

NOVEDADES CIENTÍFICAS EN 2010

EN QUÍMICA

Es habitual considerar a la Química como la más materialista de las ciencias, pues su objetivo principal no es otro que lograr el conocimiento íntimo de la materia y de sus múltiples transformaciones. Para ello, la Química ha atendido tradicionalmente dos extensos territorios. En primer lugar se ocupa de la estructura de la materia en todos los estados de agregación posibles, con la convicción de que las variadas formas estructurales que pueden adoptar los sistemas materiales son la fuente principal de sus propiedades y el origen de sus muchas diferencias. Por otra parte, aborda también las transformaciones que sufren estos sistemas y que componen el amplio repertorio de las reacciones químicas de todo tipo. Ambos aspectos, el estructural y el dinámico, constituyen el núcleo de la Química actual y centran los esfuerzos de los químicos en sus diversas ocupaciones científicas y profesionales.

El interés hacia el comportamiento de la materia en sus diferentes formas, que es tan característico de la Química, provoca una incesante extensión de sus fronteras, que en la actualidad cubren áreas tales como la búsqueda de nuevas fuentes de energía, la interpretación molecular de la vida o la exploración de las propiedades materiales del espacio exterior a nuestro planeta. En todos estos casos existe el reto de aplicar conocimientos químicos básicos para resolver problemas de trascendencia más amplia, cuyas repercusiones económicas y sociales son evidentes.

En la presente reseña se pretende informar de algunas novedades dentro de todos estos campos de la Química, revisando los estudios publicados a lo largo del año. Se ha intentado que la selección sea mínimamente representativa, aun reconociendo que es imposible que queden recogidas todas las contribuciones relevantes. Para facilitar su consulta, las referencias de los trabajos incluyen autores, título de la revista, volumen y página inicial.

LAS MOLÉCULAS TAL COMO SON:
ESTRUCTURA MOLECULAR Y ENLACE QUÍMICO

El estudio de la estructura de las moléculas individuales, así como de las interacciones entre átomos para formar moléculas y de las propias moléculas entre sí para constituir asociaciones moleculares, se basa en la aplicación de métodos experimentales tales como la espectroscopía o la cristalografía, y en el desarrollo de métodos teóricos derivados de la mecánica cuántica. Es evidente que estos métodos se beneficiarían mucho de la posibilidad de acceder a la visión directa de átomos y moléculas individuales. Este objetivo parecía muy remoto no hace mucho tiempo, pero se acerca cada vez más a nuestro alcance, como un inesperado regalo procedente de nuevas tecnologías pertenecientes al campo de la microscopía. Por supuesto que la instrumentación actual se encuentra muy alejada del concepto de los microscopios ópticos tradicionales de los naturalistas y de los histólogos, pero resulta igualmente útil para la exploración de territorios muy alejados del alcance de nuestros sentidos.

Dentro de este campo merece destacarse la microscopía de emisión estimulada como una técnica que posibilita la visualización de moléculas que en sí mismas no son fluorescentes, o sea no emiten luz de forma espontánea, pero sí lo hacen debidamente excitadas y con ello pueden ser detectadas con una elevada sensibilidad. Tal es el caso de diferentes cromoproteínas (Min y col., *Nature*, 461, 1105). Otra técnica de vanguardia tal como la microscopía de fuerza atómica permite visualizar las posiciones de los átomos y sus enlaces dentro de una simple molécula depositada sobre una superficie; por ejemplo, átomos de oro y plata y moléculas de pentaceno adsorbidos en capas muy finas de cloruro sódico, lo que puede tener aplicaciones prácticas para la electrónica molecular, fotónica y catálisis heterogénea (Gross y col., *Science*, 324, 1428 y 325, 1110).

En el caso de las moléculas de interés biológico, es evidente que tiene gran interés su detección directa en las células vivas. Este objetivo se está consiguiendo mediante la aplicación de técnicas tales como la resonancia magnética nuclear multidimensional, que proporciona

una alta resolución a nivel atómico. De este modo se puede estudiar la estructura de proteínas intactas dentro de las células y relacionarla con su actividad biológica (Sakakibara y col., *Nature*, 458, 102; Inomata y col., *ibid.*, 106). Por otra parte, las formas desestructuradas de las proteínas, a pesar de carecer de una actividad plena, todavía contienen regiones capaces de enlazarse con otras pequeñas moléculas, cuyo estudio es necesario para poder comprender los mecanismos de procesos en que intervienen estas proteínas desordenadas y acaso regularlos a voluntad mediante la interacción con los fármacos adecuados. El uso de diversas técnicas espectroscópicas en forma combinada ha permitido caracterizar los sitios de enlazamiento existentes en formas desordenadas de la oncoproteína *c-Myc*, implicada en muchos tipos de cáncer, y estudiar su interacción con pequeñas moléculas inhibitoras (Hammoudeh y col., *J. Am. Chem. Soc.*, 131, 7390; ver Figura 1).



Figura 1. Modelo de diferentes sitios de enlazamiento de la oncoproteína *c-Myc*, en una estructura desordenada, con pequeñas moléculas que actúan como ligandos inhibitorios y se representan mediante colores (Hammoudeh y col., 2009).

Pero además de perfeccionar los métodos de estudio de las moléculas ya existentes, los químicos deben ocuparse de preparar nuevos materiales y con suerte descubrir en ellos propiedades insospechadas. En este aspecto, la Química del carbono se está mostrando muy fructífera, pues además de los célebres fullerenos que han dado lugar a una rama muy activa de conocimiento se ha dispuesto recientemente del grafeno, una variedad bidimensional del grafito que se presenta en capas individuales de espesor monoatómico y muestra unas características sobresalientes en relación con su resistencia mecánica, semiconductividad electrónica y capacidad de absorción de luz. No es extraño que el grafeno se esté investigando actualmente de modo muy activo, con el aliciente de hallar nuevos métodos de preparación (Kosynkin y col., *Nature*, 458, 872; Jiao y col., *ibid.*, 877; Cano y col., *Nano Lett.*, 9, 1527; Cote, Cruz y Huang, *J.*

Am. Chem. Soc., 131, 11027; ver Figura 2) y explorar sus aplicaciones potenciales, especialmente como material de recubrimiento y componente de circuitos electrónicos (Xia y col., *Nature Nanotech.*, 4, 839).

