





II CURSO DE DIVULGACIÓN "LOS AVANCES DE LA QUÍMICA Y SU IMPACTO EN LA SOCIEDAD"











PATENTES Y MARCAS. FUNDADA EN 1891.



La Química: De "entre la Física y la Biología" a "entre la Biomedicina y la Ciencia de los Materiales". Oportunidades de investigación en Química.

Bernardo Herradón

II CURSO DE DIVULGACIÓN "LOS AVANCES DE LA QUÍMICA Y SU IMPACTO EN LA SOCIEDAD"









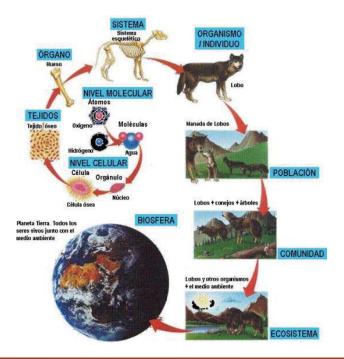








¿Dónde está la Química?





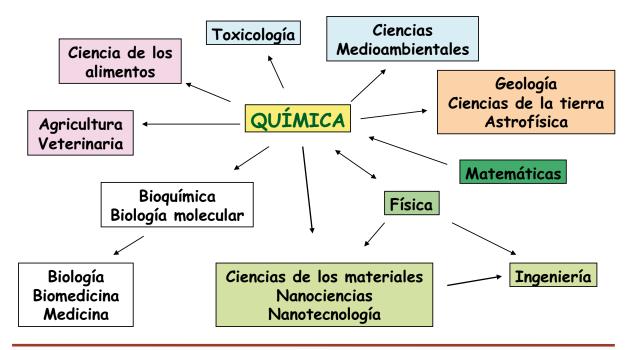


http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



Fundación **BBVA**

La Química y su relación con otras Ciencias











La Química entre la Física y la Biología

BIOLOGÍA



QUÍMICA



FÍSICA

¿Qué significa?

- > Objeto de estudio
- > Métodos de estudio
- > Aproximación científica
- > Aspectos filosóficos





http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/



Fundación **BBVA**

La Química entre la Física y la Biología

BIOLOGÍA



QUÍMICA

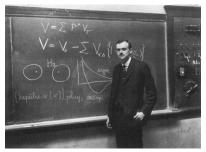


FÍSICA

¿Puede la Física explicar la Química?

¿Puede la Química explicar la biología?

Reduccionismo frente a autonomía



The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty lies only in the fact that application of these laws leads to equations that are too complex to be solved.

Paul Dirac









La Química entre la Física y la Biología





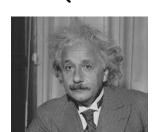
QUÍMICA



FÍSICA

Reduccionismo o autonomía

La Química es algo demasiado serio para dejársela a los químicos (A. Einstein)



La Física es algo demasiado serio para dejársela a los físicos (D. Hilbert)







http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



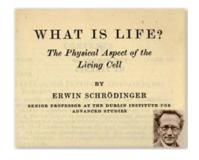


Las relaciones entre la Química y la Biología

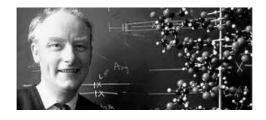
Extensión de la biología

La Bioquímica: antecedente de la Química Orgánica

¿Era necesario el invento de la "Biología Molecular"?







Invento de físicos









Papel insignificante de la Química en el nacimiento y desarrollo de la Biología Molecular

Biología moderna: racionalización a nivel molecular o a nivel evolutivo.

Estructura

Reactividad

Interacciones no covalentes

Relaciones estructura-propiedad

En definitiva, iQuímica!





http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/



Fundación **BBVA**

La Química entre la Física y la Biología









FÍSICA

Reduccionismo o autonomía

MATEMÁTICAS (Matematización de la Ciencia)

Las difíciles relaciones entre la Física y la Química

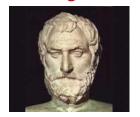








La antigüedad: sólo una ciencia natural (filosofía) y las matemáticas





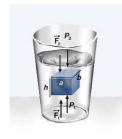












Arquímedes: "ancestro" de la Física



Demócrito





http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/





Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

La oscura edad media: los matemáticos árabes e italianos. Paracelso.



Trabajos en óptica









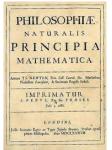




La época dorada. Nacimiento de la Física









Galileo: método científico. Patriarca de la Física

Las matemáticas son el alfabeto con el cual Dios ha escrito el Universo.

