

## NOTICIAS DEL DECANATO

ROSA MARÍA CLARAMUNT VALLESPI  
(CATEDRÁTICA DE QUÍMICA ORGÁNICA)  
PRONUNCIA LA LECCIÓN INAUGURAL  
¿QUÍMICA O QUÍMICAS?

En el Acto de Inauguración del Curso Académico 2017-2018, presidido por D. Alejandro Tiana Ferrer, Rector magnífico de la UNED y D. Marcial Marín Hellín, Secretario de Estado de Educación, Formación Profesional y Universidades, la Catedrática de Química Orgánica de la UNED, D.<sup>a</sup> Rosa María Claramunt Vallespi, ha sido la encargada en representación de la Facultad de Ciencias de pronunciar la lección inaugural titulada ¿Química o químicas?

Tradicionalmente, las lecciones de inauguración de los cursos académicos se van asignando a las facultades o escuelas de forma correlativa en ciclos sucesivos. Dentro de cada Facultad, suele ser el catedrático o la catedrática más antiguo el encargado de pronunciar la lección de inauguración del curso.

Habiéndose recibido en la Facultad de Ciencias la llamada del Rector para comunicar que le correspondía a la misma responsabilizarse de la lección de inauguración del curso 2017-2018 y de buscar la persona encargada de ello, desde el Decanato procedimos según establecía la tradición. En primer lugar, mediante la consulta oportuna a protocolo, se comprobó que la lección impartida en 2011 “*Las moléculas gigantes*” por D. Arturo Horta Zubiaga, con motivo del Año Internacional de la Química, no contaba en el ciclo de asignación a los centros, y posteriormente se consultó la antigüedad de los catedráticos en activo de la Facultad Ciencias. De los tres catedráticos más antiguos, fue fácil encomendar la tarea a la profesora Claramunt. En ella concurrían diversos aspectos que la hacían una candidata ideal, a saber: su antigüedad, su constante disposición, su permanente participación en actividades de género y su dedicación a actividades docentes y de investigación atractivas para un público dedicado a materias diversas.

También es tradicional que la lección inaugural sea la lección de introducción a una disciplina concreta. En

esta ocasión la Profesora Claramunt eligió la química, en particular la química orgánica en la UNED y el papel de algunas mujeres en el desarrollo de esta ciencia. Empezó con la frase de Marie Skłodowska-Curie “*En la vida, no hay nada que temer, solo hay que comprender*”, y estructuró la lección en cinco apartados: introducción, química, áreas de la química: químicas, 40 años de la química orgánica y heterociclos en la UNED y mujeres en química.

Se puede acceder a más información del Acto de Inauguración del Curso Académico 2017-2018 a través del siguiente enlace: [http://portal.uned.es/portal/page?\\_pageid=93,57291243&t\\_dad=portal&t\\_schema=PORTAL](http://portal.uned.es/portal/page?_pageid=93,57291243&t_dad=portal&t_schema=PORTAL).

Seguidamente se transcribe un amplio y textual resumen de la lección inaugural dada por la Profesora D.<sup>a</sup> Rosa María Claramunt Vallespi.



## Química

La química la hacen químicas y químicos, los profesionales de la química ¿Cuántos son? En España unos 60.000, en el mundo, entre un millón y medio y dos millones. El país donde más hay es la India, unos 700.000. Por un fenómeno muy habitual se transmite a la sociedad que la química la hacen unos pocos seres excepcionales. A ello contribuye enormemente la concesión de los Premios Nobel. Cada año, hacia el mes de octubre, se conocen los nombres de las personas galardonadas, que aparecen en prensa y otros medios y se genera la idea de que la química es una actividad individual y solitaria, aunque en sus discursos insistan en que eso no es así.

Es verdad que ciertas personas, hayan obtenido el Premio Nobel o no, han contribuido de manera espectacular al desarrollo de la química. Citar a Linus Pauling o George Whitesides, y, como no, a Marie Skłodowska-Curie, la primera mujer y una de las pocas personas que han conseguido dos Premios Nobel.

Eso se debe a que la química difiere de otras disciplinas en que “crea su objeto”, célebre frase del gran Marcellin Berthelot, es decir, no se contenta con descubrir los secretos de la naturaleza sino que crea moléculas que no existían previamente en el Universo. Eso nos acerca a otros creadores.