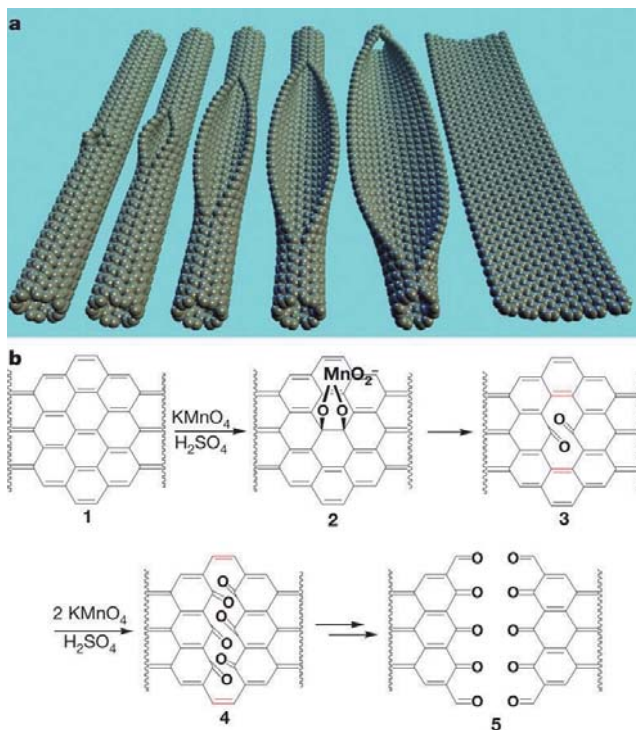


Figura 2. (a) Representación de la apertura gradual de una unidad de un nanotubo de carbono para formar una nanocinta. (b) Mecanismo basado en la acción oxidante del permanganato potásico en medio ácido. Según Kosynkin y col., 2009.

LAS MOLÉCULAS EN TRANSFORMACIÓN: REACCIONES QUÍMICAS

El campo tradicional en que se lleva a cabo el estudio de las transformaciones de las moléculas es el de las reacciones químicas que transcurren con la ruptura y formación de enlaces covalentes. Pero la utilización de catalizadores guarda siempre sorpresas que mantienen en cierto modo el carácter mágico de los cambios químicos. En particular, las reacciones orgánicas de sustitución electrófila aromática siguen unas reglas ya consagradas por el uso que predicen el curso de la reacción en función de los grupos atómicos ya presentes en las moléculas de los reactivos. Estas reglas pueden ser burladas con la ayuda de un catalizador de cobre, que posibilita la entrada de nuevos grupos en posiciones *meta* en lugar de las posiciones *orto* y *para* que serían previsibles a la vista de los sustituyentes que ya existen previamente en el sistema aromático reactivo (Phipps y Gaunt, *Science*, 323, 1593).

Una línea de investigación acorde con las inquietudes actuales es la búsqueda de rutas limpias y sostenibles que eviten la acumulación de residuos perjudiciales. Como ejemplo puede citarse el uso de CO_2 en un proceso de catálisis con cambio de fase, donde el catalizador se recupera en una fase diferente a la de los productos para su reciclado y posterior reutilización (Desset y Cole-Hamilton, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **48**, 1472). También se puede reciclar un catalizador formado por nanopartículas de oro y paladio que permite preparar agua oxigenada por un método más directo que el tradicional, en el que parte del producto se desperdicia en forma de agua normal. Con ello se mejora el rendimiento al tiempo que se simplifica la producción (Edwards y col., *Science*, **323**, 1037; *Angew. Chem. Int. Ed.*, **48**, 8512; ver Figura 3).

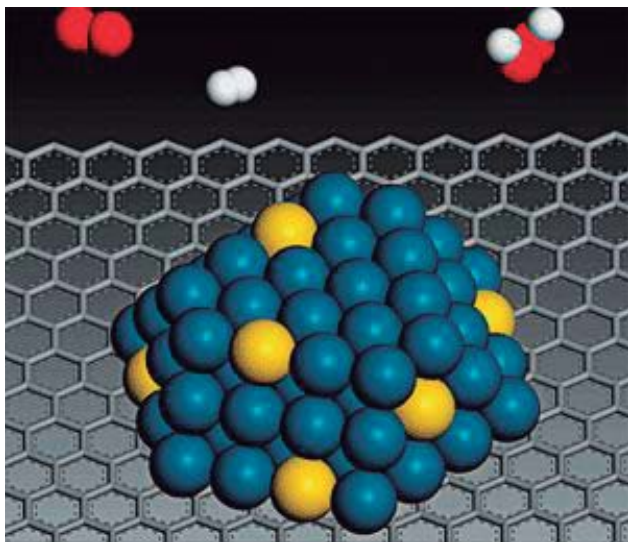


Figura 3. Representación de un catalizador de nanopartículas de Au (amarillo) - Pd (azul), cuyo diámetro típico es menor que 10 nm, en un soporte de carbón activo (gris). Permite hidrogenar directamente oxígeno (rojo) para dar agua oxigenada H_2O_2 , con muy poca proporción de H_2O como subproducto (Edwards y col., 2009).