Otras aportaciones:









Newton: Padre de la Física







http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/





Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

Los fundamentos de la Física

La Física moderna fue creada por los matemáticos









La época dorada. Nacimiento de la Física. ¿Sin noticias de la Química?









Alquimista. Primer intento de reducir la Química a la Física. Sin éxito

Boyle y su escuela (Hooke, Mayow)

Jean Rey (c. 1582/3-c. 1645)

On an Enquiry into the Cause wherefore Tin and Lead Increase in Weight on Calcination

excerpt, originally published as a pamphlet in Bazas, France, 1630 [from Alembic Club reprint #11, Essays of Jean Rey (Edinburgh, 1895)]





http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



Fundación **BBVA**

Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia El nacimiento de la Química como ciencia moderna

Teoría del Flogisto: Un siglo de retraso conceptual



Lavoisier: rigor en las medidas.







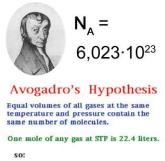




El nacimiento de la Química como ciencia moderna

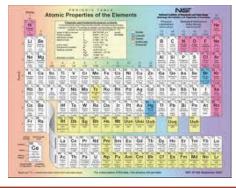
La Química: la Ciencia de moda en el siglo XIX. Experimentos sensacionales y útiles para la sociedad. Poca base teórica.















http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



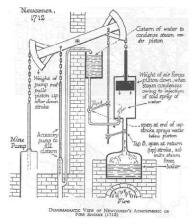
Fundación **BBVA**

Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

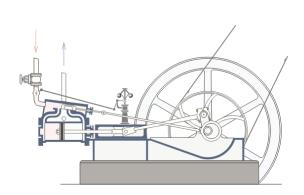
Termodinámica

Utilización de las formas de energía: calor, electricidad, mecánica. Fuentes de energía: química, solar, eólica, solar, nuclear, mecánica, mareas, etc...

Desarrollo de la Termodinámica: máquina de vapor. La fuente de energía es el carbón (energía química).



Newcomen (1711)



Watt (1774)

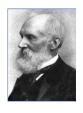
Los padres de la Termodinámica

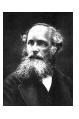














Carnot

Mayer

Joule (1796-1832) (1814-1878) (1818-1889) (1822-1888)

Clausius

Kelvin

Maxwell (1824-1907) (1831-1879) (1844-1906)

Los principios de la termodinámica:

Cero: Definición de temperatura.

> Primero: Conservación de la energía.

> Segundo: Imposibilidad de usar toda la energía (aumento de la

entropía).

> Tercero: La entropía de un sólido perfecto a 0 K es 0.





http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/



Fundación BBVA

Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

Los fundamentos de la Química

we are occupied in amassing a vast collection of receipts for the preparation of different substances... which may be of no more service to the generalizations of the science [of chemistry], whenever our Newton arises, than, I conceive, the bulk of the stars were to the conception of gravitation.

Vernon Harcourt (1875)









El nacimiento de la Química física (y Fisicoquímica)

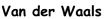














Nernst



Química general

Química teórica





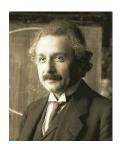
http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicavsociedad/



Fundación **BBVA**

Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

Los fundamentos de la Química: la mecánica cuántica aplicada a la Química (Química cuántica)





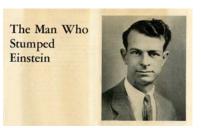






$$\Delta t \cdot \Delta E \ge h$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \left(\frac{8\pi^2 m}{h^2}\right) (E - V) \phi = 0.$$











Los fundamentos de la Química

La Química moderna ha sido fundamentada por los físicos

Hay muchos temas pendientes:

Conceptos fundamentales: orbital, enlace, electronegatividad, conjugación, etc.

Estructura

Periodicidad de las propiedades químicas.

¿Existe una "filosofía química"?

Temas de investigación pendientes





http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/



Fundación **BBVA**

La Química proporciona objetos de estudio a otros científicos:

GRAFENO





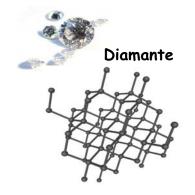




Estado físico: dependiente de las interacciones entre moléculas.



