

BIBLIOGRAFÍA

1. Braga, D. and Orpen, A.G. (Eds.): *Crystal Engineering From Molecules and Crystals to Materials*. Kluwer Academic Publishers, 1999.
2. Bernstein, J.: *Polymorphism in molecular Crystals*. Oxford Science Publication, 2002.
3. Tiekink, E.R.T. and Vittal, J.J.: *Frontiers in Crystal Engineering*. Wiley, 2006.
4. Garetz, B.A., Malic, J. and Myerson, A.S.: *Polarization switching of crystal structure in the no photochemical light-induced nucleation of supersaturated aqueous glycine solutions*. Physical Review Letters, **89**, 175501 (2002).
5. Ha, J.-M., Wolf, J.H., Hillmyer, M.A., and Ward, M.D.: *Polymorph selectivity under Nanoscopic confinement*. J. Am. Chem. Soc., **126**, 3382-3383 (2004).
6. Yu, L.: *Nucleation of One Polymorph by Another*. J. Am. Chem. Soc., **125**, 6380-6381 (2003).
7. Bauer, M., Harris, R.K., Rao, R.C., Apperley, D.C. and Rodger, C.A.: *NMR study of desmotropy in Irbesartan, a tetrazole containing pharmaceutical compound*. J. Chem. Soc., Perkin Trans., **2**, 475-481 (1998).
8. Bhatt, P.M., Desiraju, G.R.: *Tautomeric Polymorphism in Omeprazole*. Chem. Commun., 2057-2059 (2007).
9. Knapman, K.: *Polymorphic predictions*. Modern Drug Discovery, **3**, 53-57 (2000).
10. Frier, P., Pinschower, K.: *The materials science of chocolate*. MRS Bulletin, 25-29 (2000).

M.^a Ángeles García Fernández
Dpto. de Química Orgánica y Bio-Orgánica

NOVEDADES CIENTÍFICAS

Novedades científicas en Ciencias Ambientales

PRODUCCIÓN DE UN NUEVO COMBUSTIBLE A PARTIR DE LA FRUCTOSA

La disminución de las reservas de combustibles fósiles y la creciente preocupación sobre el calentamiento global indican que es necesario encontrar a corto plazo nuevas fuentes de energía sostenibles. El etanol es el único combustible líquido renovable que se produce en grandes cantidades y aunque presenta ciertas ventajas, también tiene limitaciones debido a su bajo rendimiento energético, alta volatilidad y contaminación por la absorción del agua de la atmósfera.

En la Universidad de Wisconsin-Madison se ha desarrollado un proceso catalítico para producir un nuevo combustible líquido, el 2,5-dimetilfurano (DMF), a partir de la fructosa (carbohidrato obtenido directamente de la biomasa o por isomerización de la glucosa). Este compuesto adquiere ventajas sobre el etanol puesto que presenta un rendimiento energético superior (aproximadamente del 40%), es menos volátil y no es soluble en agua (*Nature*, **447**, 982-985, 2007).

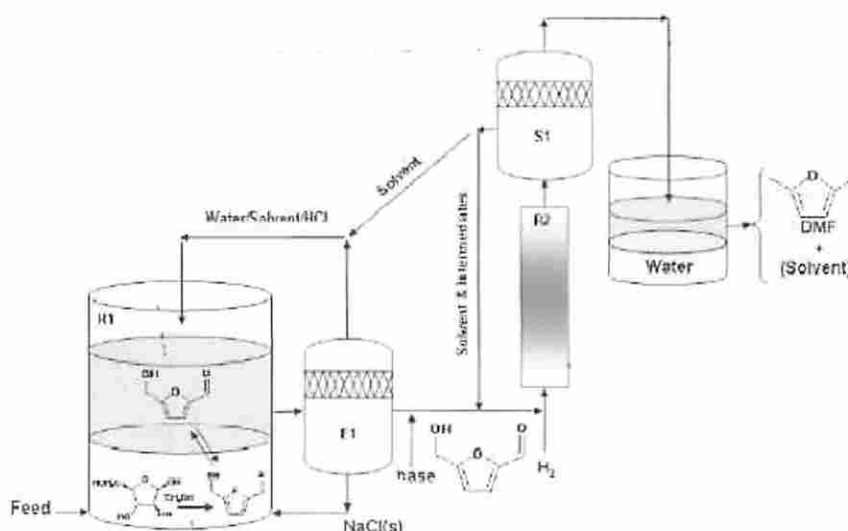


Figura 1. Representación esquemática del proceso de conversión de fructosa en 2,5-dimetilfurano (DMF).