Cada rama de la Ciencia tiene sus iconos. En física las ecuaciones de Newton, de Maxwell, de Schrödinger o de Einstein ( $E = mc^2$ ); en matemáticas las de Pitágoras ( $a^2 + b^2 = c^2$ ), Napier o Euler ( $e^i\pi + 1 = 0$ ); en ecología las ecuaciones de Lotka-Volterra (o Volterra-Lotka como prefería el ecólogo español Ramón Margalef) y muchas más. En química tenemos no una ecuación sino una tabla con propiedades matriciales, la Tabla Periódica de los Elementos, asociada para siempre, aunque muchos otros contribuyeron a ella, a Dmitri Ivanovich Mendeleev, el cual, por cierto, nunca alcanzó el Premio Nobel. En eso se parece a la biología cuyo icono no es una ecuación sino el libro “El Origen de las Especies” de Charles Darwin.

La Tabla Periódica de los Elementos es algo que todo el mundo reconoce. Como dice José Antonio Marina defendiendo el uso de la memoria en la docencia: “La lista de los Reyes Godos, no, pero la tabla periódica de los elementos, sí”. Está en un número inimaginable de aulas de colegios, institutos y universidades, tiene diversas formas, colores y datos, pero nadie puede pasar delante de una de ellas y no reconocerla.

Los elementos se nombran con un concepto mitológico, un mineral, un lugar en un país, una propiedad o en honor a una personalidad científica. Tres fueron descubiertos por españoles, el platino (Antonio de Ulloa, 1735/1748), el wolframio o tungsteno (Juan José y Fausto ElHuyar en el Seminario Patriótico de Bergara, 1783) y el vanadio (Andrés Manuel del Río, 1801). Al menos seis, se deben a investigaciones realizadas por mujeres, radio y polonio (Marie Curie, 1898), francio (Marguerite Perey, 1939), renio (Ida Tacke Noddack, 1925), y torio y protactinio (Lise Meitner, 1918).

Hay muchos libros sobre la tabla periódica, Mendeleev o los elementos químicos. Sobre ella han escrito, por ejemplo, los químicos Primo Levi o Eric Scerri desde dos perspectivas muy diferentes. El primero testigo y protagonista

de algunos de los episodios más duros de nuestra historia contemporánea, fue deportado a Auschwitz en 1943, vertió sus vivencias dedicando cada uno de los capítulos en que estructura su obra a un elemento químico, convirtiéndolo en metáfora del hombre o de las relaciones humanas. El segundo, experto en historia y filosofía de la ciencia combina la historia de la clasificación periódica de los elementos con la comprensión de la química, destacando que permite relacionarlos en términos de sus propiedades físico-químicas.

Un aspecto que a veces se olvida es la existencia de isótopos en la mayoría de los elementos, solo 21 tienen un único isótopo, entre ellos sodio, cesio, berilio, aluminio, fósforo, arsénico, bismuto, flúor, yodo, manganeso, cobalto y oro. La Tabla tiene pues una tercera dimensión, por ejemplo, sobre el hidrógeno estarían el deuterio y el tritio formando una columna. Algunos elementos tienen muchos isótopos; en abundancia natural los que más son el cadmio y el estaño, con 8 isótopos cada uno.

Quienes nos dedicamos a la química sabemos que la Tabla usa el número de protones que tiene un elemento, el número atómico, y no la suma de protones y neutrones, la masa atómica, que es lo que determina de qué isótopo se trata. Los isótopos tienen el mismo número de protones pero diferente número de neutrones, por ejemplo hidrógeno (1 protón, 0 neutrones), deuterio (1 protón, 1 neutrón) y tritio (1 protón, 2 neutrones).

El tema de los isótopos está íntimamente ligado a la Resonancia Magnética Nuclear, tanto a la que se usa en química (RMN o, en inglés, NMR) como a la empleada en medicina (RMI o, en inglés, MRI). Así, todos los isótopos del hidrógeno son visibles por RMN pero el isótopo más abundante del carbono, el carbono 12 (6 protones, 6 neutrones) es transparente, y hay que usar el mucho menos abundante carbono 13 (6 protones, 7 neutrones). También es muy importante en medicina el hecho de que ciertos isótopos sean radiactivos, como el tritio, el flúor 18, el yodo 125,... el gadolinio 153.