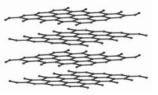
CARBÓN ACTIVO (C)





Grafito









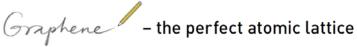
http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



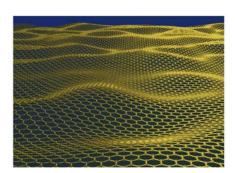
Fundación **BBVA**



THE NOBEL PRIZE IN PHYSICS 2010



Graphene is a form of carbon. As a material it is completely new – not only the thinnest ever but also the strongest. As a conductor of electricity it performs as well as copper. As a conductor of heat it outperforms all other known materials. It is almost completely transparent, yet so dense that not even helium, the smallest gas atom, can pass through it.







Geim

Novoselov

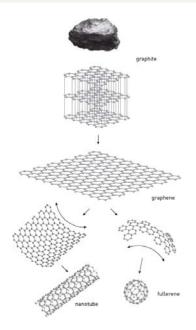








PRODUCCIÓN DE GRAFENO Y RELACIÓN CON LOS NANOTUBOS DE CARBONO Y LOS FULLERENOS







http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/





Hacia la matematización de la ciencia.

Esto se logra a través de diversos caminos:

En el caso de la Química, a través de la Física.

En el caso de la Biología, a través de la Química.









Química y Matemáticas

¿Necesita la Química a las Matemáticas?

Química Analítica: No

Química Inorgánica: No

Química Orgánica: No

Química Física: a veces

La respuesta global es **SI**

Para explicar mejor los resultados pasados y predecir los futuros





http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



Fundación **BBVA**

La Química entre la Biomedicina y la Ciencia de los Materiales

BIOLOGÍA



FÍSICA



BIOMEDICINA

Medicina
Biología humana
Biología del organismo
Fisiología
Inmunología
Neurociencia
Endocrinología
Bioquímica
Biología celular
Biología molecular
Química
Materiales
Física

Matemáticas



MATERIALES

Química Física Nanociencia Nanotecnología Ingeniería Matemáticas

La Química y la Biomedicina

Nuevas vías de investigación en Biomedicina, para la que se necesitarán moléculas.

Síntesis, estructura, relación con la actividad biológica, es decir, Química.

¿Se reconoce el papel del químico en esta investigación?





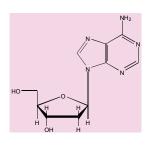
http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/

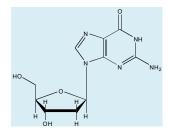


Fundación BBVA

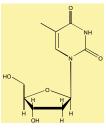
Secuencia de nucleótidos

3' AGCTCTCCCTTTAGTTAAGACACTTGCTATTAGGTCA 5'



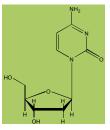


Adenina (A)

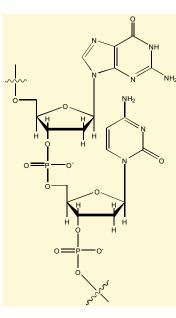


Timina (T)

Guanina (G)



Citosina (C)



GC

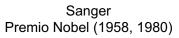
Proyecto Genoma Humano (o de cualquier otra especie): Depende de reacciones químicas.





Secuenciador de DNA



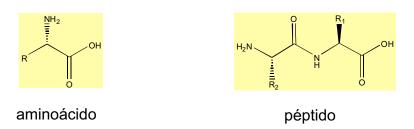




Gilbert Premio Nobel (1980)

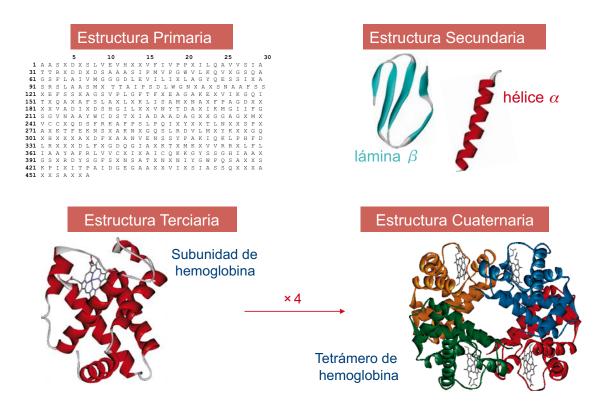
Transmisión de información genética

Dogma de la biología molecular



Proteína: polímero de aminoácidos

La Química y la vida: Proteínas



La Química y la vida. Impacto sobre la salud.

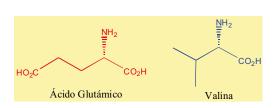


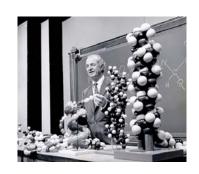
Hemoglobina

La anemia falciforme: La primera enfermedad molecular (1949)



Enfermedad producida por la mutación de un único aminoácido (origen genético).





