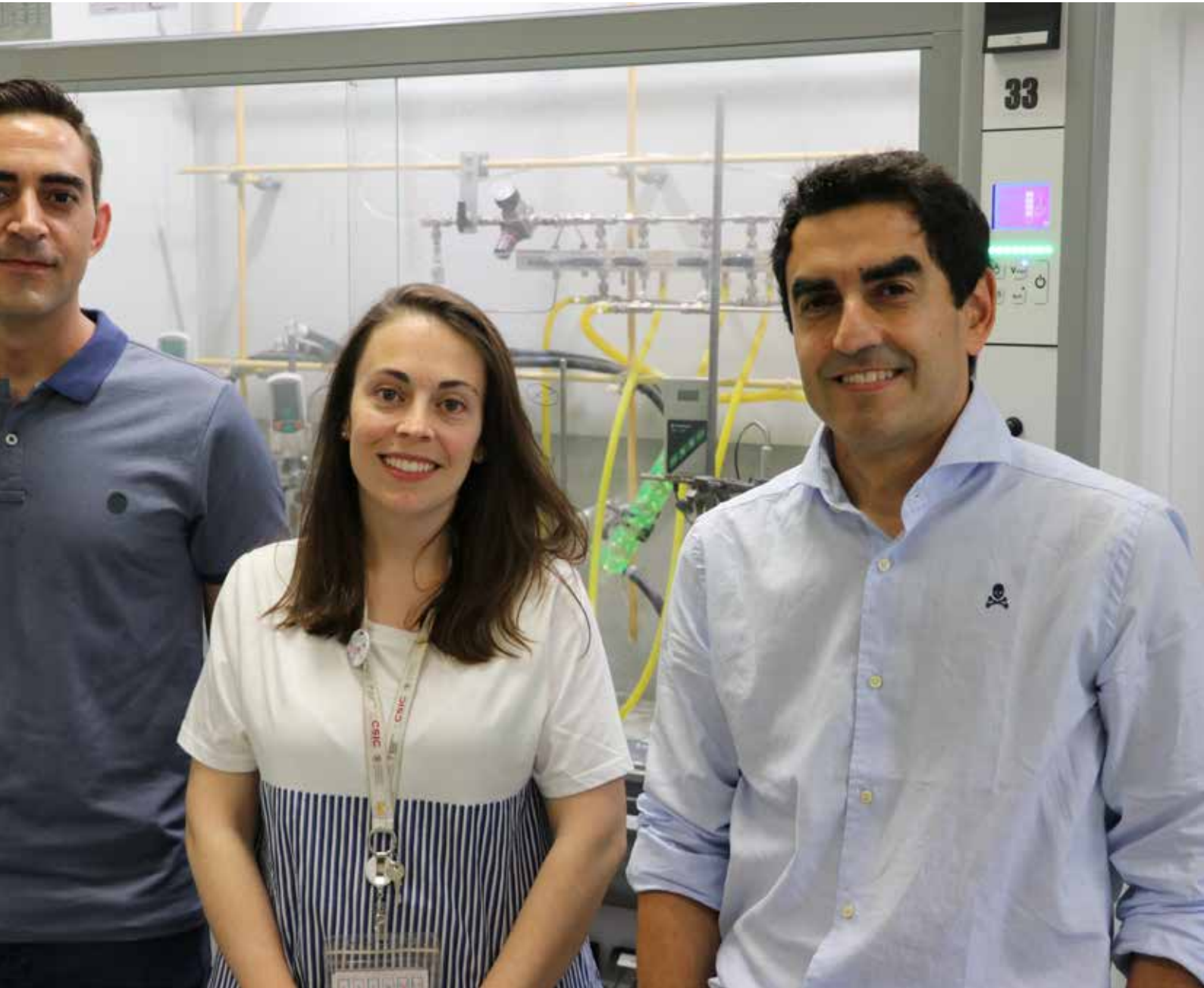
El nuevo método desarrollado por el ITQ permite la síntesis de alquenos internos a partir de sus análogos terminales utilizando cantidades de catalizador (rutenio) de partes por millón, lo que hace que sea una tecnología viable para ser utilizada a nivel industrial. «De hecho, como se menciona en el artículo, hemos empleando esta metodología para llevar a cabo la síntesis a gran escala de fragancias comerciales en colaboración con una empresa del sector», explica Antonio Leyva-Pérez, investigador del CSIC en el ITQ que lidera el estudio.

Proceso económico y viable para la industria

Según el científico del CSIC, las tecnologías actuales para producir alquenos internos emplean catalizadores ácidos a altas temperaturas, lo que genera productos indeseados, o catalizadores de rodio, metal 10 veces más caro que el oro. «Nuestra nueva metodología nos permite obtener de manera completamente selectiva una gran variedad de alquenos internos, es decir, sin formación de otros productos secundarios, lo que hace que puedan ser utilizados para multitud de aplicaciones», asegura Leyva-Pérez.



De izquierda a derecha, los investigadores Sergio Sanz-Navarro, Marta Mon y Antonio Leyva-Pérez.



«Además, para su obtención se utilizan pequeñas cantidades, de partes por millón, de especies de rutenio, un material tres veces más barato que el oro, lo que hace que sea un proceso muy económico y viable desde un punto de vista industrial», señala el investigador.

Puesto que los alquenos internos son ampliamente utilizados para una gran variedad de transformaciones en la industria química, el uso de esta metodología tiene un gran abanico de posibilidades.

El trabajo se ha realizado en colaboración con la empresa International Flavours & Fragrances Inc. (IFF), con sede en Benicarló (Castellón), y con el profesor de la Universitat de València, Antonio Doménech.

Los resultados obtenidos han sido presentados para su protección mediante patentes, tanto para la síntesis de fragancias (junto con la empresa IFF) como para la isomerización de alquenos de cadena larga.