DESCONTAMINACIÓN DE SUELOS MEDIANTE PLANTAS DE TABACO MODIFICADAS GENÉTICAMENTE

Los explosivos son compuestos orgánicos responsables de buena parte de la contaminación que sufren nuestros suelos. Históricamente, el 2,4,6-trinitrotolueno (TNT) ha sido un ex-

plosivo militar muy empleado en conflictos bélicos, quedando aún numerosos lugares altamente contaminados. En la actualidad, la contaminación con TNT también se produce en campos de entrenamiento militar y, suelos y aguas subterráneas de instalaciones dedicadas a la fabricación y almacenaje de explosivos. Este compuesto, al igual que la mayoría de los productos explosivos, es toxi-

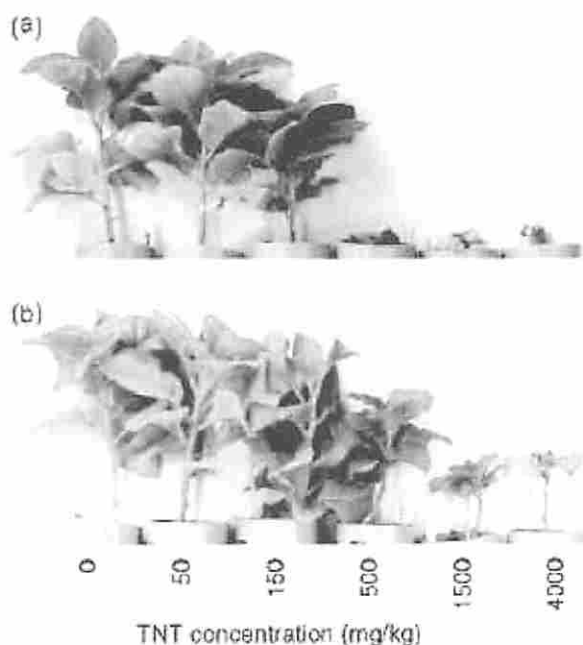


Figura 2. Comparación del crecimiento de plantas del tabaco (*Nicotiana tabacum*) durante 12 meses en suelos enmendados con diferentes concentraciones de TNT. a) Plantas de tabaco silvestres. b) Plantas de tabaco transgénicas.

co, mutagénico y provoca serios trastornos en la salud y graves impactos en el ambiente.

Se han descrito algunos tipos de bacterias del suelo que pueden metabolizar el TNT, compuesto xenobiotico persistente, sin embargo la biomasa bacteriana y la actividad en el suelo es insuficiente para degradarlo a una velocidad apreciable. En un artículo publicado recientemente, N. C. Bruce de la universidad de York y sus colaboradores han demostrado que plantas del tabaco (*Nicotiana tabacum*) que sobreexpresan el gen de la nitrorreductasa (NR) bacteriana son capaces de descontaminar suelos con altas concentraciones de TNT. También han observado un significativo incremento de la biomasa de la comunidad microbiana y de la actividad metabólica en la rizosfera de estas plantas transgénicas comparado con el de plantas silvestres sin modificar (*Environ. Sci. Technol.*, **41**, 5854-5861, 2007).

A partir de sus resultados concluyen que las plantas de tabaco modificadas genéticamente toleran mejor la contaminación del suelo por TNT que las plantas silvestres sin modificar y que, además, cuando se emplean en la fitorremediación de contaminantes orgánicos en suelos

altamente contaminados pueden incrementar la funcionalidad y diversidad genética de la comunidad microbiana de la rizosfera.