Y, ¿cuántas moléculas se pueden construir con los 118 elementos de la Tabla Periódica? Hasta ahora hemos preparado cien millones de compuestos o sea  $10^8$ . Hasta el fin de los tiempos ¿cuántos habremos obtenido? ¿ $10^{18}$ ? Es decir, ¿10.000 millones de veces más? Eso es mucho suponer, y además no nos queda tanto tiempo, se estima que la humanidad desaparecerá en 1.750 millones de años.

Frente a esa explosión combinatoria nos quedan dos soluciones.

La primera consiste en definir el espacio multidimensional de todas las moléculas posibles de un tamaño máximo limitado y examinarlo con métodos de análisis de datos. Resultados preliminares muestran que las zonas conocidas son muy pequeñas y cercanas a los productos naturales. Hay enormes zonas vacías, se trataría de explorarlas usando, por ejemplo, algo relacionado con *Machine Learning*. Pero es probable que las moléculas situadas en esas zonas “inhóspitas” sean difíciles de preparar.

La segunda consiste en mejorar nuestra capacidad de predicción de todo tipo de propiedades desarrollando métodos computacionales derivados de la mecánica cuántica. Estamos muy lejos de ese objetivo, baste recordar la casi imposibilidad de predecir los puntos de fusión de las sustancias.

El segundo método se podría usar para estudiar las propiedades de las moléculas “huérfanas” encontradas por el primero. Solo así podríamos obtener una imagen aproximada pero consistente del universo de la química.

### Áreas de la Química: químicas

Al ser la química la ciencia que estudia las sustancias, su estructura, sus propiedades y las reacciones que las transforman en otras, en sus inicios se diversificó en función de la naturaleza de estas en dos grandes especialidades: la química inorgánica que trata de las moléculas inorgánicas, relacionadas originalmente con los minerales, y el enlace iónico, y la química orgánica que se dedica a las moléculas que contienen carbono, estén o no presentes en los seres vivos, y al enlace covalente.

Es a finales del siglo XIX cuando se inicia una mayor especialización, con la química analítica, que determina la composición y estructura de las moléculas, la química física, que se ocupa principalmente de las leyes y teorías que explican los cambios energéticos involucrados en las reacciones químicas, la bioquímica que dirige su objetivo a la explicación de los procesos que tienen lugar en los seres vivos a nivel molecular, la química médica que intenta comprender cómo actúan los fármacos o medicamentos en los organismos vivos, la química ambiental, que estudia la influencia de los agentes químicos naturales y artificiales en la biosfera.

O, más recientemente, la neuroquímica sobre los aspectos químicos del cerebro (sales de litio, clorpromazina, Valium, Prozac), la síntesis química para establecer las rutas que conducen a la producción de moléculas (Aspirina o ácido acetilsalicílico, paracetamol, penicilinas, Taxol), la química de materiales que investiga la relación entre sus

propiedades y la estructura (polímeros, cristales líquidos, fullerenos, grafeno, nanotubos, materiales biocerámicos), o la química supramolecular con los catenanos, rotaxanos y las máquinas moleculares y la química forense que analiza las interacciones entre compuestos de naturaleza orgánica e inorgánica existentes en la escena de un crimen, con el propósito de contribuir desde el punto de vista científico al esclarecimiento o resolución de los hechos.

Como en otras disciplinas y en general en toda la ciencia, la química vive en una permanente contradicción. El enorme y continuo desarrollo de la disciplina exige especializarse cada vez más para poder tener conocimientos actualizados de los nuevos resultados. Pero simultáneamente, hay que ser cada vez más interdisciplinar pues es en las zonas frontera donde se producen los descubrimientos más importantes. Esa imposibilidad produce gran tensión y la única salida es colaborar.

### 40 Años de química orgánica y heterociclos en la UNED

Estoy convencida de que para enseñar química hay que hacerla. El debate sobre si en la actividad académica debe primar la investigación o la docencia carece hoy de sentido. Las buenas universidades, las que aspiren a tener una posición relevante, no pueden optar entre docencia e investigación, el éxito académico dependerá del equilibrio entre las actividades formativas y la creación de conocimientos.