Otro campo de investigación muy prometedor para la Química del presente siglo es el de las reacciones que implican los enlaces no covalentes. El motivo es que estos enlaces, más débiles y flexibles que los covalentes citados anteriormente, constituyen el mecanismo esencial para el reconocimiento específico entre moléculas. En este reconocimiento se basan los procesos de auto-enamblaje que dan lugar a la construcción de sistemas complejos moleculares, de los que acaso puedan surgir fenómenos emergentes de insospechados alcances, no sólo químicos sino también biológicos. Conviene dejar constancia de una publicación que se ha dedicado re-

cientemente de modo monográfico a este tipo de procesos (Rebek, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, **106**, 10423).

Dado que estos fenómenos son de gran importancia tanto en los sistemas químicos como en los bioquímicos, es evidente el interés de los tratamientos teóricos que puedan aportar una descripción unificada de los mismos. Desde el punto de vista macroscópico que es propio de la termodinámica, se ha publicado una revisión de conjunto de la aproximación teórica que contempla la energía libre y la entropía como parámetros fundamentales en el enlazamiento no covalente (Zhou y Gilson, *Chem. Rev.*, **109**, 4092). Por otra parte, desde el punto de vista microscópico representado por la teoría cuántica, se ha llevado a cabo una discusión de varios modelos teóricos de la transferencia de protón con el objetivo de lograr una descripción adecuada de la cinética de formación de los sistemas estabilizados por enlaces de hidrógeno (Peters, *Acc. Chem. Res.*, **42**, 89). También se ha analizado la relación entre los dos mecanismos de interacción intermolecular más importantes, que son el enlace de hidrógeno y la transferencia de carga, lo que ha permitido calcular la transferencia de densidad electrónica que acompaña a la formación de enlace de hidrógeno (Sadlej-Sosnowska, *Int. J. Quant. Chem.*, **109**, 294).

Con frecuencia, las interacciones intermoleculares dan lugar a procesos en los que unas moléculas se asocian a otras formando complejos relativamente fuertes. En la discusión de los resultados experimentales correspondientes a estos procesos de asociación molecular, las constantes de equilibrio desempeñan un papel crucial por tratarse de magnitudes que recogen de modo claro e inequívoco, en un valor numérico concreto, la tendencia de las reacciones a realizarse y la estabilidad de los correspondientes productos, de modo enteramente similar a las reacciones químicas ordinarias. Se ha llevado a cabo un estudio detallado del modo característico en que varían las constantes de asociación de moléculas aromáticas idénticas entre sí, a medida que aumenta el tamaño de los complejos formados (Beshnova y col., *J. Chem. Phys.*, **130**, 165105).

Por otro lado, una gran parte de las reacciones químicas de interés práctico tienen lugar en disolución, donde las moléculas de los reactivos se encuentran rodeadas de un gran número de moléculas de disolvente, que no se limitan a formar parte del entorno sino que muchas veces condicionan de modo decisivo el curso del proceso. En relación con este fenómeno, designado genéricamente como efecto del disolvente, se ha elaborado un estudio de conjunto del problema de la solvata-