ALTERNATIVAS A LOS DISOLVENTES ORGÁNICOS VOLÁTILES

Uno de los objetivos prioritarios de la Química Verde es la obtención de nuevos disolventes inocuos o de baja toxicidad, poco volátiles y derivados de fuentes renovables que puedan reemplazar a los compuestos orgánicos volátiles (VOCs) que se utilizan actualmente.

Sólo en Estados Unidos la producción de aceites vegetales se cifra en 88,7 millones de toneladas por año y, aunque se destinan principalmente a la elaboración de productos alimenticios, también los esteres del aceite de soja se emplean como biodiésel y en la fabricación de tintas de impresión.

Un grupo de investigadores de la Universidad de Alabama han realizado un estudio sobre las propiedades físico-químicas del aceite de soja transesterificado (SBME), para determinar su posible uso en extracciones líquido-líquido con agua. La síntesis del ester se realiza mediante una reacción de transesterificación del aceite o grasa con un alcohol de bajo peso molecular como el metanol o etanol en presencia de un catalizador para formar el correspondiente ester del ácido graso y glicerina (que puede utilizarse en cosmética, alimentación, etc.).

Después de analizar la distribución de varios solutos (compuestos neutros, iones metálicos y compuestos iónicos) en los sistemas bifásicos formados por el agua y metil ester del aceite de soja, los autores del trabajo concluyen que este tipo de esteres constituyen un medio adecuado para el desarrollo de procesos de extracción líquido-líquido, ya que durante dicho proceso los solutos presentan el mismo comportamiento que cuando se emplean disolventes tradicionales (*Green Chem.*, **9**, 1008-1015, 2007).

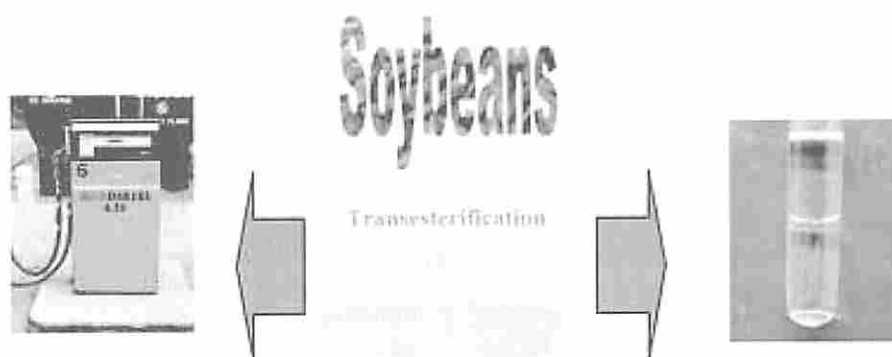


Figura 3. Transesterificación de ácidos grasos vegetales para la obtención de nuevos disolventes orgánicos o biodiésel.

DIFERENCIAS EN LA BIOMAGNIFICACIÓN DE LOS CONTAMINANTES ORGÁNICOS PERSISTENTES SEGÚN LAS CADENAS TRÓFICAS

El Convenio de Estocolmo de Contaminantes Orgánicos Persistentes (COPs), ratificado en 2004 por 131 países, reconoce las propiedades de toxicidad, persistencia y bioacumulación de estos compuestos, así como su capacidad de transporte a largas distancias. Su objetivo es proteger la salud humana y el medio ambiente frente a los COPs, y para ello prohibirá y/o adoptará las medidas jurídicas y administrativas que sean necesarias para la eliminación de la producción y utilización de estos productos, entre los que se en-

cuentran los bifenilos policlorados (PCBs) y diclorodifeniltricloetanos (DDTs).