Las instituciones universitarias cuyas estrategias vengán marcadas por el predominio de la docencia ocuparán siempre posiciones secundarias. Y tampoco es buena receta que prime una investigación que considere las actividades educativas de segunda categoría.

Así, paralelamente a nuestra labor docente, iniciamos la investigación en los años 80 en el denominado por aquel entonces Departamento de Química General y Macromoléculas, desde donde se impartía la docencia de las asignaturas de química orgánica.

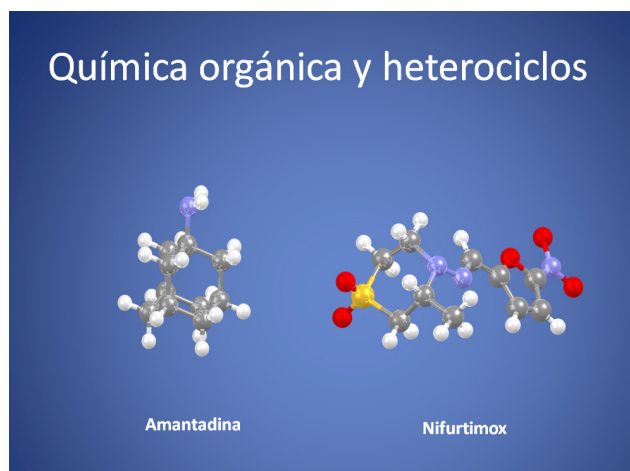
Si bien es cierto que la química orgánica se define como la química de los compuestos del carbono, el 80% de los compuestos orgánicos contienen además heteroátomos, esencialmente nitrógeno, oxígeno y azufre. Se habla pues de compuestos heterocíclicos y química heterocíclica y es ahí donde se enmarca la contribución de nuestro grupo en la UNED durante los últimos 40 años.

Creemos que la química debe ser utilizada para conseguir un futuro mejor, tiene un compromiso con la vida, y teniendo en cuenta este propósito hemos orientado nuestra investigación a la generación de conocimientos básicos

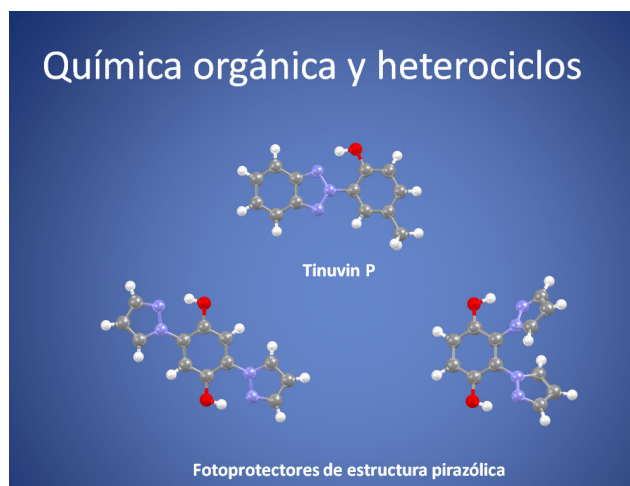


para su aplicación en diferentes ámbitos y mejora de nuestro entorno.

De este modo se han diseñado y preparado nuevos agentes antivirales y antiparkinsonianos relacionados con la Amantadina o agentes activos frente al parásito *Trypanosoma cruzi*, de estructura próxima al Nifurtimox, estudiando su actividad in vitro e in vivo en colaboración con países de Sudamérica donde la incidencia de la enfermedad de Chagas sigue planteando graves problemas en el ámbito de la salud. Recordemos que esta enfermedad fue la causa del fallecimiento de Darwin.



Durante varios años (1987-1994) nos hemos dedicado a investigar la estructura, fotofísica y fotoestabilidad de nuevos compuestos análogos al Tinuvin P, un benzotriazol, en proyectos coordinados con el profesor Javier Catalán de la Universidad Autónoma de Madrid. Nuestras aportaciones han permitido el esclarecimiento del mecanismo de fotoprotección y la obtención de moléculas de estructura pirazólica con propiedades similares al propio Tinuvin P y en algunos casos de mayor eficacia fotoprotectora frente a la radiación ultravioleta.



A partir de 1993 nos adentramos en la química heterocíclica supramolecular, la formación de nuevas entidades químicas con propiedades derivadas del efecto cooperativo de las interacciones intermoleculares no covalentes (en particular el enlace de hidrógeno) y su posible aplicación a dispositivos inteligentes, gracias a la relación iniciada con los profesores André Collet, Jean Marie Lehn y Hans-Heinrich Limbach.

La adquisición de un espectrómetro RMN *wide-bore* con financiación Feder en 2007 hizo posible que utilizáramos esta técnica en la Facultad de Ciencias de la UNED para estudios de ingeniería de cristales, diseño de sólidos orgánicos y biomoléculas en estado sólido. Manifiestar nuestro agradecimiento a la empresa Bruker Española y muy particularmente a su director Víctor G. Pidal, por confiar y creer que lo conseguiríamos, en realidad nos habían instalado el equipo mucho antes, en 2002, a título de préstamo en base a un convenio de colaboración científico-tecnológica.

Y de nuevo gracias a colaboraciones con los profesores Swiatoslaw (Jerry) Trofimenko de la Universidad de Delaware, Luis Oro de la Universidad de Zaragoza y Mercedes Cano de la Universidad Complutense de Madrid ha sido posible estudiar los poliazolilboratos, conocidos como escorpionatos, los poliazolilmetanos, y sus complejos de coordinación con metales. Algunos han tenido aplicación como agentes de descontaminación.



En la actualidad estamos trabajando en la identificación y desarrollo de nuevos quimiotipos con propiedades antioxidantes, relacionados con la curcumina y otros derivados polifenólicos, estudiando a la vez el efecto que la introducción de átomos de flúor en las estructuras produce en su actividad y propiedades farmacológicas. El estrés oxidativo ha sido reconocido desde hace mucho tiempo, entre otros mecanismos, como un factor clave en la patogénesis de las enfermedades neurodegenerativas que incluyen Alzheimer, Parkinson, la esclerosis lateral amiotrófica, la enfermedad de Huntington o la ataxia de Friedreich, por lo

que es razonable proponer el uso de antioxidantes como terapia.

He querido dejar para el final de esta sección a tres eminentes figuras en química con quienes hemos mantenido estrecha colaboración a lo largo de todo estos años, el profesor Alan Roy Katritzky de la Universidad de Florida considerado el padre de la química heterocíclica, el profesor Manuel Lora-Tamayo un gran docente e investigador en química orgánica y la profesora Marye Anne Fox, Medalla Nacional de Ciencia de Estados Unidos 2009 y dos veces rectora de universidad, Carolina del Norte y California San Diego, que tuvimos el honor de incorporar como Doctores Honoris Causa a nuestro claustro universitario, a propuesta del Departamento de Química Orgánica y Biología, en 1986, 1998 y 2003. Sin ellos no habríamos conseguido llegar hasta aquí.

Tampoco lo habríamos logrado sin el apoyo constante de dos excelentes científicos muy cercanos, los profesores Ibon Alkorta y José Elguero del Instituto de Química Médica del CSIC.

## Mujeres en química

Consciente de la invisibilidad del papel de las mujeres en el ámbito científico, concluiré esta lección hablando de sus contribuciones a la química.

En la presentación del "Informe Científicas en Cifras 2015" del Ministerio de Economía, Industria y Competitividad (UMyC y FECYT) se indica que existe un avance en la igualdad de género en base a que el número de mujeres que obtienen el doctorado en España se iguala al número de hombres, situación que no ocurre en el resto de Europa. Pero dicho avance es sólo aparente, a pesar de que el 57 % de personas tituladas en ciencias en la universidad española son mujeres y se gradúan con mejores expedientes que los varones, sólo un 49% son profesoras ayudantes y un mismo porcentaje ayudantes doctor, un 42% titulares y un 21% catedráticas. El efecto tejera y el techo de cristal siguen ahí para ellas.

Una pregunta interesante, pero difícil de contestar, es ¿se nota el género del autor o autora principal en los trabajos de química? Por ejemplo, ¿en la elección del tema? Si nos fijamos en las cuatro mujeres que han obtenido el Premio Nobel de Química, se trata de personalidades muy diferentes y con trayectorias muy variadas, que cubren desde las posiciones muy progresistas de Irene Joliot y de Dorothy Crowfoot, hasta las ligeramente más moderadas de Marie Curie y Ada Yonath. Sus temas de investigación también

difieren, acercándose las Curie, madre e hija, a la física y las dos más recientes a la biología.

Marie Skłodowska-Curie (Varsovia, Polonia 1867 – París, Francia 1934), ya se ha mencionado consiguió el Premio Nobel dos veces, en física en 1903 con Pierre Curie y Henri Becquerel por el fenómeno de la radiactividad y en química en 1911 por el descubrimiento del radio y el polonio. Este 2017 en que se conmemoran los 150 años de su nacimiento es obligado el reconocimiento a su figura por la extraordinaria tarea científica y humanitaria que desarrolló, baste recordar que durante la primera guerra mundial trabajó con su hija Irène en las aplicaciones de la radiactividad, salvando gracias a la rápida detección mediante examen radiológico de los soldados en el frente las vidas de muchos de ellos.

Irène Joliot-Curie (París, Francia 1897-1956), una vez finalizada la guerra se gradúa en física y matemáticas, empezando a trabajar en 1920 en el laboratorio Curie del Instituto del Radio en la Universidad de París. Defendió su tesis sobre los rayos alfa del polonio en 1925, casándose un año después con Frédéric Joliot. Juntos lograron el reconocimiento científico por la radiactividad artificial y caracterizaron tres isótopos radiactivos de nitrógeno, silicio y fósforo, siendo galardonados con el Premio Nobel de Química en 1935.

Dorothy Crowfoot Hodgkin (El Cairo, Egipto 1910 – Crab Mill, Reino Unido 1994) es la única mujer inglesa que ha logrado un Nobel en ciencias, el de Química en 1964. Las estructuras en las que trabajó, yoduro de colesteroil, penicilina, vitamina B12, pepsina, insulina y lisozima, eran todas médicamente importantes, pero las eligió por ser además científicamente interesantes y a priori resolubles con los métodos de que disponía. Fue su búsqueda de soluciones bellas y exactas a problemas difíciles, tardó 35 años en resolver la estructura de la insulina, lo que la impulsó a superar las dificultades del trabajo experimental, vida familiar e incluso dolor físico (le diagnosticaron artritis reumatoide a los 28 años) para convertirse en una de las mayores científicas del siglo XX.

Ada E. Yonath (1939 Geula, Jerusalén) recibió en 2009 el Premio Nobel compartido con Thomas Steitz y Venktraman Ramakrishnan por sus estudios sobre la estructura y función de los ribosomas. Considera que en sus investigaciones, la pregunta está en la biología, el método en la física (utiliza la difracción de rayos-X) y la interpretación es matemática (los modelos permiten generar imágenes en 3D y alta resolución), pero la respuesta está en la química. Sus estudios sobre la estructura de los ribosomas han ayu-

dado a conocer las diferencias entre los de las células humanas y los de las bacterias, permitiendo diseñar nuevos antibióticos que atacan a los organismos patógenos y producen menos resistencias. En un futuro se podría tratar de bloquear el ribosoma de las células tumorales, pero no así el de las sanas.

Estas cuatro personalidades, que únicamente representan el 0,44 % de todos los Premios Nobel concedidos desde 1901 hasta 2016 (907) y el 2,29 % de los 175 de Química, son la punta del iceberg de un colectivo de mujeres que ha desarrollado su actividad científica de forma anónima en el mundo de la química a lo largo de la historia sin lograr un justo y merecido reconocimiento.

Espero y deseo que de mis palabras hayan aprendido algo más sobre la química y las químicas. Pero, sólo si he conseguido despertar la curiosidad por profundizar en su conocimiento habré logrado mi objetivo.

Muchas gracias.

Se puede acceder al texto completo a través del siguiente enlace: [http://portal.uned.es/pls/portal/docs/page/uned\\_main/serviciosgenerales/gabinete/noticias%20web/noticias%20gabinete%20octubre%202017/leccioninaugural2017.pdf](http://portal.uned.es/pls/portal/docs/page/uned_main/serviciosgenerales/gabinete/noticias%20web/noticias%20gabinete%20octubre%202017/leccioninaugural2017.pdf).

Antonio Zapardiel Palenzuela  
*Decano de la Facultad de Ciencias*