



MOLÉCULA

Publicación mensual de la Facultad de Químicas de la Universidad de Castilla la Mancha
Nº 28 Época II. Mayo de 2007. Editor: A. Mucientes. Coordina Decanato

CIENCIA JOVEN 2007

EL profesor **Ignacio Cirac**, Premio Príncipe de Asturias de Física en 2006 y actual director de la División Teórica del Instituto Max-Planck para la Óptica Cuántica, en Garching, Alemania, participó en el ciclo "Ciencia Joven 2007" que organiza la Facultad de Ciencias Químicas para la formación de jóvenes investigadores.

Cirac contestó a preguntas de más de cincuenta asistentes, sobre el estado actual de la investigación en España, los procesos de doctorado, becas, formación de equipos o las inevitables comparaciones entre la investigación en nuestro país y la que se realiza en los países más avanzados de la Unión Europea y Estados Unidos.

Finalizó aconsejando a los doctorandos sobre la necesidad de viajar al extranjero para conocer otros investigadores y establecer contactos que puedan dar lugar a futuras investigaciones.



MOLÉCULA DEL MES: $[\text{Cp}^*\text{RuH}(\text{PPh}_2\text{py-}\kappa\text{P})_2]$ ($\text{Cp}^* = \text{C}_5\text{Me}_5$, py = piridina)

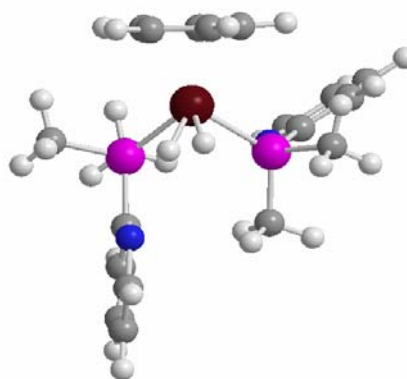
La teoría cuántica ha sido la teoría física más influyente en el siglo XX y es en los comienzos del siglo XXI una herramienta imprescindible en el desarrollo de la química computacional, entendida como la rama de la química en la que se utilizan los métodos de la Química Cuántica y Mecánica Estadística para el estudio de átomos, moléculas y agregados moleculares.

La Química Cuántica es capaz de proporcionar datos químicos tan o más precisos que los obtenidos por vía experimental, todo ello gracias al desarrollo de las nuevas metodologías, de nuevos algoritmos y de un increíble incremento en la capacidad de los ordenadores.

Uno de los principales objetivos en la investigación química es el análisis de las reacciones químicas, es decir, el conocimiento preciso de la topología de la correspondiente superficie de energía potencial. Esto lleva consigo una investigación conjunta de las diferentes áreas de la química unidas para el conocimiento y avance de la ciencia.

Como ejemplo, el trabajo realizado sobre la molécula $[\text{Cp}^*\text{RuH}(\text{PPh}_2\text{py-}\kappa\text{P})_2]$ ($\text{Cp}^* = \text{C}_5\text{Me}_5$, py = piridina) donde se ha realizado el estudio teórico (Departamento de Química Física) que completa el experimental (Grupo de Q. de la Coordinación Aplicada) de los procesos de transferencia protónica utilizando el formalismo DFT, más conocido como método B3LYP y el conjunto de bases 6-31G** excepto para los electrones del Rutenio que fueron descritos con el pseudopotencial standard doble- ξ LANL2DZ. Se han analizado las especies que se forman al añadir un protón al medio de reacción (HBF_4), más específicamente si este protón se une al rutenio, al hidruro ya existente para formar una molécula de hidrógeno coordinada al metal o bien al átomo de nitrógeno de la piridina.

J. Am. Chem. Soc. 127(44) 15364-15365, 2005



Lucía Santos, Félix Jalón y Blanca Manzano

El caucho natural

Orígenes Históricos I

Algunas de las propiedades y usos de caucho fueron descubiertas por los Indios tropicales de sudamérica mucho antes de las travesías de Colón. Durante muchos años, los españoles trataron de duplicar los productos resistentes al agua (calzado, revestimientos, y cabos) de los Indios, pero fracasaron. El caucho llegó a ser meramente una curiosidad de museo en Europa durante los siguientes dos siglos. En 1731 el gobierno Francés envió al geógrafo matemático **Charles Marie Condamine (1701-74)** a Sudamérica a una expedición geográfica. En 1736 él envió a Francia la varios rollos de caucho crudo, junto con una descripción de los productos fabricados por los Indios del Valle del Amazona. El interés científico general en la sustancia y sus propiedades se reavivó, y se buscaron las maneras para disolver el látex, el cual endurece rápidamente después de ser extraído, para poder trabajarse a distancia de su fuente natural. Muchos científicos trabajaron sobre el problema, y en 1770 el químico Británico **Joseph Priestley** descubrió que ese caucho puede usarse para borrar marcas de lápiz refregando, propiedad de la cual deriva el nombre de la sustancia.