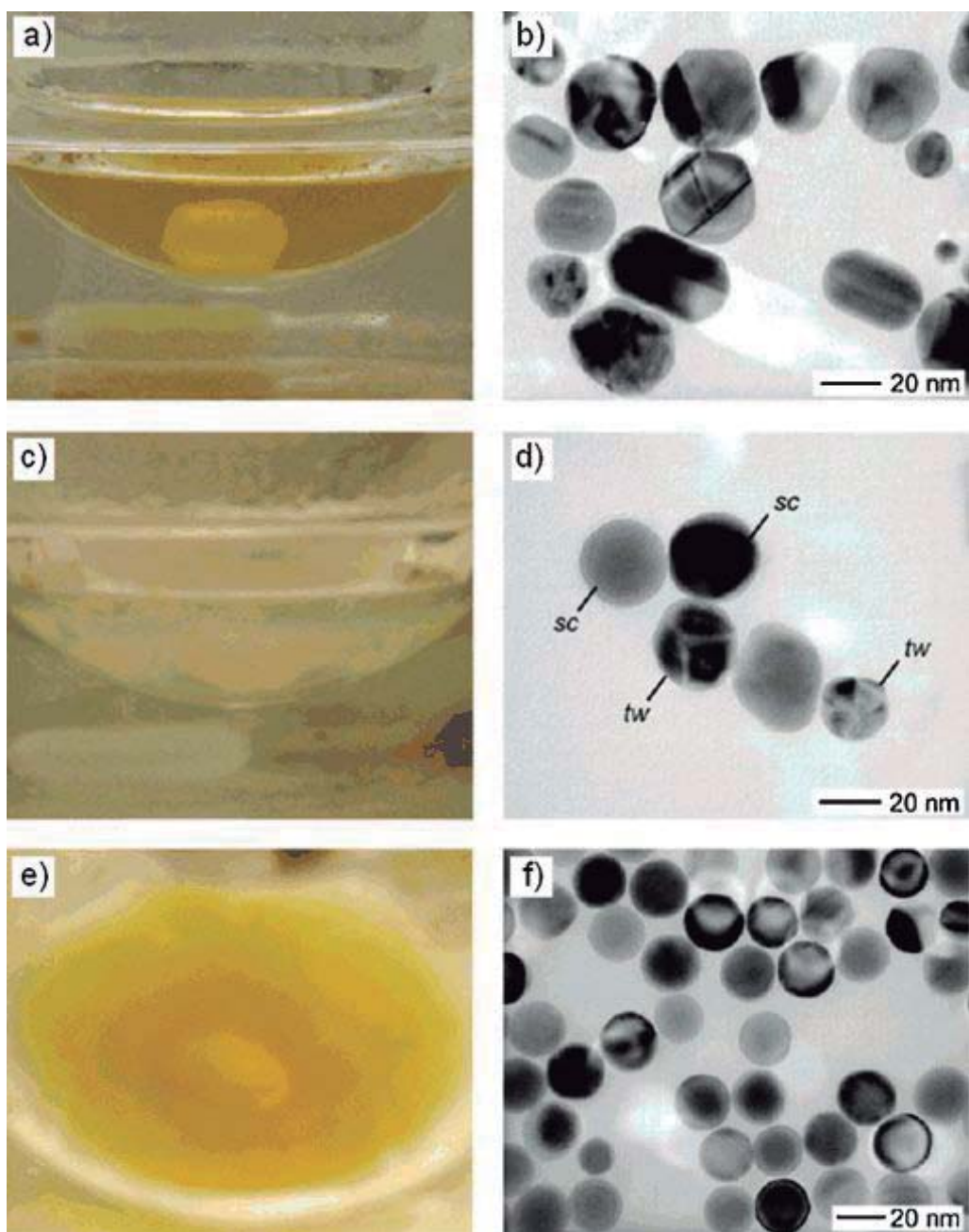


Figura 4. Detalles de la síntesis de nanocristales de plata a diferentes tiempos de reacción: a), b) 10 minutos; c), d) 2 horas; e), f) 44 horas. Columna izquierda: Fotografías de la mezcla de reacción, donde el color amarillo indica la formación de nanocristales de plata. Columna derecha: Imágenes por TEM (microscopía electrónica de transmisión) de los nanocristales producidos en función del tiempo. Abreviaturas: sc: monocristales; tw: cristales agregados, que van desapareciendo al progresar la reacción. Según Xia y col., 2009.

ción (El Seoud, *Pure Appl. Chem.*, **81**, 697). También se ha estudiado la naturaleza de los enlaces de hidrógeno que se producen en el seno de disolventes fluorados (O'Neal y Weber, *J. Phys. Chem. B*, **113**, 149), así como las interacciones soluto-disolvente que tienen lugar en mezclas binarias de ácidos y disolventes orgánicos (Ari-vazhagan, Parthipan y Thenappan, *Spectrochim. Acta A*, **74**, 860; *Phil. Mag. Lett.*, **89**, 735).

En los dominios aparentemente más serenos de la formación de compuestos por cristalización, otro reto que se está afrontando en nuestros días es la síntesis controlada de nanocristales metálicos para lograr la forma geométrica deseada, lo que puede tener importantes aplicaciones prácticas para la nanotecnología en estado sólido (Xia y col, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **48**, 60; ver Figura 4).

QUÍMICA DE NUEVAS FUENTES DE ENERGÍA

El uso creciente de la energía procedente de fuentes renovables está siendo alentado por organismos internacionales, con vistas a moderar la contaminación reduciendo el consumo de combustibles fósiles o incluso reducir al mínimo posible el calentamiento global de origen humano. En concreto, en la Unión Europea existe el compromiso para el año 2020 de que el uso de energía renovable ascienda al 20% de la energía total consumida (Kautto y Jäger-Waldau, EUR 23819 EN). Por tanto, la investigación de nuevos recursos energéticos es un campo muy dinámico en la actualidad. No obstante, existe una intensa controversia entre los partidarios de las fuentes de energía limpias y aquellos que objetan su alto coste y bajo rendimiento, en relación con otras formas de energía convencionales, más contaminantes pero también mucho más eficientes. Este debate tiene una especial importancia en los momentos actuales de crisis económica, donde la prioridad de las inversiones resulta más perentoria que en otras épocas de mayor bonanza.

En principio, la energía termoeléctrica representa un buen medio para aprovechar el calor disipado por otros recursos, a fin de crear una diferencia de temperatura que a su vez produce una corriente eléctrica por medio del efecto Seebeck. La estrategia actual para aumentar la calidad de los materiales termoeléctricos se centra en el desarrollo de materiales nanoestructurados, ejemplo de los cuales son los sistemas bifásicos compuestos por nanopartículas de PbTe y PtTe₂ (Zhou y col., *Adv. Mater.*, 21, 3196). Pero las perspectivas no son del todo optimistas, pues se han presentado argumentos de que pese a los recientes avances, la energía termoeléctrica no será nunca tan eficiente como la máquina de vapor tradicional, que por otra parte y desde los lejanos tiempos del ciclo de Carnot no ha sido nunca un modelo muy acabado de rendimiento; así que se ha sugerido que la energía termoeléctrica quede limitada a aquellas aplicaciones para las cuales la tecnología actual es inadecuada o ni siquiera se emplea (Vining, *Nature Materials*, 8, 83).

Tal puede ser el caso de un refrigerador termoeléctrico destinado a habitantes de zonas desérticas que no disponen de una red fija de suministro de electricidad (Abdul-Wahab, *Renewable Energy*, 34, 30). El enfriamiento puede lograrse también combinando un dispositivo solar termoeléctrico con un proceso de adsorción

que tiene lugar con carbón activo y metanol (Abdullah y col., *Energy Fuels*, 23, 5677).

La energía solar termoeléctrica es otra alternativa que se basa en aprovechar la radiación solar para calentar un fluido, normalmente aceite o agua, produciendo vapor, y mediante un ciclo termodinámico convencional se genera energía eléctrica de modo similar a una central térmica clásica. Esta fuente de energía tiene una gran actualidad en nuestro país, que acoge más de la tercera parte de toda la capacidad termosolar instalada en el mundo. El reto está en que se siga generando energía aunque el cielo esté nublado o sea de noche, lo que requiere que la energía térmica producida durante el período favorable se pueda almacenar convenientemente, y ahí es donde interviene la Química. Las exigencias son sencillas ya que basta una mezcla de sales fundidas como la constituida por nitrato sódico al 60% y nitrato potásico al 40%, pero eso sí, de alta calidad y en cantidades suficientes, lo cual demanda la capacidad de producción de grandes empresas químicas tales como la BASF.