Hasta la actualidad se consideraban como bioacumulativas aquellas sustancias hidrofóbicas, solubles en grasas con un alto coeficiente de partición en octanol-agua ($K_{OW} > 100.000$). Sin embargo, en un reciente artículo se ha demostrado que sustancias moderadamente hidrofóbicas con un K_{OW} entre 100 y 100.000, las cuales no se biomagnifican en cadenas tróficas acuáticas, pueden hacerlo en otras cadenas que incluyen animales de respiración aérea (incluidos humanos) por su alto coeficiente de partición octanol-aire (K_{OA}) y la baja tasa de eliminación respiratoria (*Science*, 317, 236-239, 2007).

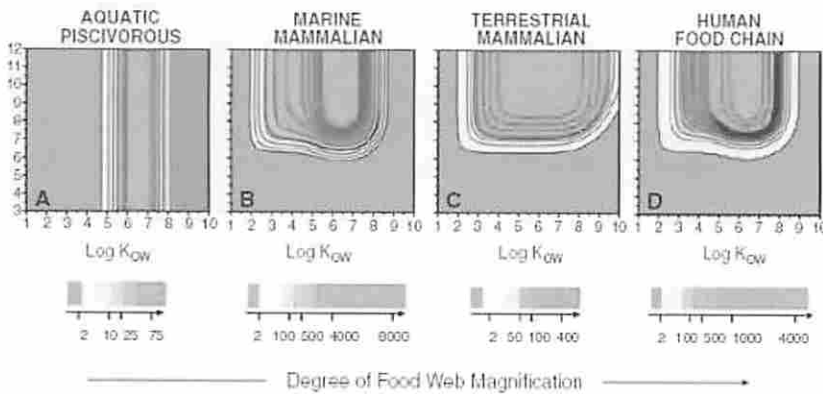


Figura 4. Relación entre los coeficiente K_{OW} y K_{OA} y la biomagnificación en distintas cadenas tróficas.

Los productos químicos de bajo K_{OW} y alto K_{OA} representan un tercio de los compuestos orgánicos de uso comercial, constituyendo por tanto un grupo no identificado de sustancias potencialmente bioacumulativas que requiere su regulación para prevenir posibles consecuencias sobre la salud y los ecosistemas.

RÁPIDA DOMESTICACIÓN DE ESPECIES MARINAS SALVAJES

C. Duarte, Premio Nacional de Investigación en Ciencias y Tecnologías de los Recursos Naturales 2007, y N. Marbá, del Consejo Superior de Investigaciones Científi-

cas (CSIC), han analizado las razones del éxito y el rápido desarrollo de la acuicultura, frente a la domesticación de especies terrestres. En el artículo plantean también las consecuencias de la domesticación de especies marinas en el suministro mundial de alimentos y su impacto ambiental (*Science*, 316, 382-383, 2007).

Desde la revolución industrial, se ha producido un bajo incremento en el número de especies terrestres, animales y vegetales, domésticas

(~3%). Por el contrario, la domesticación de especies acuáticas, especialmente marinas, ha crecido de forma exponencial, aproximadamente 430 especies acuáticas. Alrededor del 97%, lo han sido desde principios del siglo XX y se calcula que en la última década se habrían domesticado 106 especies.

Existen diversas razones que explicarían el éxito de la domesticación de especies marinas frente a las terrestres. La más importante es la mayor variedad de las primeras, que han sido y pueden ser domesticadas como: moluscos, crustáceos, vertebrados, equinodermos, etc., frente a los mamíferos y aves, con algunos invertebrados, domesticados sobre la superficie terrestre. Del orden de 3.000 especies salvajes y silvestres sirven como alimento en el mar, mientras que menos de 200 lo hacen en la tierra. La gran diversidad de formas de vida en el océano comparada con las terrestres proporciona un mayor rango de posibilidades para la domesticación.

Estos autores resaltan que la acuicultura, tal como se practica en la actualidad, tiene también consecuencias negativas para el medio ambiente y la biodiversidad, incluyendo el deterioro de los ecosistemas costeros y el impacto sobre las especies salvajes.