Linus Pauling. Premio Nobel de Química (1954) y de la Paz (1962)

¿Es la Biología química (Chemical Biology) algo nuevo?

CHEMBIOCHEM

DOI: 10.1002/cbic.200800758

The State of the Art of Chemical Biology

Karl-Heinz Altmann, Johannes Buchner, Horst Kessler, François Diederich, Bernhard Kräutler, Stephen Lippard, Rob Liskamp, Klaus Müller, Elizabeth M. Nolan, Bruno Samori, Gisbert Schneider, Stuart L. Schreiber, Harald Schwalbe, Claudio Toniolo, Constant A. A. van Boeckel, Herbert Waldmann, and Christopher T. Walsh

ChemBioChem 2009, 10, 16-29





Chemical biology is a new term used to emphasize the importance of chemistry in exploring the potential of chemical structures to influence biological functions. Although this concept is far from being new—just think of Emil Fischer or Emil von Behring-in the last decades it has sparked new interest in this area and brought the idea into the focus of organic chemists. This was necessary, as many

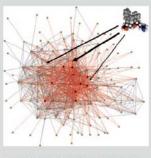


Figure 2. Interaction of a small-molecule with a biological network

chemists had forgotten that chemistry is not only the science for creating new structures, but also for understanding their biological and physical properties. The reper-

toire of synthetic methods for preparing complex structures has expanded enormously in recent years. However, exciting

Siglo XX: La época de los plásticos

Plastico

Macromolécula

Polímero

¿Los científicos que investigan en polímeros (macromoléculas), investigan en Química?









La época de los plásticos: Bakelita.

Bakelite was the first synthetic plastic and was, as such, a great contributor to the entrance of mankind into the "plastics age".

Leo Hendrik Baekeland (1863–1944)



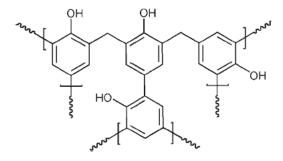


Figure 6. Chemical structure of a phenol formaldehyde Bakelite thermoset with complete three-dimensional cross-linking.





http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



Fundación **BBVA**

Siglo XX: La época de los plásticos

¿Estructura? ¿Naturaleza?

Staudinger en 1922 propuso que estos compuestos estaban formados por cadenas largas de átomos unidos por enlaces covalentes.

Macromolécula.

Premio Nobel en 1953.

Otras contribuciones de Staudinger:





 $R-N_3 \xrightarrow{PPh_3} R-NH_2$









Siglo XX: La época de los plásticos



Ziegler



Natta



"for their discoveries in the field of the chemistry and technology of high polymers"

Catalizadores de polimerización



Flory

Premio Nobel en 1974

"for his fundamental achievements, both theoretical and experimental, in the physical chemistry of the macromolecules"

Estructura (conformación) de macromoléculas

Wallace Carothers

(Burlington, 1896-Filadelfia, 1937) Químico estadounidense. Se doctoró en 1924 por la Universidad de Illinois. En 1928 se incorporó a la compañía Du Pont, en Wilmington, con el cargo de director de investigación de Química orgánica. Especializó su trabajo en los procesos de polimerización. Obtuvo su primer éxito en 1931 al producir neopreno, un caucho sintético derivado del vinilacetileno, y en muchos aspectos superior al caucho natural. De su investigación sistemática de sustitutivos sintéticos de fibras naturales como la seda y la celulosa, obtuvo varios poliésteres y poliéteres. En 1935 consiguió la primera fibra sintética que sería producida a escala industrial, la poliamida Nylon 66. Se suicidó a los 41 años tras sufrir una larga depresión.

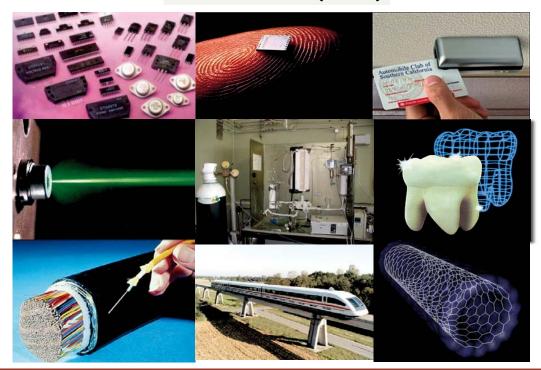








Nuevos Materiales (s. XXI)







http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/





Oportunidades de investigación en Química

- > Medio ambiente
- > Tratamiento de agua
- > Seguridad y salud en nuestra vida cotidiana
- > Salud: vivir más, vivir mejor.
- > Química física: Fundamentos teóricos de la Química
- > Química de productos Naturales
- > Síntesis más eficaces
- > Reconocimiento molecular, interacciones.
- > Electrónica molecular
- > Energía
- > Química analítica: miniturización.
- > Visualización de moléculas
- > Química inorgánica: materiales cerámicos.
- > Materiales biodegradables.
- Química nuclear: mejor conocimiento, elementos transuránidos (¿existe la isla de la estabilidad?)