Otro campo de aplicación bastante prometedor es el de aquellas células de energía solar en que las pilas termoeléctricas se combinan con pilas fotovoltaicas para formar un dispositivo híbrido, donde la iluminación con luz solar provoca la diferencia de temperatura necesaria para la producción de energía termoeléctrica. Se ha elaborado un tratamiento teórico que optimiza la generación de compuestos químicos con alto contenido en energía aprovechando la luz solar, mediante el uso combinado de elementos fotoquímicos y electroquímicos en un proceso complejo designado como STEP (Licht, *J. Phys. Chem. C*, 113, 16283).

En cuanto a la energía solar puramente fotovoltaica, que recordemos que se obtiene aprovechando los rayos solares para producir el efecto fotoeléctrico en un dispositivo adecuado, el objetivo pendiente sigue siendo el de lograr una eficiencia satisfactoria en comparación con otras fuentes de energía utilizadas tradicionalmente. Sólo así sería rentable extender las experiencias de laboratorio al consumo cotidiano por parte del gran público. Con este criterio se vienen realizando numerosas investigaciones. Se ha encontrado que los dispositivos fotovoltaicos formados por nanopartículas de compuestos ternarios parecen tener un rendimiento superior al de nanocristales binarios puros de PbS o PbSe. En consecuencia, se han construido células solares constituidas por nanocristales altamente confinados del compuesto

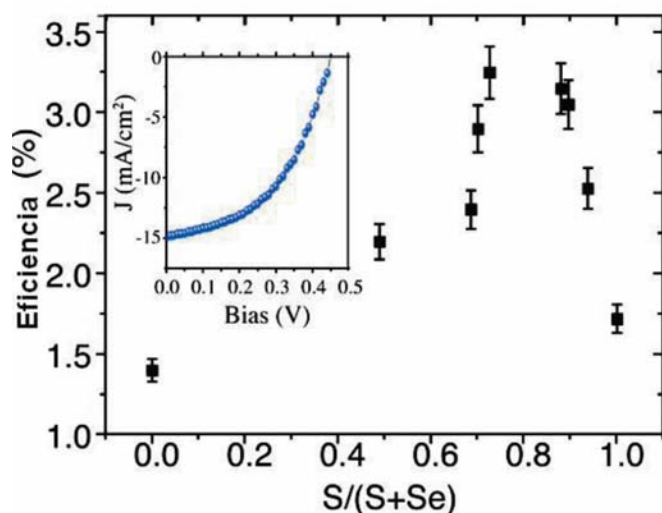


Figura 5. Izquierda: Eficiencia de células solares formadas por nanocristales de $Pb S_x Se_{(1-x)}$ en función de la concentración de azufre, desde PbSe puro hasta PbS puro. Se inserta la curva de funcionamiento de la composición óptima. Derecha: Distribución de azufre (en rojo) y selenio (en azul) dentro de algunos nanocristales. Según Ma y col., 2009.

inorgánico ternario $Pb S_x Se_{(1-x)}$ que alcanzan una eficiencia del 3,3% frente a un 1,4 – 1,7% de los compuestos binarios citados (Ma y col., Nano Lett., 9, 1699; ver Figura 5). Otra alternativa está en las células solares híbridas formadas por mezclas de polímeros orgánicos conjugados y semiconductores inorgánicos, que en principio presentan el interés de combinar las ventajas de ambos materiales. Así se ha construido una célula solar formada por un “composite” de nanocristales de silicio y poli-3(hexiltiofeno), que presenta buenas cualidades tales como su falta de toxicidad y la relativa abundancia del Si utilizado en su construcción, pero ofrece una eficiencia modesta en comparación con otras fuentes de energía, de tan sólo un 1,15% (Liu, Holman y Kortshagen, Nano Lett., 9, 449).

En otra línea diferente que busca la inspiración en las formas naturales, se ha logrado la síntesis de estructuras cíclicas de porfirina que presentan una estabilidad satisfactoria debido a la intervención simultánea de enlaces covalentes y no covalentes, y que pueden considerarse modelos adecuados de los complejos que actúan realmente como colectores de luz durante la fotosíntesis de las plantas verdes (Aratani, Kim y Osuka, Acc. Chem. Res., 42, 1922).

Por último, en otro campo que corresponde a los recientes avances de la electrónica molecular de compuestos orgánicos, puede indicarse que se han preparado diodos híbridos emisores de luz de punto cuántico (QD-LEDs) que presentan electroluminiscencia sintonizable en toda la región del espectro visible, desde los 460 nm del azul hasta los 650 nm del rojo (Anikeeva y col., Nano Lett., 9, 2532; ver Figura 6).

LAS MOLÉCULAS DE LA VIDA

Uno de los grandes retos que se siguen planteando en la Química actual es el de comprender el misterio de la vida al nivel de complejidad que es propio de esta ciencia, o sea en términos de átomos y moléculas.