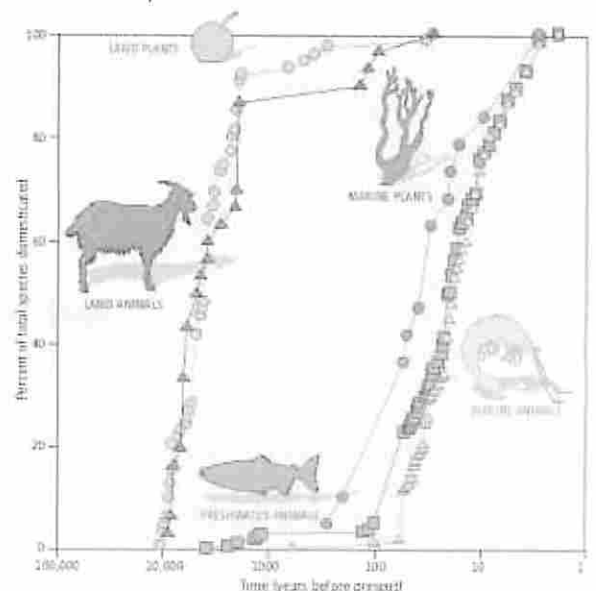


Figura 5. En los últimos 100 años se han domesticado muchas más especies acuáticas que terrestres.

ACLIMATACIÓN DE LOS ANIMALES ANTE LOS CAMBIOS CLIMÁTICOS

La aclimatación es el proceso por el cual un organismo se adapta fisiológica y anatómicamente, en un corto periodo de tiempo, a determinados cambios ambientales, generalmente relacionados con el clima. Sin embargo, un grupo de investigadores de la Universidad de Stellenbosch, Sudáfrica, ha observado la respuesta de pequeños animales al cambio climático encontrando que determinados animales terrestres no consiguen adaptarse (*J. Insect Physiol.*, **52**, 693-700, 2006).

El estudio, llevado a cabo por J. Deere y S. Chown, se realizó en la remota isla subantártica Marion, de condiciones climáticas muy cambiantes, y consistió en comparar las respuestas de 5 especies distintas de ácaros ante diferentes temperaturas a lo largo de una semana. Estas especies ocupan tanto hábitats terrestres, de condiciones bastante impredecibles, como hábitats marinos, más estables que los anteriores. Se demostró que los animales terrestres sometidos a ambientes altamente impredecibles no muestran ningún tipo de aclimatación, mientras que las especies marinas en condiciones predecibles y de baja temperatura son más versátiles, respondiendo mejor ante las variaciones climáticas.

La isla Marion, donde la temperatura media anual ha aumentado en más de 1°C en los últimos cincuenta años, ha demostrado ser un lugar idóneo para investigar los efectos del calentamiento global en los seres vivos.



Figura 6. Tormenta de nieve sobre la isla Marion.

BACTERIAS PARA PRODUCIR BIODIÉSEL

Científicos alemanes han descubierto una forma de obtener biodiésel utilizando bacterias modificadas genéticamente a partir de restos vegetales de una forma más económica y ecológica que la tradicional (*Microbiology*, **152**, 2529-2536, 2006). Los métodos actuales de producción de biodiésel a partir de aceites vegetales de cultivos de soja, girasol o palma siguen siendo costosos. Además, se requieren grandes extensiones de terreno y estos cultivos bioenergéticos compiten con los alimentarios.

La tecnología desarrollada por A. Steinbüchel *et al.*, de la Universidad de Munster, emplea la bacteria *Escherichia coli* modificada mediante ingeniería genética, en la que se ex-

presan genes de las bacterias *Zymomonas mobilis* y *Acinetobacter baylyi* que permiten la producción de etanol y su subsiguiente esterificación. De esta manera, a partir de materias primas, tales como azúcares, madera, paja o cualquier material celulósico, se obtiene lo que estos autores denominan *microdiésel*, compuesto por etil ésteres de ácidos grasos ricos en oleato de etilo y con pequeñas cantidades de palmitato de etilo y palmitoleato de etilo, diferente al biodiésel actual, constituido principalmente por metil ésteres de ácidos grasos.