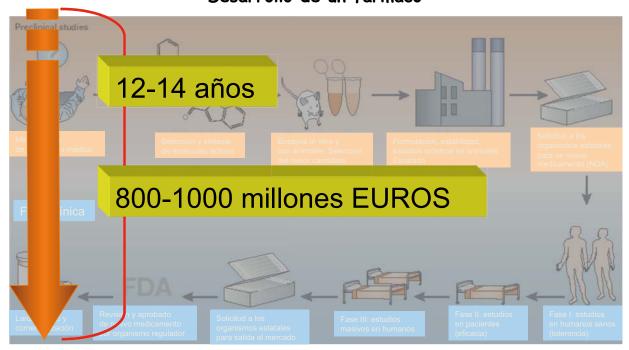








Desarrollo de un fármaco









http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



4 -

COMPUESTOS BIOLÓGICAMENTE ACTIVOS

Desarrollo de fármacos (Química Médica)

Pocas moléculas (New Chemical Entities, NCE) llegan al mercado

Disponibilidad de moléculas para ensayar biológicamente Síntesis individual Síntesis de colecciones (síntesis paralela, química combinatoria) Fuentes naturales

Coste de los ensayos biológicos Actividad biológica Toxicidad









COMPUESTOS BIOLÓGICAMENTE ACTIVOS

Toxicología

En seres humanos

En animales

En ecosistemas

Impacto medioambiental

Ensayos muy caros y laboriosos

Resultados difíciles de interpretar





http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



Fundación **BBVA**

El reglamento REACH



http://ec.europa.eu/environment/chemicals/reach/reach_intro.htm



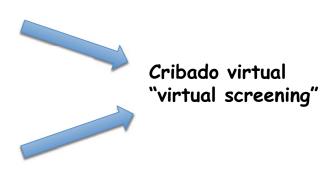






COMPUESTOS BIOLÓGICAMENTE ACTIVOS





Toxicología

Herramientas computacionales
Estructura
Propiedades moleculares
Semejanza molecular
Relaciones estructura-actividad



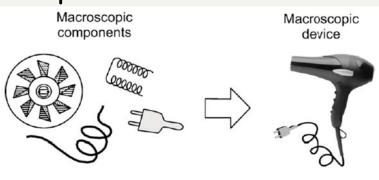


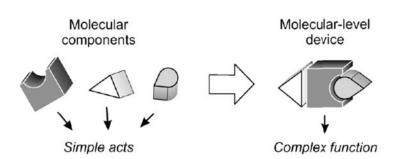
http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



Fundación **BBVA**

Química supramolecular/reconocimiento molecular





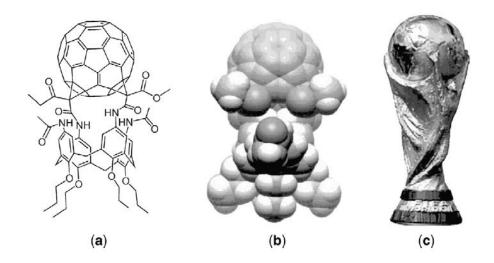








Química supramolecular Reconocimiento molecular Interacciones no-covalentes







http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/





Aportaciones de la Química a la alta tecnología. El futuro ya está aquí.

- > Máquinas moleculares
- > Nanociencia/nanotecnología
- > Cristales líquidos
- > Materiales con óptica no lineal
- > Electrónica molecular
- > Interruptores moleculares (en electrónica o en computación)
- > Ordenadores moleculares
- > Materiales quimioluminiscentes
- > Diodos emisores de luz
- > Antenas de luz (conversión de energía lumínica en química, centros fotosintéticos artificiales)













Fecha: 08/02/2010 Sección: COSAS DE LA VI Páginas: 19

Operación de descontaminación en el Ebro



Los lodos tóxicos de Flix serán depurados en hornos a 2.000°

• 7700.000 toneladas de residuos serán extraídas del embalse dentro de 18 meses

© El material será deshidratado y el 20% precisará de una segunda depuración





tion comparation a la mencia paria etabiliturales, deveribe un nicinio de Acasamal free questión, su ediocita fer y la mencia organia audituro a gotos pura el vertederes. Pare el contrator en el caso de que produmiam ino riementos negualcoglia. Este isolamo compiancoglia. Este isolamo esta para el coglia. Este isolamo esta para el porte de qua a alla temperatura, un consigue volutilizar fest estica. El vopor generale para esta su sua descriptiones de la comparativa que consigue volutilizar fest estica. El vopor generale para esta sua descriptiones de la comparativa que consigue volutilizar fest estica. El vopor generale para esta son a una descriptiones.

Ios efectos

UN PELIGROSO
CÓCTEL QUÍMICO

LOS INOSPENTES

28 Binforme del Consego
Company

Co

La solución en la Química

Oportunidad de desarrollo empresarial





http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



Fundación **BBVA**

Química y Medio Ambiente. El problema del CO2.

La Nueva España

Fecha: 29/12/2009 Sección: LAS CUENCAS

Páginas: 17

La planta industrial de CO2 se iniciará en 2012 si la experimental de Mieres tiene éxito

Hunosa y Endesa tendrán en 2 años los resultados de la central de La Pereda para abordar una segunda instalación de 50 MW



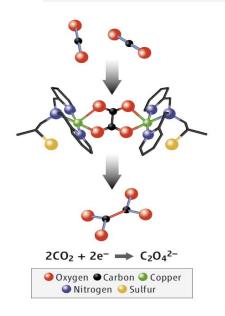








Química y Medio Ambiente. El problema del CO_2 . Investigaciones recientes. Aplicaciones futuras.

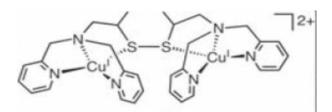


Electrocatalytic CO₂ Conversion to Oxalate by a Copper Complex

Raja Angamuthu, Philip Byers, Martin Lutz, Anthony L. Spek, Elisabeth Bouwman 1*

Global warming concern has dramatically increased interest in using CO₂ as a feedstock for preparation of value-added compounds, thereby helping to reduce its atmospheric concentration. Here, we describe a dinuclear copper(I) complex that is oxidized in air by CO₂ rather than O₂; the product is a tetranuclear copper(II) complex containing two bridging CO₂-derived oxalate groups. Treatment of the copper(II) oxalate complex in acetonitrile with a soluble lithium salt results in quantitative precipitation of lithium oxalate. The copper(II) complex can then be nearly quantitatively electrochemically reduced at a relatively accessible potential, regenerating the initial dinuclear copper(I) compound. Preliminary results demonstrate six turnovers (producing 12 equivalents of oxalate) during 7 hours of catalysis at an applied potential of -0.03 volts versus the normal hydrogen electrode.

Science 2010, 327, 313







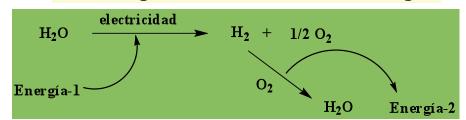


http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



__

El hidrógeno como fuente de energía













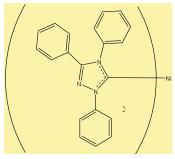






Economía basada en hidrógeno. Captura y transporte de H₂.

Keaton et al. J. Am. Chem. Soc. 2007, 129, 1844







http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



Fundación **BBVA**

Propiedades tecnológicas: Grafeno, Fullerenos y nanotubos de carbono

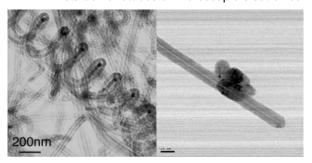
Propiedades

Eléctricas: Semiconductores o Superconductores

Mecánicas: Son muy resistentes a la tensión y presentan una elevadad elasticidad

Térmicas: Buenos conductores térmicos a lo largo del tubo y aislantes a través de la pared

Vista de nanotubos al microscopio electrónico



Aplicaciones

Supercondensadores
Células solares
Almacenamiento de hidrógeno
Electrónica
Biomedicina
Industria aerospacial
Agentes adsobentes,...





















http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



Fundación **BBVA**











2011: Año Internacional de la Químico







Marie Curie Premio Nobel (1903, 1911)





http://www.losavancesdelaquimica.com/ http://www.madrimasd.org/blogs/ quimicaysociedad/



Fundación **BBVA**