Cabe considerar varias vías posibles. Por una parte se puede rastrear cómo empezó todo, retrocediendo en la pista de la vida hasta el punto en que lo único que existía era la Química. Este es el enfoque que adopta la evolución molecular. O bien se puede intentar el camino inverso, o sea diseñar y construir sistemas que presenten un comportamiento similar al biológico por medios artificiales a partir de meros compuestos químicos. Tal es el objetivo de la bio-

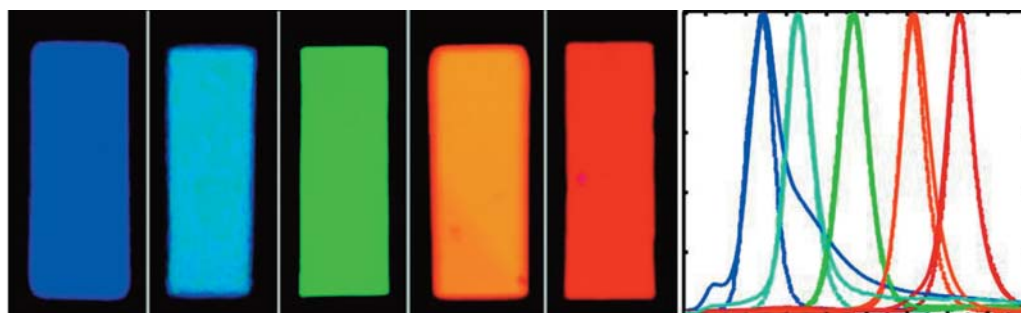


Figura 6. Izquierda: Fotografías de pixels de diodos híbridos QD-LED operando bajo diferentes voltajes en función del color. Derecha: Los correspondientes espectros de electroluminiscencia y fotoluminiscencia representados en una escala normalizada. Según Anikeeva y col., 2009.

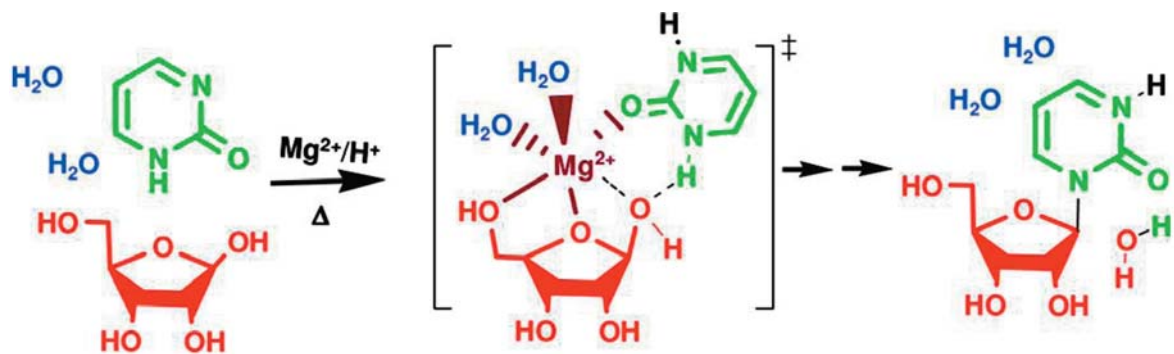


Figura 7. Mecanismo propuesto para la formación de un nucleósido a partir de una base pirimidínica y un azúcar no activado, en una posible reacción prebiótica catalizada por un ion Mg^{2+} que actúa como ácido de Lewis (Sheng y col., 2009).

logía sintética. También cabe la posibilidad de identificar aquello que marca exactamente la diferencia entre lo vivo y lo no vivo, llegando así a la definición de vida. Esta es una opción muy popular que abre interminables discusiones en un contexto de complejidad creciente, y muy posiblemente lleva a un callejón sin salida desde el punto de vista de un científico experimental.

Una línea de investigación que puede adscribirse a la escuela de la evolución molecular se basa en la interacción de radiaciones electromagnéticas con compuestos químicos relativamente sencillos para lograr la formación de moléculas que presenten propiedades biológicas significativas. En este campo se ha obtenido la dimerización del aminoácido L-fenilalanina, inducida por radiación infrarroja de alta frecuencia (Olsztyńska-Janus y col., *J. Mol. Struct. TheoChem.*, 911, 1), así como la formación espontánea de uracilo mediante la irradiación de su molécula madre, la pirimidina, en hielo puro, pero esta vez con luz ultravioleta (Nuevo y col., *Astrobiology*, 9, 683). Siguiendo una orientación similar se ha investigado la posibilidad de sintetizar constituyentes de los ácidos nucleicos tales como nucleósidos y ribonucleótidos derivados de la pirimidina, bajo condiciones pre-

bióticas que se estiman plausibles (Sheng y col., *J. Am. Chem. Soc.*, 131, 16088; Powner, Gerland y Sutherland, *Nature*, 459, 239; ver Figura 7).

En cuanto al problema de identificar el modo en que el ARN interacciona con aminoácidos, que es la base de procesos tan importantes como la traducción del mensaje genético, se han detectado aspectos estereoquímicos que permiten dar un paso adelante en la explicación de la naturaleza concreta del código genético como resultado de interacciones químicas específicas que han guiado la evolución de estos sistemas, en contraste con la hipótesis más tradicional de un mero accidente que sucedió por azar y quedó congelado en el tiempo (Yarus, Widmann y Knight, *J. Molec. Evol.*, 69, 406).

Dentro de la orientación que le es propia a la biología sintética pueden enmarcarse los experimentos orientados a la construcción de polímeros que se pliegan como las proteínas, lo que se consigue alterando químicamente sus unidades de tal modo que se forma una cadena de enlaces de hidrógeno que fuerzan al polímero a plegarse en nanopartículas de un tamaño de unos 20 nm. Este comportamiento es reversible mediante el control de la acidez y la irradiación con luz ultravioleta. (Foster, Berda y Meijer, J.