De ser viable esta técnica, la utilización de materiales agrícolas de bajo coste y la ausencia de aditivos químicos en el proceso, permitiría la producción de un biodiésel de segunda generación a precios competitivos en el futuro.

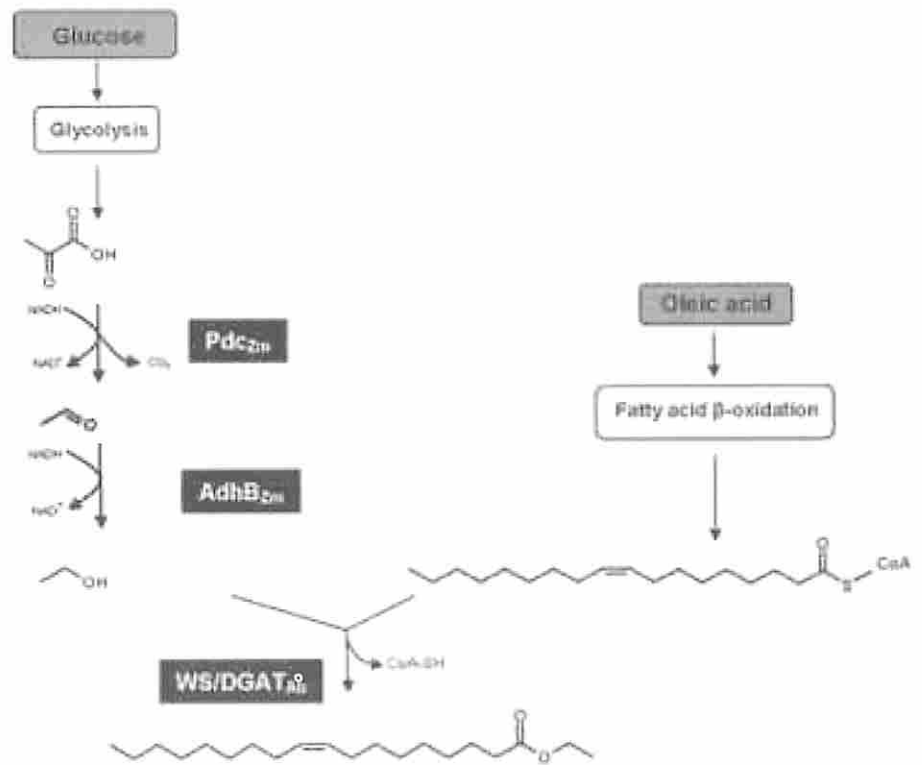


Figura 7. Ruta de biosíntesis de etil ésteres de ácidos grasos (FAEEs) utilizando *Escherichia coli* modificada genéticamente.

BIODIVERSIDAD Y ESTABILIDAD DE LOS ECOSISTEMAS

A partir de los datos recogidos durante 12 años por D. Tilman y colaboradores, de la Universidad de

Minnesota y Nebraska, se ha demostrado que los ecosistemas con una gran riqueza en especies no sólo son más productivos, sino que también son más resistentes a condiciones climáticas extremas, plagas de insectos, etc., confirmando la relación

entre la biodiversidad y la estabilidad de los ecosistemas, debatida desde hace más de cincuenta años (*Nature*, **441**, 629-632, 2006).

Los ensayos fueron llevados a cabo en 168 parcelas, en cada una de las cuales se plantó aleatoriamente desde 1 hasta 16 especies herbáceas perennes y otras plantas típicas de pradera. La estabilidad de las plantas en las parcelas se vio también aumentada con la cantidad de biomasa radicular, ya que las raíces almacenan nutrientes y amortiguan las variaciones del clima, siendo más abundante en especies perennes que en especies anuales, como el maíz. Estos resultados ponen de manifiesto que el uso de praderas con una gran biodiversidad puede ayudar a satisfacer la demanda de recursos alimentarios y biocombustibles de una forma más eficiente y sostenible, evitando la necesidad de labrar anualmente el suelo y de utilizar fertilizantes y pesticidas.



Figura 8. Parcelas experimentales con 1, 2, 4, 8 y 16 especies distintas en cada una.

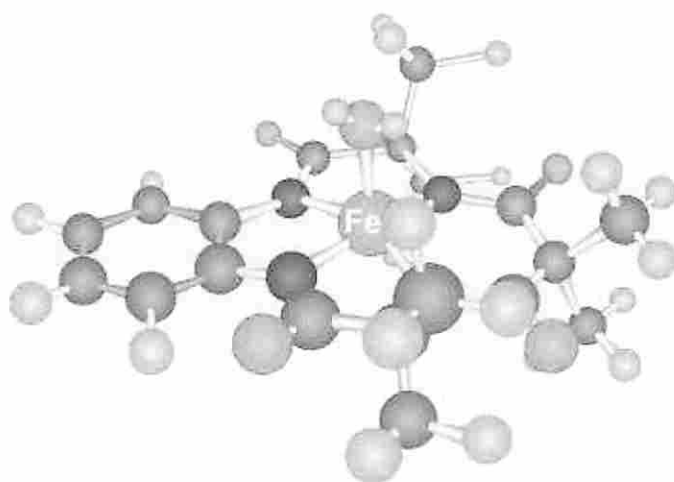


Figura 9. Complejo Fe-TAML (ligando macrocíclico tetraamido).

ELIMINACIÓN DE PESTICIDAS MEDIANTE COMPLEJOS DE Fe-TAML

Recientemente, el grupo de investigación de T.J. Collins, de la Universidad de Pittsburg, ha descrito la degradación del fenitrotion y otros pesticidas organofosforados mediante oxidación catalítica, utilizando complejos de Fe-TAML (ligando macrocíclico tetraamido) que actúan como activadores del peróxido de hidrógeno (*J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 12058-12059, 2006).

El uso de estos catalizadores presenta ventajas frente a otros métodos tradicionales como la hidrólisis enzimática, ya que se requieren concentraciones muy bajas (ppm), son poco tóxicos y convierten rápidamente los pesticidas en otros compuestos de menor toxicidad (ácidos orgánicos de

bajo peso molecular, SO_4^{2-} , NO_2^- , NO_3^- , etc.).

Posteriormente, este equipo junto con otros investigadores de la Universidad Minnesota, han completado los resultados anteriores con la síntesis del complejo $[\text{Fe}(\text{TAML})(\text{O})]^-$, demostrando también, mediante los estudios espectroscópicos y cálculos teóricos, que este intermedio tiene un tiempo de vida de horas a -60°C (*Science*, **315**, 835-838, 2007). Aunque los oxocomplejos de Fe(V) se habían propuesto como intermedios en reacciones enzimáticas o en la degradación catalítica de contaminantes por el peróxido de hidrógeno, su existencia no había podido ser demostrada.

Consuelo Escolástico León
y Javier Pérez Esteban

Dpto. de Química Orgánica y Bio-Orgánica

Novedades científicas en Física

ASTROFÍSICA Y COSMOLOGÍA

- El modelo inflacionario del *big bang* se ha visto reforzado por el esperado segundo conjunto de datos obtenidos por la sonda espacial WMAP (*Wilkinson Microwave Anisotropy Probe*), presentados el 17 de marzo durante una rueda de prensa de la NASA.

El primer conjunto de resultados, presentado hace tres años, apuntaba varios aspectos importantes del Universo que hasta la fecha se conocían de forma vaga: el tiempo de recombinación (380.000 años después del *big bang*, momento en el que los primeros átomos se formaron); la edad del Universo (13,7 mil millones de años, con una incertidumbre de más-menos 200 millones de años); y la composición

del Universo (con una proporción de energía oscura del 73%).

Desde ese anuncio en 2003, los investigadores han trabajado concienzudamente para reducir la incertidumbre en los resultados. El principal resultado obtenido a partir del nuevo conjunto de datos ha sido la presentación de un mapa del cielo con información sobre la polarización de las microondas.