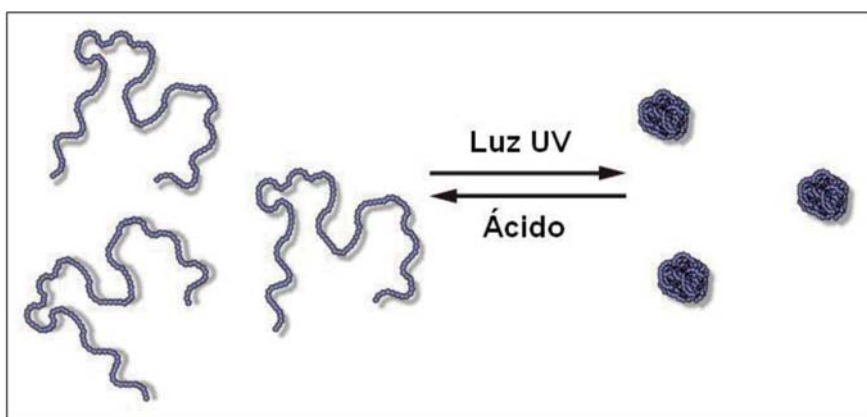


Figura 8. Esquema de la preparación reversible de nanopartículas desde poli-norbornenos sustituidos. La estructura plegada se logra mediante irradiación con luz ultravioleta y puede expandirse de nuevo por la adición de ácido (Foster y col., 2009).

Am. Chem. Soc., 131, 6964; ver Figura 8). Existen muchas aplicaciones potenciales, desde la preparación de sucedáneos de enzimas hasta la fabricación de sustancias adecuadas para revestimientos.

También dentro de este enfoque estructural se ha propuesto un nuevo refinamiento, a nivel de resolución atómica, del mecanismo que da cuenta de la propagación de la estructura en doble hélice en el ARN a partir de un centro de nucleación inicial (Mohan y col., J. Phys. Chem. B, 113, 2614). Por otra parte, el estudio cuantitativo sistemático de este tipo de estructuras permite obtener una información relevante acerca de las modalidades de emparejamiento que pueden adoptar las nucleobases en el ARN, fenómeno que tiene lugar con una variabilidad muy superior a la que se conoce en el ADN (Olson y col., Methods, 47, 177).

No cabe duda de que proteínas y ácidos nucleicos presentan siempre un atractivo especial, ya que sus complejas estructuras parecen guardar la clave del misterio fundamental de la vida, pero el estudio riguroso de este problema no debería omitir otras sustancias mucho más simples y aparentemente anodinas. No conviene olvidar que por ahora, las únicas modalidades de vida conocida requieren de algún modo la existencia de un compuesto químico tan común como el agua. La explicación de este requisito fundamental ha sido objeto de intensas investigaciones, no sólo desde un enfoque biológico sino también fisicoquímico, sin llegar a conclusiones definitivas. En este sentido conviene anotar la importancia que puede tener el movimiento de traslación de las moléculas de agua para el mantenimiento de la vida, pues este mecanismo tan sencillo aportaría el aumento de entropía necesario para compensar la disminución de entropía que se produce durante

los procesos de auto-ensamblaje de los sistemas de importancia biológica, y que en sí mismo sería un factor desestabilizador para dichos sistemas. A partir de esta hipótesis se ha elaborado una fructífera línea de investigación, en la que se han estudiado aspectos de la hidratación y la estabilidad térmica de proteínas que pueden contribuir al conocimiento del código de plegamiento de estos compuestos (Kinoshita y col., Chem. Phys. Lett., 474, 190; Int. J. Mol. Sci., 10, 1064; J. Chem. Phys., 130, 014707 y 144705; Ibid., 131, 205102; Phys. Rev. E, 79, 011912 y 030905R; Proteins, 77, 950).

QUÍMICA DEL ESPACIO

Otro de los grandes enigmas científicos que permanecen sin resolver es el que se refiere al origen y composición del universo. No cabe duda de que se trata de un problema inmenso aunque se centre tan sólo en la región de nuestro propio sistema solar. De modo similar al problema del origen de la vida, pueden seguirse dos caminos muy diferentes. Es posible adoptar una actitud especulativa y sentarse a discutir (es posible que interminablemente), o bien puede recurrirse a la observación experimental, con todas las dificultades que deben esperarse en este caso. Afortunadamente, la Química es capaz de aportar datos concretos que adecuadamente interpretados podrían adquirir gran relevancia para la formulación de un modelo global.

Como se comprende fácilmente, uno de estos datos de importancia clave es la existencia de agua, en gran parte porque es condición necesaria para explorar la posibilidad de vida fuera de nuestro planeta. La aplicación de técnicas analíticas cada vez más sensibles revela que

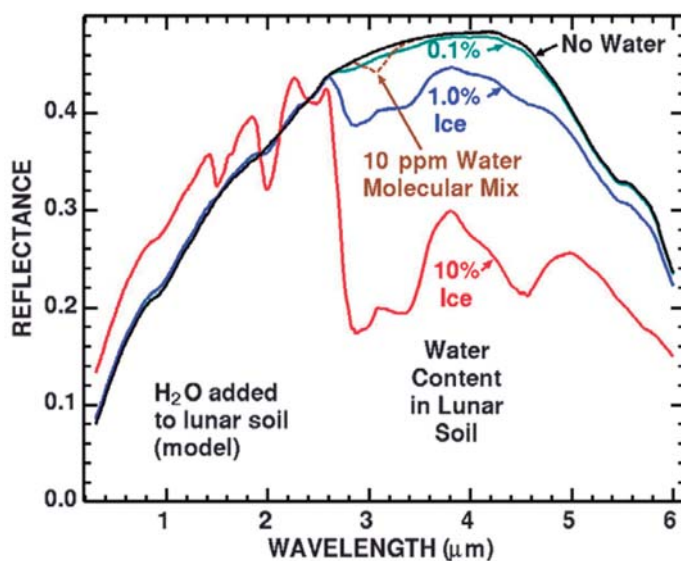


Figura 9. Representación mediante modelos del espectro que daría el agua procedente del suelo lunar a diferentes concentraciones. Los cambios en la abundancia del agua se reflejan en especial en la región de 3 μm (Clark, 2009).

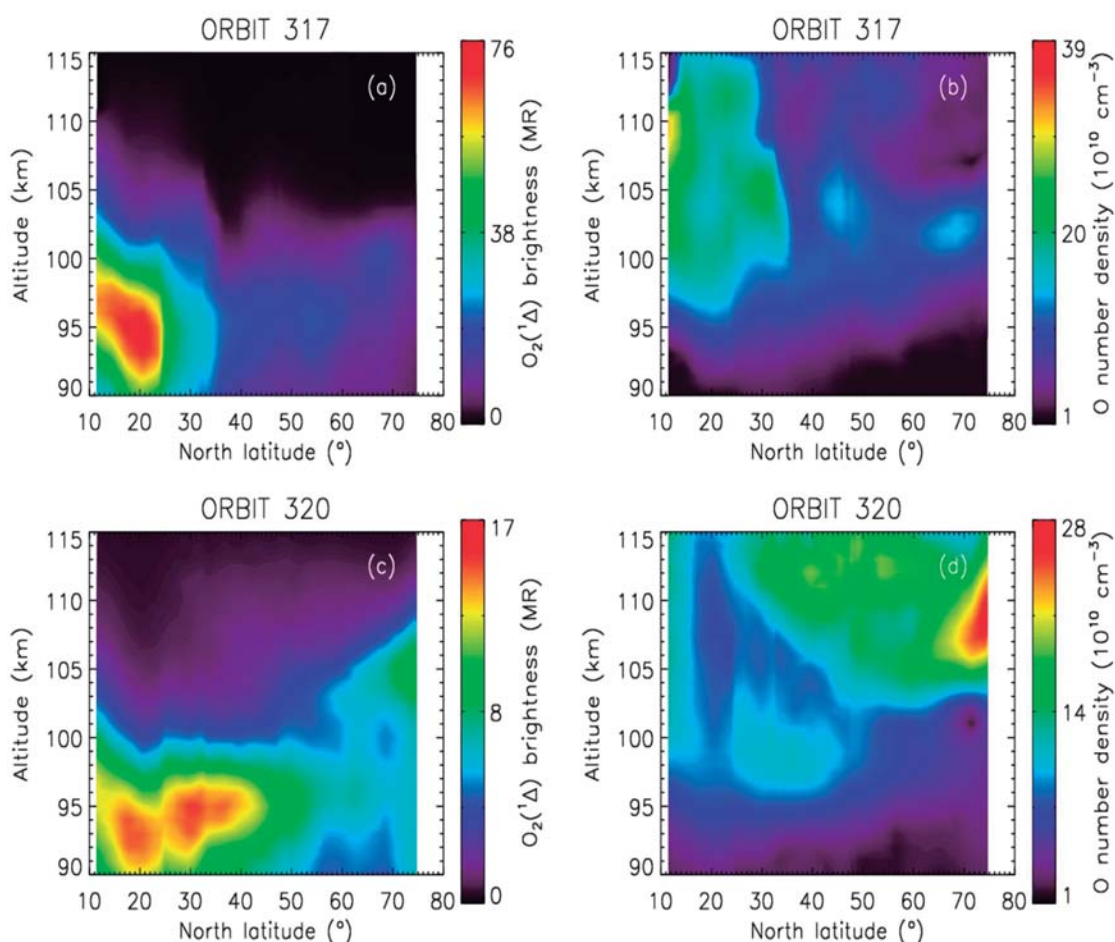


Figura 10. Distribución por latitud y altitud de las evidencias de O_2 molecular (columna izquierda) y de O atómico (columna derecha) registradas por el espectrómetro de imágenes VIRTIS, incluido en la misión Venus Express de la Agencia Especial Europea, durante dos órbitas diferentes (Gérard y col., 2009).

la cantidad de agua existente en la Luna puede ser mucho mayor que la que se había supuesto hasta ahora (Lucy, Science, 326, 531). En efecto, los datos obtenidos en 1999 por el espectrómetro VIMS han sido reconsiderados recientemente y se han encontrado absorciones características del agua y del ion hidroxilo en material recogido en la superficie lunar (Clark, Science, 326, 562; ver Figura 9). Otros datos actuales procedentes del satélite LCROSS de la NASA, destinado a la observación de cráteres lunares, revelan también la existencia de agua en regiones de sombra perpetua (Dino, NASA Current Missions, 15 Nov. 2009; NASA NP-2009-05-98-MSFC). En fin, la existencia de H_2O y OH en la superficie de la Luna se ha confirmado también con los datos obtenidos por la primera misión enviada por India, designada como Chandrayaan-1 (Pieters y col., Science, 326, 568).

En relación con el planeta Marte, prosiguen los experimentos del laboratorio espacial *Phoenix*, que ha realizado diferentes análisis de disoluciones acuosas con resultados positivos para el anión perclorato y los cationes

magnesio y sodio, entre otras especies familiares para la química terrestre (Hecht y col., Science, 325, 64). Quizá una evidencia más contundente procedente de esta misma misión sea la detección de nubes con presencia de hielo en la atmósfera marciana, que resultan ser similares a los cirros nubosos de nuestra atmósfera (Whiteway y col., Science, 325, 68).

También sigue aumentando nuestro conocimiento de la Química del planeta Venus. Se han estudiado las variaciones de concentración del CO en la troposfera, o sea la capa gaseosa en contacto con la superficie de este planeta, mediante espectroscopía en el infrarrojo próximo (Tsang y col., Icarus, 201, 432). En otra capa más alta, la mesosfera, se ha obtenido la distribución del oxígeno atómico utilizando la técnica VIRTIS de espectroscopía de imágenes térmicas en las regiones visible e infrarroja (Gérard y col., Icarus, 199, 264; ver Figura 10).

Fernando Peral Fernández
Dpto. de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas