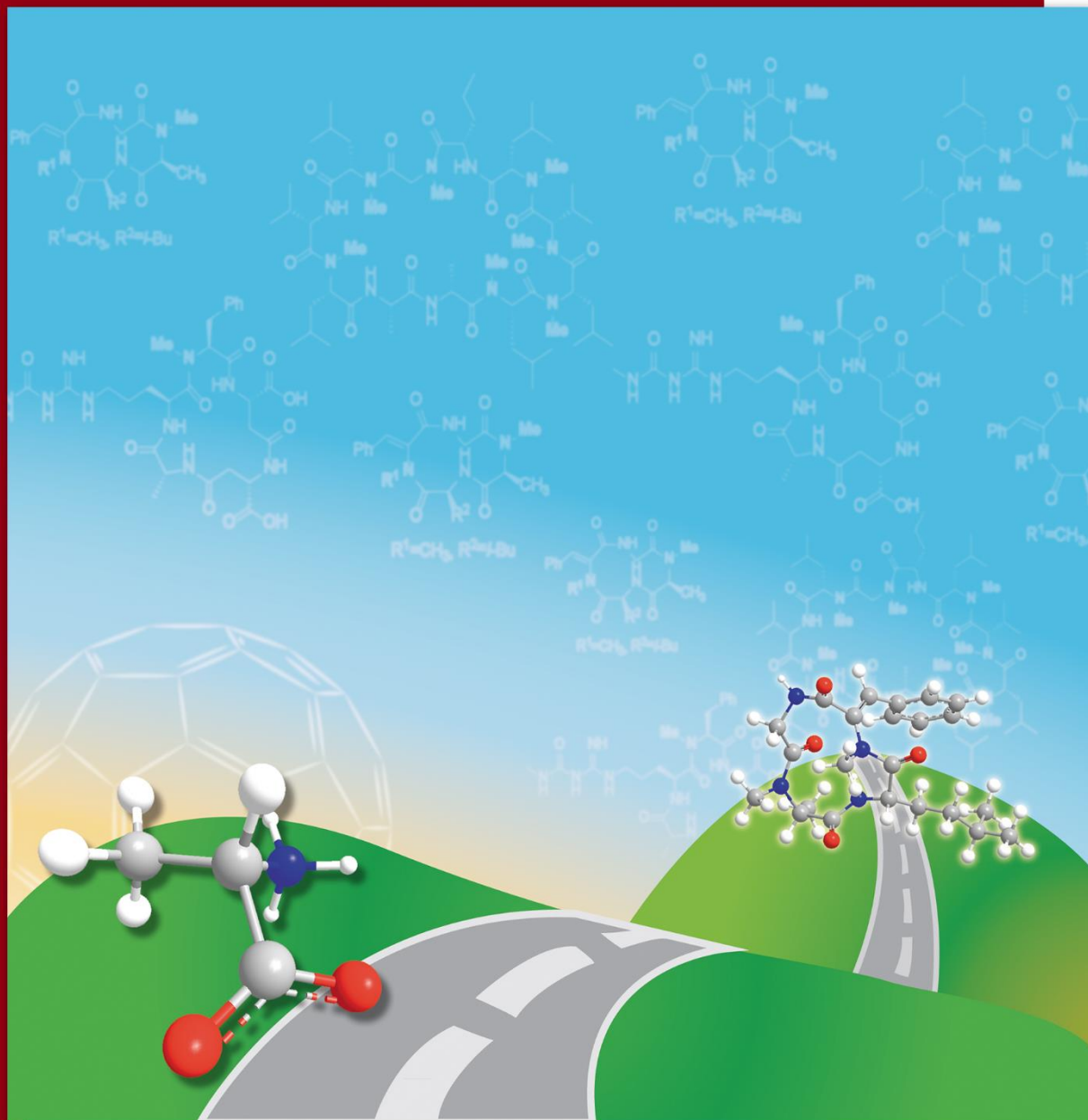


ENCUENTRO CON LA QUÍMICA



UNA REVISTA DE LA SOCIEDAD CUBANA DE QUÍMICA

VOLUMEN 1. NÚMERO 1

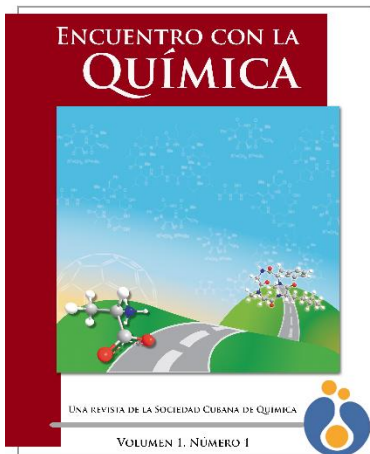


Encuentro con la Química

Volumen 1- Número 1

Enero-Abril 2015

Índice



Diseño de Portada:



Aldrin Vasco Vidal

Editora:
Prof. Dr. Margarita Suárez Navarro

Composición y producción:
Lic. Aldrin Vasco Vidal

Editorial	1
Carta del Rector de la Universidad de La Habana	3
Reconocimiento al Dr. José L. Mola Garate	4
Carta del Presidente de la Sociedad Cubana de Química	6
Premios de la Sociedad Cubana de Química	8

Logros de la Química Cubana

A 10 años de la introducción de la vacuna conjugada contra el <i>Haemophilus influenzae</i> tipo b a partir de un antígeno sintético	10
Biobras-16, un ejemplo de los resultados alcanzados con la aplicación adecuada del concepto Universidad–Empresa	13
Avances en la investigación a ciclo cerrado en BIOMAT	15

Investigación en Química

La revolución de las nanoformas de carbono	18
La Química Supramolecular en las Nanociencias	22
Quiralidad en Fullerenos	25
Los Polímeros en la Ciencia de los Biomateriales	28

Industria Química

El desarrollo de la Química y la Tecnología Química en la Industria Azucarera Cubana	32
--	----

Química y Sociedad

Una mirada a la sociedad desde la termodinámica	37
Papel de la Universidad en la creación de una cultura ambiental para el desarrollo sostenible	39

Enseñanza de la Química

La Química Computacional como herramienta de la Química Experimental	44
El papel de la Química Cuántica en la Química	51
La Metrología Química y su Importancia	53
La formación de doctores: el doctorado en Química	55

<i>Perfiles</i>	63
-----------------------	----

<i>Tributo</i>	65
----------------------	----

EDITORIAL



Con este primer número de la Revista *Encuentro con la Química*, de la Sociedad Cubana de Química, comenzamos a materializar un sueño que tengo desde hace varios años y es de que exista un material que divulgue la química que desarrollamos en Cuba.

El objetivo fundamental de esta publicación electrónica es que los químicos cubanos estemos más relacionados y conozcamos que hacemos en todas las esferas de nuestra ciencia.

Encuentro con la Química es una revista electrónica, cuatrimestral con difusión gratuita que podrán acceder a ella a través de la página web de la Sociedad Cubana de Química (www.scq.uh.cu) y en la que publicaremos artículos que sean de calidad y de interés para los profesionales de la docencia, la investigación y la industria química de nuestro país.

Queremos aclarar que esta revista no sustituye a la Revista Cubana de Química, fundada en 1985 y certificada por el CITMA, cuya misión es la *difusión de las experiencias y resultados de investigación en la esfera de la química y ramas afines en forma de revisiones, artículos originales y notas técnicas o comunicaciones.*

En *Encuentro con la Química* pretendemos divulgar de forma asequible, trabajos interesantes para todos, independientes del campo de acción de cada uno. Por ejemplo, en

este número, podrán leer varios artículos referidos a las investigaciones actuales en química, así uno nos refiere la importancia de la química supramolecular en las nanociencias, otro destaca la influencia de los polímeros en la ciencia de los biomateriales, y un tercero que describe la importancia de la quiralidad en la química, en particular en la de los fullerenos. También se presentan trabajos relacionados con la enseñanza de la química, como el que trata del papel de la química cuántica en la química, otro que refleja la necesidad de la formación de doctores en química y el que nos detalla la importancia de la metrología química.

Un artículo que nos relata el desarrollo de la química y la tecnología química en la industria azucarera también está presente en este número. En la sesión Química y Sociedad podrás leer el que nos informa de cómo podemos analizar nuestra sociedad desde el punto de vista de la termodinámica y otro que nos reseña la importancia de la Universidad en la creación de una cultura ambiental.

En esta ocasión, tres artículos nos muestran algunos logros de la química cubana como lo son la vacuna conjugada contra el *Haemophilus influenzae* tipo b, el desarrollo del promotor de desarrollo vegetal BIOBRAS-16 y la obtención de biomateriales para su uso en la medicina como por ejemplo el TISUACRYL.

Dos prestigiosos profesores de universidades españolas que colaboran con grupos de investigación cubanos desde hace varios años, nos han enviado sus contribuciones, la del Dr. Nazario Martín León que nos informa de la Revolución de las Nanoformas del Carbono y la del Dr. José M. García de la Vega donde destaca a la Química Computacional como herramienta de la Química Experimental.

Existen otras sesiones en las cuales recordaremos a nuestros químicos con la sesión Tributo, veremos algo de historia, divulgaremos noticias actuales del desarrollo de la química en nuestro país y en el extranjero. Otra sesión que creo será de interés, es aquella que hemos llamado Perfiles, donde en cada número conoceremos más de cerca a uno de nuestros químicos.

Esta revista también tendrá como objetivo divulgar nuestra ciencia entre los no especialistas. La química es una ciencia extraordinaria, capaz de preparar numerosas sustancias que contribuyen al progreso de otras ciencias y facilitarnos materiales valiosos para nuestra vida. Debemos trabajar para hacer desaparecer la quimiofobia. Me imagino que al igual que yo, ustedes se molestan cuando leen o escuchan decir "este producto es bueno porque no tiene química", es decir que "química" es sinónimo de perjudicial y "lo natural" es presentado como inofensivo. Sabemos que hay productos naturales que son venenos y sustancias sintéticas como algunos medicamentos que curan enfermedades. La química no es buena ni mala, lo que hay son usos buenos y malos de la química. El cuerpo humano está compuesto por sustancias químicas, somos un reactor donde se producen variadas reacciones, por lo que somos química.

Todos los químicos cubanos y extranjeros están invitados a enviar sus contribuciones que pueden estar relacionadas con cualquiera de

los campos de la investigación química, así como con la historia y la enseñanza de nuestra disciplina tanto teórica como práctica, en todos sus niveles educativos. También se publicaran artículos sobre la relación entre la Ciencia y la Sociedad. Los colegas que quieran sumarse en esta tarea, serán bienvenidos, ya que esta revista la hacemos todos.

Finalmente no quisiera terminar este editorial sin destacar la pronta respuesta de todos los colegas que han contribuido en este primer número de nuestra revista y posibilitar que el sueño se haga realidad. Tengan presente que para mantener vivo y con éxito este proyecto es necesario la participación de todos y que es importante que nos envíen sus colaboraciones, sugerencias y críticas. Por lo tanto, no importa dónde te encuentres, ni en que esfera de la química te desarrollas, contamos contigo.

Desde aquí, agradezco en mi nombre y en el de la Sociedad Cubana de Química el esfuerzo de los que participan y participaran con entusiasmo en esta tarea. Avizoro el éxito de este proyecto con la ayuda de todos.

Confío que disfrutes de la lectura de este número de *Encuentro con la Química*.

Margarita Suárez Navarro
Editora

Carta del Rector de la Universidad de La Habana

Dr. Gustavo J. Cobreiro Suárez



La Sociedad Cubana de Química me ha hecho el honor de escribir unas líneas para celebrar el inicio de un nuevo proyecto de la Sociedad: la creación de su Revista con un formato digital, la que pretende divulgar los logros de esta ciencia en Cuba, tanto en su aspecto de ciencia pura como en el de sus aplicaciones.

Muchos han sido los logros de esta disciplina en nuestro país después del triunfo de la Revolución, con la creación de una política científica dirigida a lograr el desarrollo económico y social del país, y el avance de la ciencia en general y de la Química en particular.

Con la reforma universitaria se crea la carrera de Química en las tres universidades del país y también centros de investigación dedicados a las investigaciones en este campo

como lo fueron, por ejemplo: el Instituto de Investigación de la Caña de Azúcar y el Centro Nacional de Investigaciones Científicas, entre otros, los que posteriormente se han multiplicado a lo largo y ancho del país.

Sería imposible hablar en Cuba del desarrollo de sectores estratégicos como son la agricultura, la biotecnología y la producción de medicamentos y vacunas sin el desarrollo de esta ciencia.

Saludo el proyecto, a sus gestores, y a los que trabajaran para que la Revista “Encuentro con la Química” sea desde su nacimiento un rotundo éxito.

Gustavo Cobreiro Suárez
Rector

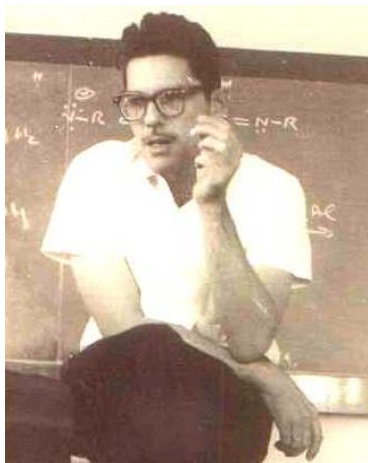
Reconocimiento al Prof. Dr. José L. Mola Garate

El profesor José Luis Mola Garate trabajó ininterrumpidamente durante más de 50 años en el Departamento de Química Orgánica de la Facultad de Química de la Universidad de La Habana, realizando una extensa vida laboral como docente de excelencia y reconocido investigador.

Mola nació en Guantánamo en 1933, y siendo muy joven se traslada a La Habana, comenzando a trabajar en el Instituto Cubano de Investigaciones Tecnológicas y posteriormente en 1960 pasa a desempeñarse como profesor de la Escuela de Química de la Universidad de La Habana.

Como Profesor Titular del Departamento de Química Orgánica ha impartido diferentes asignaturas de la disciplina Química Orgánica en cursos de pre y post-grado. Ha sido profesor de múltiples generaciones de químicos y como jefe de Departamento de Química Orgánica y profesor de más experiencia, formó, en su momento, a jóvenes profesores algunos de los cuales aún forman parte del colectivo de docentes de dicho departamento.

Su carácter afable y su buen hacer como profesor hizo que fuera altamente valorado en el ámbito universitario.



El Prof. Mola impartiendo clases en la Facultad de Química en 1966.

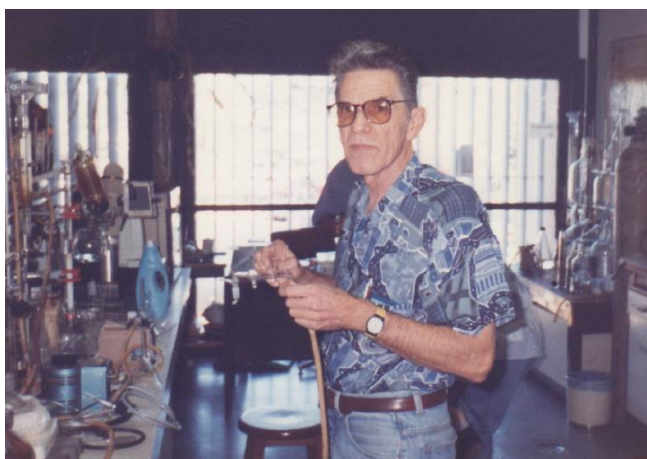
En 1975 obtuvo el grado de Doctor en Ciencias Químicas en la Universidad de Humboldt en Berlín. Realizó variadas investigaciones en el campo de los productos naturales, la síntesis orgánica, así como orientó trabajos en la industria química de nuestro país asesorando a diferentes instituciones como la Industria Básica, la Industria Poligráfica, el Ministerio de Salud Pública, entre otros.

Como formador de nuevas generaciones dirigió múltiples trabajos de diploma, maestría y doctorado. Además ha escrito libros de texto de reconocido nivel y publicado artículos en revistas científicas, participando además en congresos en Cuba y en el extranjero.



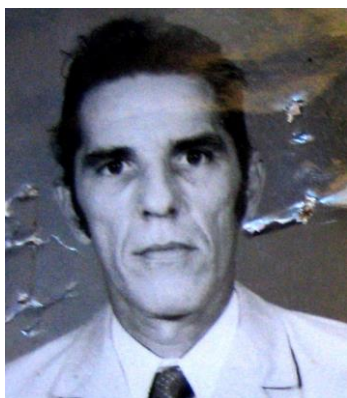
El Prof. Mola participando como presidente en una tesis doctoral en 1978.

Durante su vida laboral recibió múltiples reconocimientos entre ellos la Medalla de la Academia de Ciencias de Cuba, la Distinción por el Conjunto de la Obra Científica, otorgado por la Universidad de La Habana, la Medalla por el 280 Aniversario de la Universidad de La Habana.



El Dr. Mola desarrollando investigaciones en la Universidad Nacional de Brasilia en 1996.

En 1999 le fue otorgada la categoría de Profesor Consultante y la categoría especial de Profesor de Mérito de la Universidad de La Habana en 1997.



Acto de entrega de Profesor de Mérito, 1997

En el 2010 le fue reconocido como Miembro de Honor de la Sociedad Cubana de Química.



El Prof. Mola en una foto reciente

Al jubilarse en el año 2012 dejó una huella imborrable como Maestro de Maestros y todos los que tuvimos el honor de ser sus alumnos le agradeceremos permanentemente sus enseñanzas.

Es por eso que le dedicamos a nuestro Profesor Mola, el primer número de *Encuentro con la Química*.

Margarita Suárez Navarro
Editora

La Sociedad Cubana de Química y su espacio en la Cuba del Siglo XXI: Los “Proyectos Alvaro Reynoso”

Luis Montero Cabrera

lmc@fq.uh.cu

Presidente de la Sociedad Cubana de Química

Químico nacido en La Habana en 1947 y graduado como licenciado en 1968. Profesor de química física de la Universidad de La Habana (1983), Dr. rer. Nat (1980), Dr. Cs. (2012). Presidente de la Sociedad Cubana de Química desde 2012. Ha recibido varios premios y condecoraciones, entre ellos la Orden Carlos J. Finlay en 1999 y la Orden Frank País de 1er. grado en 2012.



La Sociedad Cubana de Química (SCQ) es una de las asociaciones profesionales surgidas en nuestro país después de la transformación revolucionaria de 1959. Es un fruto natural de la existencia de un creciente número de personas que se dedican o están interesadas en la química en un país y un sistema social cuya principal inversión futurista en los últimos 55 años ha sido y es la del capital humano.

La disciplina científica que se considera hoy en día como “química” ha ido evolucionando en su objeto de conocimiento. De ser una ciencia muy específica recién estrenada como tal después de la ilustración del siglo XVIII en Europa con la finalidad de estudiar sustancias y sus transformaciones, se ha convertido en un campo multidisciplinario de saber que penetra casi todas, si no todas, las esferas de la vida humana. La química, la bioquímica y sus tecnologías están profesionalmente presentes de forma ubicua en el mundo de hoy. Es también la educación de los químicos, los bioquímicos y los ingenieros químicos de las más multidisciplinarias de cualquier currículo de estudios universitarios en este mundo.

Ya en los inicios del siglo XIX el gran cubano que fue el sacerdote católico Félix Varela inició la enseñanza de la química experimental en Cuba. Por estos tiempos cumplimos 200 años de saber química en nuestro archipiélago. La Habana fue de las primeras ciudades del mundo que tuvo un “Instituto de Investigaciones Químicas”, en 1848, fundado por el español José Luis Casaseca y el cubano Álvaro Reynoso, ambos educados en Francia. Todo esto ocurría cuando

en la mayoría de los países del mundo de entonces nadie tenía idea de qué trataba la química como ciencia, y cualquier experiencia en ese campo no pasaba de la curandería o las técnicas ancestrales del tratamiento de materiales y sustancias. Para la mayor parte de la humanidad de aquella época el fuego era un fenómeno divino, extraordinario e inexplicable mientras que en Cuba ya era comprendido como una reacción de oxígeno con materia combustible que produce calor.

No existen pueblos mejores que otros. Tampoco pueblos “escogidos” o privilegiados en su ser. Solo existen condiciones históricas y seres humanos que pueden desarrollar una mayor o menor iniciativa para aprovechar las oportunidades de cada entorno y de cada época. En esto los cubanos tuvimos tanta suerte como poca hemos tenido en otras cosas. Hay referentes éticos y revolucionarios como Varela y Martí, y referentes científicos como Álvaro Reynoso. Aunque éste no descollara entre los descubrimientos mundiales de la química “básica” de su época, contribuyó a fundarla como ciencia en Cuba como un adelantado. Su relevancia universal la alcanzó en la alta biotecnología de su tiempo que era el cultivo y el aprovechamiento de la caña de azúcar. Es también una gran ventaja, disfrutada y por disfrutar, la tradición cubana de la caña que es la planta comercial más eficiente para la conversión de energía solar en biomasa. Los ejemplos de poca suerte histórica los podemos dejar a un lado sin ignorarlos, para también tratar de sacar de ellos lo mejor y más conveniente.

Debemos crear condiciones para que todos los cubanos de vanguardia puedan realizar sus posibilidades. Lo que hicieron nuestros pioneros del conocimiento científico se reconocerá por siempre y sería hermoso merecer declararnos como sus herederos. Solo los científicos e ingenieros cubanos interesados llevarán adelante esta tarea, simplemente porque es el espacio que debemos ocupar en nuestra sociedad y no hay ningún otro ente, ni del estado ni de la sociedad civil, que se pueda encargar de ello ni que le pueda corresponder socialmente de esta forma.

¿Cómo podemos desde la Sociedad Cubana de Química erigirnos en continuadores y amplificadores de la obra ancestral de nuestros referentes históricos? ¿Cómo podemos contribuir a la Patria y a la ciencia mundial de excelencia que nos inspira? ¿Cómo podemos poner nuestro grano de arena para que todos seamos mejores?

Debemos desarrollar todas las iniciativas posibles para lograr que la cultura científica penetre profundamente en nuestra sociedad y en cada ciudadano para contribuir así a nuestro bienestar material y espiritual, especialmente en tópicos relacionados con la química.

La razón de ser de una asociación como la nuestra es la de comunicarnos y la de cooperar en bien de los cubanos y de todos nuestros congéneres en cualquier parte del mundo. Para lograr esto necesitamos esas iniciativas, es verdad, y también voluntariado, porque salvo el reducidísimo personal que auxilia nuestro trabajo, todos los que nos desenvolvemos en la dirección de la SCQ lo hacemos solo aportando, sin remuneración material alguna y solo con la satisfacción espiritual de estar haciendo lo correcto.

Las iniciativas que promovamos deberían surgir al menos en todo espacio donde exista un químico, bioquímico, ingeniero o simpatizante de estas ciencias que sea miembro de la Sociedad Cubana de Química. No pueden venir, ni siempre, ni casi siempre, “orientadas” del “nivel central”. Lo que nos hace potencialmente más útiles es precisamente la distribución de nuestra membresía a todo lo largo y ancho de Cuba y hasta más allá, en un futuro cercano. No

desaprovechemos las ventajas antes mencionadas de interesarnos por una ciencia básica que es multidisciplinaria, que tiene fuerza y tradición y que además está bien distribuida nacionalmente.

Si deseamos que las iniciativas desarrolladas estén formalmente auspiciadas por nuestra organización y pueda constar públicamente que es así, basta con que un miembro de la SCQ o un grupo de miembros, donde quiera que estén, se dirijan en cualquier momento a algún miembro de la Junta Directiva con un PROYECTO REYNOSO DE PROMOCIÓN CIENTÍFICA, adecuado y fundamentado. Esta propuesta y fundamentación por ahora no exige un formato específico y debe sobre todo dejar claramente establecidos i) los antecedentes y fundamentación, ii) lo que se pretende lograr, y iii) cómo, con quién y en cuales plazos de tiempo se planea lograr. La Junta Directiva someterá la propuesta a evaluación externa e independiente y considerará la forma procedente de actuar con respecto a cada PROYECTO REYNOSO.

Llamo la atención de que la Sociedad Cubana de Química no dispone de fondos para financiar actividades de esta índole y que estos proyectos en principio no contemplan apoyo financiero. La actividad debe basarse esencialmente en el activismo y autofinanciarse, tal y como funciona la propia SCQ.

Esperemos que el futuro de la Sociedad Cubana de Química y de todos sus afiliados sea de éxitos, tan grandes como los que deseamos y seguramente lograremos los cubanos como nación en este mundo.

Premios que otorga la Sociedad Cubana de Química

Roberto Cao Vázquez
caov@fq.uh.cu

Laboratorio de Bioinorgánica. Facultad de Química. Universidad de La Habana

Graduado de Licenciatura en Química de la Universidad de La Habana en 1971. Doctor en Ciencias Químicas del Instituto Tecnológico Lensoviet, Leningrado, URSS en 1975. Doctor en Ciencias de la Universidad de La Habana en 2007. Profesor Titular del Departamento de Química Inorgánica. Presidente de la SCQ de 2009 a 2012. Ganador de 8 premios anuales de la ACC.



Nuestro gran José Martí aseveró: “Honrar honra”. Por ello, una máxima de la Sociedad Cubana de Química (SCQ) es reconocer el trabajo de nuestros más destacados asociados. Este reconocimiento se ha hecho por dos vías fundamentales: los miembros de honor y los premios nacionales o anuales.

Pocos, pero muy meritorios, han sido los miembros de honor seleccionados por nuestra organización: Ruth Daysi Enríquez, Jacques Rieumont, Arnaldo Aguiar y José Luis Mola, todos en el 2010 y Luis M. Alfonso en el 2011.

En el año 1998 fue cuando se comenzaron a entregar los premios nacionales, que se otorgaban durante la celebración de nuestros congresos. Esta particularidad impedía que fueran anuales y, sobre todo, que se le pudiese

prestar toda la atención necesaria que merece esta actividad, al combinarse con toda la vorágine que implica la celebración de un evento científico de esa magnitud. Esta etapa, de 1998 a 2009, contemplaba el otorgamiento de cuatro premios: por la obra de toda una vida, por el trabajo aplicado más destacado, por el trabajo de mayor originalidad y al joven más destacado. No se elaboró un reglamento o procedimiento al respecto y todo el proceso recaía en un jurado nombrado al efecto. A pesar de estas irregularidades, los seleccionados resultaron ser muy merecedores de los premios otorgados. Al no haberse guardado la información correspondiente solo es posible presentar datos basados en la buena memoria de varios compañeros (Tabla 1).

Tabla 1. Premios otorgados por la SCQ desde 1998 a 2009

Año	Obra de la vida	Originalidad	Aplicado	Joven
1998	José Fdez Beltrán	Rolando Pellón	-	-
2001	Daisy Enríquez	Juan Fagundo	Jorge Lodos	-
2006	Maya Chávez	-	Vicente Verez	Reynaldo Villalonga
2009	Jacques Rieumont	Lila Castellanos	Esteban Alfonso	Tirso Pons

En el año 2010 la nueva Junta Directiva elaboró un reglamento para regular los procedimientos a seguir en el proceso de premiación, así como nuevas categorías. Se definió que los premios se otorgarían anualmente, en el mes de enero siguiente al año

a premiar. Las nuevas categorías a premiar fueron las siguientes:

- Premio Nacional de Química
- Premio Nacional de Bioquímica
- Premio Nacional de Ingeniería Química

- Premio Nacional de Enseñanza de la Química
- Premio Nacional al Joven más Destacado

Igualmente se estableció que los premios serían seleccionados a partir de las propuestas de asociados de las diferentes filiales por un jurado de cinco miembros integrado

exclusivamente por galardonados en años anteriores.

Desde enero del 2011 los premios se comenzaron a entregar en acto solemne en el Aula Magna de la Universidad de La Habana, incluyendo diploma y obsequio.

Los galardonados de los años 2010 al 2012 se relacionan en la tabla 2.

Tabla 2. Premios de la SCQ entregados de 2010 a 2012

Año	Química	Bioquímica	Ingeniería	Enseñanza	Joven
2010	Carlos Peniche	María E. Lanio	Ada M. Casal	Joaquín Díaz	Isel Pascual
2011	Jorge. Pino	Georgina Espinosa	Lourdes Zumalacarregui	Olimpia Carrillo	Daniel García
2012	Ricardo Martínez	Fabiola Pazos	-	Clara Nogueiras	Yovani Marrero

Para la selección de los galardonados del año 2013 se hizo una modificación al reglamento procurando recibir un mayor número de propuestas, una gran limitante hasta ese momento. Para ello, se estableció que las propuestas se podían hacer a título personal, incluso por parte del propio interesado. Ni así se logró aumentar el número de propuestas. Afortunadamente, las pocas propuestas realizadas fueron todas muy buenas, con lo que la calidad de la selección no se afectó. Sin embargo, el hecho de que la propia nominación es un reconocimiento al trabajo de los propuestos se está perdiendo.

En la modificación que se hizo al reglamento de premiaciones también se introdujo una nueva categoría: Estudiante más Destacado. Igualmente, se introdujo el acuerdo de la Junta de Asociados celebrada en octubre del 2012 en la referente a entregar 1000 cup a cada premiado.

Los galardonados con los Premios Nacionales en el año 2013 fueron:

Es necesario volver al inicio de este artículo. Honrar a los más destacados debe ser una máxima de nuestra sociedad, por lo que resulta un deber de todos de participar en ese meritorio proceso. Todos los asociados a la SCQ deben

sentir el deber y el derecho de proponer a los más destacados, no importa si piensa que no puede llegar a ser galardonado, la propia proposición constituye un mérito.

Tabla 3. Premios de la SCQ entregados en 2013

Química:	Carlos S. Pérez Martínez
Bioquímica:	Alexis Vidal Novoa
Ingeniería:	Enerio González Suárez
Enseñanza:	Claudina Zaldívar Muñoz
Joven Destacado (compartido):	Uris L. Ros Quincoces y Roberto Cao Milán
Estudiante	Manuel Antuch Cubillas

Tenemos a muchos compañeros muy valiosos que anónimamente durante muchos años trabajan mucho y muy eficientemente que se merecen el Premio Nacional. En el campo de la ingeniería es donde más escasos han sido las propuestas, con sólo cuatro en el mismo número de años. Personalmente, me he quedado muy impactado de no pocas argumentaciones hechas sobre propuestos poco cercanos a mí. No dejemos que ningún compañero valioso quede en el "olvido". A ese colega lo tenemos al lado nuestro y seguramente no trabaja por un reconocimiento pero siempre le agradecería mucho saber que sus compañeros reconocen su abnegada labor.

A 10 años de la introducción de la vacuna conjugada contra el *Haemophilus influenzae* tipo b a partir de un antígeno sintético.

Vicente Vérez Bencomo, María C Rodríguez Montero, Yury Valdés Balbín

Centro de Química Biomolecular
vicente.verez@cqb.cu

Graduado de Ingeniería Química, en la URSS en 1977. Doctor por la Universidad de Orleans, Francia, 1983. Director del Centro de Química Biomolecular. Es líder del grupo que ha desarrollado varios proyectos de investigación a ciclo completo desde la investigación básica hasta la aplicación social, donde se destacan los trabajos desarrollados con el antígeno de la lepra que permitieron un procedimiento de diagnóstico aplicado masivamente en Cuba, la obtención de antígenos sintéticos y de anticuerpos monoclonales como sueros hemoclasificadores y la vacuna contra el *Haemophilus influenzae* tipo b (Hib). Ha recibido entre otras distinciones el premio del Tech Museum de San José California en 2005 y la medalla de oro de la Organización Mundial de la Propiedad Intelectual. Es Doctor Honoris Causa de la Universidad de Quebec en Canadá y miembro de Honor de la Sociedad Latinoamericana de Glicobiología entre otras.



El serotipo b del *Haemophilus influenzae* (Hib), al menos 6 serogrupos de meningococo y una decena de serotipos de neumococos aprovechan la ventaja que le da su capsula polisacáridica para escapar del sistema inmune del niño pequeño y causarles meningitis, neumonías y sepsis bacteriana. Tomadas en su conjunto estas bacterias son responsables de una parte importante de las infecciones del niño.

La búsqueda de vacunas para enfermedades de tal envergadura transitó por la utilización del polisacárido purificado de la capsula para inducir la generación de anticuerpos. Sin embargo, se conoció que el sistema inmune del niño por debajo de los dos años no tiene la capacidad de responder con anticuerpos a un polisacárido. La investigación de finales de siglo pasado permitieron conocer también que ese mismo polisacárido unido a través de un enlace covalente a una proteína, si es capaz de inducir la tan ansiada respuesta inmune en el niño pequeño. Es así como la química aportó el elemento decisivo en la aparición de una nueva generación de vacunas; las vacunas conjugadas.

La primera vacuna conjugada introducida en la práctica médica fue la vacuna contra Hib.¹ El nivel de complejidad de las mismas es mayor que el de las vacunas convencionales, pues la unión por un enlace covalente del polisacárido capsular a una proteína es un

proceso complejo de regular para la producción de un fármaco. Todo ello propició la búsqueda de soluciones alternativas.

A finales de los años 80 y en la década de los noventa del pasado siglo el laboratorio de van Boom en Holanda² y el de Just en Canadá³ obtuvieron por primera vez fragmentos del polisacárido de Hib por síntesis química y demostraron en animales que una vez conjugado a una proteína, el fragmento sintético del polisacárido se comportaba de manera similar a la molécula natural.

El reto a partir de ese momento, estaba sin embargo, en transformar la posibilidad académica de obtener una pequeña cantidad del antígeno sintético, en una tecnología capaz de producir el antígeno de millones de dosis de vacuna de forma competitiva con la tecnología antes establecida.

En 1989 se inició un proyecto cubano que perseguía la búsqueda de una alternativa a las vacunas conjugadas anti-Hib que empezaban a aparecer en el mercado. El proyecto comenzó en el Laboratorio de Antígenos Sintéticos (LAGS) de la Facultad de Química de la Universidad de La Habana y pretendía obtener el polisacárido por vía totalmente sintética. Se extendió por más de 14 años aprovechando lo aportado y publicado por laboratorios de diferentes partes del mundo y encontrando solución original⁴ a los cuatro problemas considerados los más críticos, a saber a) una

vía de síntesis para el disacárido intermedio que lleve al disacárido **1** de forma más fácilmente escalable b) un procedimiento para alargar la cadena del oligómero que lleve a **2** con rendimientos globales más elevados en base al disacárido intermedio⁵ c) un proceso de desprotección que produjera el antígeno **3** de alta pureza d) un procedimiento de conjugación a la proteína con rendimientos más elevados en base al antígeno sintético.⁶ (ver Fig. 1).

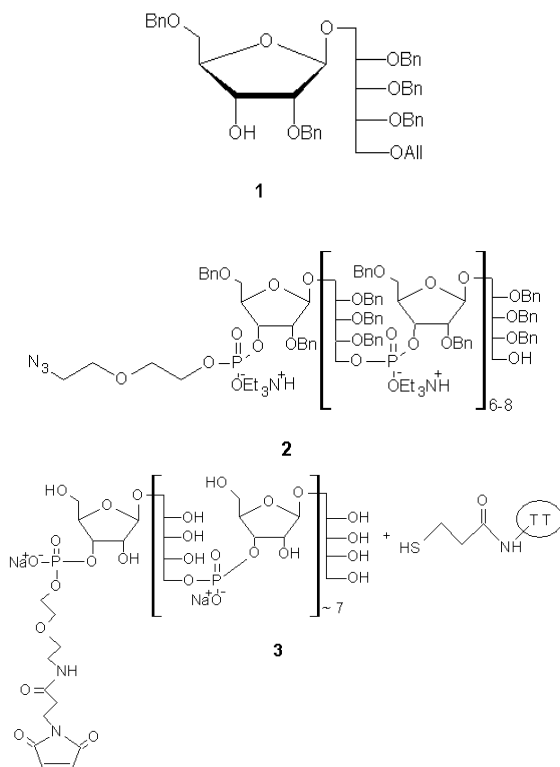


Figura 1

Una vez obtenido el prototipo de vacuna, se desencadenaron en paralelo 3 acciones fundamentales: a) desarrollo de la tecnología y construcción de la planta de producción, b) conclusión de la evaluación preclínica⁷ e inicio de los ensayos clínicos⁸ y c) elaboración del expediente farmacéutico para su registro. Estas tres acciones se desarrollaron a una velocidad vertiginosa gracias a un esfuerzo enorme de un excelente colectivo de profesionales no solo del Laboratorio de Antígenos Sintéticos sino además del Centro de Ingeniería Genética y Biotecnología, los Institutos Finlay y de Medicina Tropical Pedro Kouri, el Centro Nacional de Biopreparados y la dirección del Polo Científico de la Biotecnología cubana. Se

contó además con la colaboración internacional de la Universidad de Ottawa y agencias como las Organizaciones Panamericana y Mundial de la Salud.

El esfuerzo concluyó satisfactoriamente con la evidencia de que la vacuna se podía producir a escala comercial y que era segura e inducía anticuerpos protectores a niveles comparables al de las vacunas comerciales.⁴

A la vacuna le fue otorgado el registro por la autoridad regulatoria cubana el 4 de noviembre del año 2003⁹ y su introducción en Cuba se inició en enero del 2004.

Como parte del desarrollo lógico ulterior esta vacuna fue introducida en una combinación pentavalente con otros componentes que protegen contra la Difteria, el Tétanos, la Tosferina, la Hepatitis b y el propio Hib.¹⁰

Han transcurrido un poco más de 10 años desde su registro e introducción. En ese periodo la vacuna fue precalificada por la OMS, lo que significa que su calidad es adecuada para ser vendida a través de las licitaciones de UNICEF. Se han producido y comercializado más de 34 millones de dosis de la vacuna, ya sea como Quimi-Hib o Heberpenta, lo que significa que se ha salvado la vida a más de 3400 niños y se ha impedido que varios miles quedaran con secuelas, fundamentalmente retraso mental o sordera.

En el plano internacional, ha sido reconocida como la primera y la única hasta el presente que ha sido fabricada a partir de un carbohidrato sintético¹¹ lo que ha abierto el camino a muchas otras que lideradas por compañías especializadas se encuentra en diferentes fases de desarrollo.¹²

La producción del antígeno se desarrolla hoy en una planta que con transferencia de tecnología cubana se construyó y se puso en marcha en la provincia China de Jilin y se producirá a partir del 2015 en una planta construida en el Centro de Química Biomolecular.

Generar moléculas que protejan a nuestros niños de enfermedades que pueden dejar secuelas para toda la vida o incluso ser mortales es algo con lo que pudieran soñar una parte importante de los químicos que en el mundo trabajan en las ciencias de la vida.

Durante 14 años un grupo de investigadores luchamos y alcanzamos esos sueños. Hoy, algunos de aquellos, continuamos luchando por utilizar las herramientas de la química para arrancarle a otras infecciones bacterianas más vidas de niños de la muerte,¹³ otros ya no participan de este empeño, pero estamos seguros que rememoran con nostalgia los días en que le dedicamos todo nuestro esfuerzo a Quimi-Hib. Uno de entre ellos, la doctora Violeta Fernández Santana, no está lamentablemente entre nosotros. De estarlo de seguro que estaría en la primera fila en el desarrollo de nueva vacuna conjugada contra el neumococo. Nadie como ella como extensión de su sentimiento maternal, disfrutó con lo logrado en la vacuna contra el Hib. A ella, a su memoria, va dedicado este artículo.



Figura 2. Parte del colectivo que obtuvo la vacuna. La Dra. Violeta Fernández la primera por la derecha.

Referencias

- 1.- H. Peltola, *Clinical Microbiology Rev.*, **2000**, *13*, 302.
- 2.- P. Hoogerhout, D. Evenberg, C.A.A. van Boeckel, J.T. Poolman, E.C. Beuvery, G.A. van der Marel and J.H. van Boom, *Tetrahedron Lett.*, **1987**, *28*, 1553.
- 3.-Z.Y. Wang and G. Just, *Tetrahedron Lett.*, **1988**, *29*, 1525.
- 4.-V. Vérez-Bencomo, V. Fernández-Santana, E. Hardy, M.E. Toledo, M.C. Rodríguez, L. Heynngnezz, A. Rodríguez, A. Baly, L. Herrera, M. Izquierdo, A. Villar, Y. Valdés, K. Cosme, M.L. Deler, M. Montane, E. García, A. Ramos, A. Aguilar, E. Medina, G. Toraño, I. Sosa, I. Hernández, R. Martínez, A. Muzachio, A. Carmenates, L. Costa, F. Cardoso, C. Campa, M. Díaz, R. Roy, *Science* **2004**, *305*, 522.
- 5.-V. Vérez-Bencomo, R. Roy, M. C. Rodríguez, A. Villar, V. Fernández-Santana, E. Garcia, Y. Valdés, L. Heynngnezz, I. Sosa, E. Medina, Carbohydrate Base vaccines, **2008**, ACS Symposium series 989, 71.
- 6.-V. Fernández-Santana, R. González-Lio, J. Sarracent-Pérez, V. Vérez-Bencomo, *Glycoconj. J.*, **1998**, *15*, 549.
- 7.- V. Fernández-Santana, F. Cardoso, A. Rodríguez, T. Carmenate, L. Penna, Y. Valdés, E. Hardy, F. Mawas, L. Heynngnezz, M. C. Rodríguez, I. Figueroa, J. Chang, M.E. Toledo, A. Musacchio, I. Hernández, M. Izquierdo, K. Cosme, R. Roy, V. Vérez-Bencomo. *Infect. Immun.* **2004**, *72*, 7115.
- 8.- G. Toraño, M. E. Toledo, A. Baly, V. Fernández-Santana, F. Rodríguez, Y. Álvarez, T. Serrano, A. Musachio, I. Hernández, E. Hardy, A. Rodríguez, H. Hernández, A. Aguilar, R. Sánchez, M. Díaz, V. Muzio, J. Dfana, M. C. Rodríguez, L. Heynngnezz, V. Vérez-Bencomo, *Clinical and Vaccine Immunology*, **2006**, *13*, 1052.
- 9.-http://www.cecmecmed.sld.cu/Docs/RegSan/RCP/Bio/Vacs/Quimi-Hib_InyIM.pdf accessed November 1, **2013**.
- 10.<http://www.cecmecmed.sld.cu/Docs/RegSan/RCP/Bio/Vacs/HEBERPENTA.pdf> accessed November 1, **2013**.
- 11.- M. C. Rodríguez–Montero, Y. Valdés-Balbín, V. Vérez-Bencomo, *Carbohydrate in drug discovery, RSC*, **2014**, *en prensa*.
- 12.- Y. Valdés-Balbín, M. C. Rodríguez–Montero, V. Vérez-Bencomo, *Carbohydr.Chem.*, **2014**, *40*, 564.
- 13.- C. P. Dotres, R. Puga, Y. Ricardo, C. R. Broño, B. Paredes, V. Echemendía, S. Rosell, N. González, D. García-Rivera, Y. Valdés, D. Goldblatt, V. Vérez-Bencomo, *Vaccine*, **2014**, *32*, 5266.

Biobras-16, un ejemplo de los resultados alcanzados con la aplicación adecuada del concepto Universidad–Empresa

Iraida Spengler Salabarría
iraida@fq.uh.cu

Centro de Estudios de Productos Naturales. Universidad de La Habana

Doctora. en Ciencias Químicas en 1995. Directora del CEPN desde febrero del 2008, posee 36 años de experiencia docente. Investiga en la temática de Productos Naturales, Posee más de 50 artículos en revistas especializadas y numerosas presentaciones en eventos científicos. Obtuvo Premio de ACC en el 2009 y el Premio Provincial de Innovación Tecnológica en el 2014 como coautora en el trabajo titulado “Biobras 16: Escalado industrial y comercialización. Actualidad y Perspectivas”.



Durante la década de los noventa, el Centro de Estudios de Productos Naturales (CEPN) de la Facultad de Química de la Universidad de La Habana, dirigido por el Dr. Francisco Coll, desarrolló una investigación multidisciplinaria y multiinstitucional a Ciclo Cerrado que condujo a un promotor de desarrollo vegetal: el **BIOBRAS-16**. Este producto cuyo Ingrediente Activo, el **DI-31** tiene características de Brasinoesteroides, posee un elevado valor agregado y actividad biológica. Este bioregulador vegetal absolutamente inocuo a la salud humana y al medio ambiente, se caracteriza por ejercer un fuerte impacto sobre los rendimientos y la calidad de las cosechas de la mayoría de los cultivos, razón por la cual inmediatamente atrajo la atención de los agricultores cubanos y empresarios del sector de agroquímicos de firmas extranjeras.

Durante años este producto ha sido objeto de varias tesis de doctorado, maestría y Licenciatura en Química, en Biología y en Ciencias Agronómicas. Sus resultados en la agricultura y la biotecnología vegetal están reportados en decenas de artículos científicos y expuestos en múltiples congresos nacionales e internacionales. Este producto, que están protegido mediante patente, también ha recibido premios y reconocimientos de: Universidades, CITMA, Fórum de Ciencia y Técnica, etc. Por la comercialización del **DI-31** (Ingrediente Activo del **BIOBRAS**) en Sur América (Colombia, Chile, Ecuador y Venezuela), Centro América (Panamá, y Costa Rica), Norte América (México), Europa (España y Portugal) y Ucrania, el Ministerio de

Educación Superior ha ingresado más de dos millones de USD. Paradójicamente y a pesar de todos estos resultados y las numerosas gestiones realizadas por la dirección del CEPN, la Facultad de Química, la Universidad y del propio MES, el **BIOBRAS-16** no se pudo introducir en la agricultura cubana.

Sin embargo, en el año 2011 después del VI Congreso del PCC y como una necesidad de dar cumplimiento a sus lineamientos relacionados con la Política de la Ciencia, la Tecnología e Innovación para introducir los resultados de la Ciencia y la Técnica, resurgió de nuevo el interés por el **BIOBRAS-16**. El MINAG financió una producción puntual de 3 000 litros del **BIOBRAS-16** para destinarlo principalmente a la producción de arroz pero no fue hasta el año 2012 que se dio el impulso decisivo a la introducción del **BIOBRAS-16** en la agricultura nacional. Ese año el Ministerio de Economía y Planificación (MEP), otorgó al MES el financiamiento necesario para realizar el escalado del **DI-31** y del **BIOBRAS-16** y producir en una primera etapa 10 000 litros de este producto para aplicarlo en todo el país en el cultivo del arroz (cantidad suficiente para darle tratamiento completo a 200 000 hectáreas de arroz o de cualquier otro cultivo. Dadas las características empresariales de este mandato, con la participación decisiva del MEP, el MES, la Universidad de La Habana, el MINAG y LABIOFAM, se realizó una alianza con esta última, de manera tal que el CEPN produciría el ingrediente activo (**DI-31**) y este se llevaría a su forma terminada, **BIOBRAS-16**, en las

instalaciones de la UP7 de LABIOFAM mientras que su departamento comercial se encargaría de la distribución y comercialización a nivel nacional. Esta alianza entre la Universidad de La Habana y LABIOFAM se convertiría a su vez en un ejemplo de lo que es posible lograr mediante la aplicación adecuada del concepto **Universidad-Empresa**.

La producción del DI-31 fue acometida fundamentalmente por la dirección del CEPN y el colectivo del laboratorio de Bioproductos dirigidos por el Dr. Coll y la jefa del Grupo MS. Yamilet Coll, con apoyo de la dirección Universitaria y la Facultad.

Teniendo en cuenta que el proceso productivo inicial del **DI-31** era muy artesanal, se desarrolló un nuevo proceso que permitió eliminar una reacción química y realizar las otras en “tándem”, es decir sin aislar ni purificar uno de los productos, lo cual permitió reducir el proceso productivo de 4 a 3 reacciones químicas y de 12 operaciones a solo 8, se creó una capacidad productiva anual de 1,5 kg de **DI-31** mensuales, se desarrolló un nuevo método analítico (HPLC), para controlar la calidad del producto final, además de formar especialistas para la producción y asesorar a UP7 en la formulación del producto.

Los resultados obtenidos con la aplicación masiva de este producto al cultivo del arroz (Fig. 1) produjeron un incremento promedio de 1 ton/ha, lo cual corresponde a un ahorro por sustitución de importaciones de 25 300 300.00 USD.

Por otra parte la venta de este ingrediente activo (**DI-31**) a LABIOFAM permitió a la Universidad de la Habana ingresar **159 700.00 CUP** y **135 100.00 CUC**, con lo cual la Facultad de Química por este concepto aportó el 23% de las captaciones de divisa en este periodo.

Actualmente el CEPN está enfrascado en la producción de 15 Kg de principio activo, y en la víspera de la firma de un contrato de licencia de *know how* y de marca a LABIOFAM, teniendo en cuenta que la capacidad del laboratorio no cubre la demanda del país para este producto, en tanto que resulta muy beneficioso para la mayoría de los cultivos y además para que este grupo de investigación

pueda retomar las investigaciones y tareas de I&D+i que son de vital importancia para el desarrollo de nuevos y mejores productos a base de este y otros ingredientes activos de estructura esteroidal, contribuyendo aún más a las actividades de tipo empresarial a la que aspira nuestro Organismo en su proyecto Universidad-Empresa.



Figura 1. Llenado del grano con la aplicación del BIOBRAS-16.

CONCLUSIONES

1. Con este resultado se consolida la producción industrial del **BIOBRAS-16** para su utilización en los cultivos más importantes del país, lo cual por las ventajas ya probadas de este producto provocará un importante impacto en la economía nacional.
2. Los positivos resultados obtenidos demuestran la importancia de desarrollar el **concepto de Universidad-Empresa**, es decir, la integración de la Ciencia y la Técnica con la Economía.



Figura 2. Grupo de investigación que desarrolló en BIOBRAS-16.

Avances en la investigación a ciclo cerrado en BIOMAT

Dionisio Zaldívar Silva

dzaldivarsilva@rect.uh.cu

Centro de Biomateriales, Universidad de La Habana

Graduado de Licenciado en Química en 1986 y Doctor en Ciencias Químicas en 1996. Es fundador de BIOMAT y desde 1997 dirige el grupo de investigación “Hidrogeles + Polímeros Conjugados”. Los proyectos de investigación que dirige están relacionados con la síntesis y aplicaciones de hidrogeles poliméricos y el desarrollo de micro y nano conjugados poliméricos hidrofílicos avanzados con aplicación tanto en terapia anticancerígena y en medicina regenerativa. Es el director del Centro de Biomateriales desde julio de 2009.



El Centro de Biomateriales (BIOMAT), nació en el Departamento de Química-Física de la Facultad de Química de la Universidad de la Habana, interesados en el desarrollo de “materiales sintéticos para la medicina”, con los objetivos esenciales marcados en ese período de sustituir importaciones y crear fondos exportables. Este grupo surgió en estrecha colaboración con médicos y estomatólogos, capaces de comunicar las “necesidades y expectativas sociales” que los investigadores transformarían en “especificaciones de productos”. BIOMAT es el primer Centro de su tipo creado en Iberoamérica.

Desde sus inicios BIOMAT tuvo una gran vocación por la investigación aplicada con la obtención de resultados científicos que pudieran concretarse en productos que cumplieran tres características fundamentales:

- ✓ Ser socialmente necesarios
- ✓ con una rentabilidad económica
- ✓ y que tuvieran una salida productiva con aplicación en la sociedad.

BIOMAT es un Centro de Investigación cuya Misión es: “la creación de conocimientos científicos y tecnológicos en el campo de los materiales de uso médico, el desarrollo y la producción de biomateriales y productos químicos para el diagnóstico y las investigaciones biomédicas y su introducción en la asistencia de salud cubano, así como coadyuvar a la formación integral y continua de profesionales, a través de las actividades docentes de pregrado y postgrado, vinculadas

a los temas de investigación que el Centro desarrolla”.

Para dar cumplimiento a esta Misión, BIOMAT desarrolla una intensa labor científico-pedagógica, que incluye la innovación tecnológica como su núcleo central, en consonancia con las formas de trabajo científico más actuales. El proceso de Ciencia e Innovación Tecnológica desarrollado en el Centro incluye desde la búsqueda de soluciones a problemas teóricos de las ciencias de los biomateriales, hasta la obtención de productos comercializables.

La ciencia y la innovación tecnológica en el campo de los biomateriales en el mundo, se desarrolla aceleradamente producto del aumento de la expectativa de vida del ser humano, los conflictos bélicos, los accidentes automovilísticos y otros, lo que ha provocado la necesidad de encontrar solución a patologías o traumas con gran incidencia en la estética, capacidad funcional y calidad de vida del individuo lo que aumenta la demanda de prótesis, implantes y otros dispositivos médicos. En la actualidad, los biomateriales se diseñan y producen para una aplicación específica en la medicina, con adecuadas biocompatibilidad y biofuncionalidad y alta relación beneficio-riesgo.

Los proyectos que se desarrollan están orientados a crear productos, dispositivos y formulaciones de impacto económico-social y científico enmarcados en:

- ✓ Biomateriales para la sustitución, reparación y regeneración de tejidos e Ingeniería tisular,
- ✓ Formulaciones poliméricas y compuestas para la liberación de principios activos,
- ✓ Látex poliméricos como plataforma para la detección de microorganismos, biomoléculas y/o compuestos químicos en muestras ambientales y fluidos fisiológicos
- ✓ Sistemas integrados de gestión / Gestión de riesgos en Biomateriales.

En la actualidad BIOMAT produce y participa en la comercialización del producto TISUACRYL, Adhesivo Tisular de uso humano. Este producto ha sido entregado a especialistas de salud pública tanto de forma gratuita como cumpliendo demandas contractuales de la Dirección Nacional de Estomatología del Ministerio de Salud Pública. A partir del propio desarrollo del Centro y de las crecientes exigencias en materia de regulaciones y para la comercialización de los biomateriales, se hizo evidente la necesidad de implementar una nueva forma de gestión que permitiera: garantizar la calidad estable de los productos; demostrar la capacidad para suministrar un producto conforme a los requisitos; y proporcionar una confianza adecuada, tanto a los clientes como a las agencias regulatorias nacionales e internacionales y otras partes interesadas. El Centro de Biomateriales (BIOMAT), trabaja bajo un Sistema de Gestión certificado por la norma NC-ISO 9001:2008.



Figura 1. Forma terminada del Tisuacryl

Registros médicos obtenidos:

Cuba:

- ✓ Registro de Equipos Médicos No. I 0080085312140 en la clase de riesgo II a, para su aplicación en el cierre de heridas cutáneas, superficiales, lineales de hasta 5 cm de longitud en la Especialidad de Cirugía General, Urología, Cirugía maxilo facial, Ginecología y Angiología, desde 1996, otorgado por el Centro Estatal para el Control de los Medicamentos, Dispositivos y Equipos Médicos del Ministerio de Salud Pública.
- ✓ Registro de Equipos Médicos No. I 008004 en la clase de riesgo II a, para su aplicación en el cierre de heridas de pequeño tamaño, entre 2 y 3 cm de longitud, en zonas de baja tensión de la mucosa oral en la Especialidad de Estomatología General Integral, Periodoncia y Cirugía Maxilo Facial, desde 1998, otorgado por el Centro Estatal para el Control de los Medicamentos, Dispositivos y Equipos Médicos del Ministerio de Salud Pública.
- ✓ No. 79 GBJ para su aplicación en la prevención de la dehiscencias y fístulas de la anastomosis del esófago con segmentos de estómago, yeyuno y colon, en la Especialidad de Cirugía general, 2008.
- ✓ Certificado NC-ISO 9001:2008 con el alcance Diseño, Desarrollo y Producción de Biomateriales, Diseño, Desarrollo y formación postgraduada de la Cátedra de Calidad, Metrología y Normalización, otorgado por la Oficina Nacional de Normalización.

México: Certificado no. 0073C2003, otorgado por la Secretaría de Salud, enero 2003, última actualización 23/05/14.

Brasil: Certificado no. 80259690001, clase III, otorgado por ANVISA, mayo 2009.

Guatemala: Certificado no. PMQ 2404-2007, otorgado por Ministerio de Salud Pública, 04/09/07, como dispositivo médico.

Costa Rica: Certificado No. 2311-EMB-9996, otorgado por el Ministerio de Salud de la República de Costa Rica, 5/11/2010.

A pesar de las serias limitaciones experimentales, la obsolescencia y ausencia de aparatos de caracterización y el marco regulatorio existente, otros productos han sido

desarrollados como el APAFILL-G, BIOGRAFT-G y otros que se encuentran en avanzadas etapas de desarrollo. Sin embargo no siempre los resultados obtenidos se introducen en la práctica y contribuyen a la solución de problemas concretos.



Figura 2. Apafill-G

Para la introducción de estos biomateriales a la práctica social se utilizaron diferentes empresas comercializadoras, en todos los casos los resultados no fueron los mejores, por lo que se demostró que era necesario una empresa de nuestro propio sistema y que respondiera a los intereses de BIOMAT, de la Universidad y del Ministerio de Educación Superior. Desde febrero del 2008 el Tisuacryl se exporta a través de NEURONIC S.A. al mercado exterior, manteniendo la gestión de la OTRI-UH para el mercado nacional.

Desde el 2012 se ha logrado que la DNE mantenga una solicitud estable de Tisuacryl, que en el 2012 y 2013 fue de 8000 ampollitas y en el 2014 de 16000 ampollitas.

Recientemente se ha propuesto la creación de una Organización Superior Universitaria para el desarrollo y gestión de la ciencia, la innovación y la exportación de servicios académicos. Su desarrollo se concibe en dos etapas. En la primera, se debe consolidar un centro de costo con atribuciones especiales, y en la segunda etapa debe funcionar como una unidad presupuestada con tratamiento especial.

Finalmente, destacar la alta contribución de los resultados científicos obtenidos y la formación de doctores, definido como una estrategia del Ministerio de Educación Superior. El 68 % de los investigadores de BIOMAT son Doctores en Ciencias específicas y se prevé que el 2016 sea el 80 %. Este resultado ratifica el papel determinante de la I+D+i universitaria sobre la calidad de todas las funciones sustantivas y de su impacto económico social.



Figura 3. Promoción del Tisuacryl

La revolución de las nanoformas de carbono

Nazario Martín León

nazmar@ucm.es

Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad Complutense de Madrid, E-28040 Madrid, España. <http://www.ucm.es/info/fullerene>

IMDEA-Nanociencia, Campus de Cantoblanco, Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid, España

El Dr. Nazario Martín es catedrático de la Universidad Complutense de Madrid y Director Adjunto del nuevo Instituto IMDEA-Nanociencia de la Comunidad de Madrid. Ha sido profesor visitante en las universidades de California y en las de Angers y Estrasburgo. Es Doctor Honoris Causa por la Universidad de La Habana. Ha publicado más de 500 artículos en revistas científicas (índice $h > 55$). Ha sido nombrado Fellow of the Royal Society of Chemistry (UK) y es miembro de la Real Academia de Doctores de España, ha sido Presidente de la Real Sociedad Española de Química. Ha recibido el “Premio Dupont de la Ciencia” y la “Medalla de oro y premio a la investigación” de la RSEQ, el prestigioso “Premio Jaime I de Investigación Básica”, el “Alexander von Humboldt Award” y el “EuCheMS Lecture Award”. También ha recibido el “Advanced Grant de la European Research Council” (ERC).



En el pasado año 2011 se celebró el “año internacional de la química” con el propósito de difundir esta ciencia en la sociedad y, además, celebrar el centenario de la concesión del Premio Nobel de Química a Marie Curie por el descubrimiento de dos elementos químicos radiactivos, el polonio y el radio, hecho sucedido en 1898 y, de esta forma, destacar la importancia del concurso de la mujer en la ciencia. Entre las diferentes conclusiones alcanzadas durante este año de conferencias y actos organizados en torno a la química, quizás una de las más importantes desde mi punto de vista fue el considerar que la química podría experimentar a lo largo de los próximos años una auténtica “revolución” debido a los múltiples desafíos a los que se enfrenta nuestra sociedad que, necesariamente, requieren del concurso de las ciencias en general, y de la química en particular al definirse como “una ciencia central”.

Retos tales como la comprensión de la célula y la naturaleza de la vida, el origen de la vida, el reconocimiento molecular en agua o las bases moleculares del sentido de la percepción y la inteligencia son algunas de las preguntas aún sin respuesta que preocupan al ser humano y que será necesario responder para llegar realmente a saber y entender lo que somos. Pero, además, hay cuestiones no menos importantes que afectan al desarrollo del

bienestar social y mantenimiento del medio donde vivimos que, aunque consideradas cuestiones prácticas, requieren, incluso, ser abordadas con mayor urgencia desde el ámbito de la ciencia. Me refiero al problema central de la energía y los derivados de la misma, como conservación del entorno, calentamiento global, contaminación, falta y calidad de agua y de alimentos, etcétera. Todo esto sin descuidar la necesidad del avance de la química en aspectos tan importantes como el diseño y preparación de nuevos fármacos que permitan atajar enfermedades actuales aún no controladas y afrontar las que están por venir. Y, por ejemplo, el desarrollo de nuevos y más eficaces catalizadores que optimicen los procesos de producción (economía atómica y eliminación de subproductos y disolventes contaminantes) de la inmensa cantidad de productos químicos que nuestra sociedad demanda. Es decir, el reto será llegar a una “química verde”, que exigirá rediseñar nuevos procesos químicos trabajando en condiciones menos extremas, es decir, hacer una química mejor y más creativa.

Pues bien, uno de los ámbitos de nuestra ciencia que han experimentado una verdadera revolución en las últimas tres décadas, y especialmente en la última, con todavía imprevisibles consecuencias sociales, ha sido el elemento químico carbono. Esta revolución

dio comienzo con el descubrimiento de los fullerenos en el primer trabajo publicado por Robert F. Curl, Sir Harold W. Kroto y Richard E. Smalley (laureados con el Premio Nobel de Química en 1996) en la revista *Nature*, en 1985.¹ Previamente, en 1991, el fullereno fue declarado la molécula del año por la revista *Science*. La revolución continuó con el descubrimiento de los nanotubos de carbono de pared múltiple, publicado en 1991 por Sumio Iijima, seguido tan solo dos años después con la publicación de los nanotubos de pared sencilla, descubiertos simultáneamente por los grupos de investigación de Iijima e Ichihashi (NEC Corporation) y Bethune *et al.* (IBM) en 1993, con una diferencia en el envío de ambos manuscritos a la revista *Nature* de tan solo un mes.² Curiosamente, la serendipia o descubrimiento fortuito tuvo que ver en ambos casos ya que la formación de los nanotubos de carbono de pared sencilla (SWCNTs) fueron el resultado de la formación fallida de obtención de nanotubos de pared múltiple (MWCNTs) rellenos de metales de transición. Más recientemente, con el descubrimiento del grafeno por André K. Geim y Konstantin S. Novoselov publicado en la revista *Science* en 2004 (ambos galardonados con el Premio Nobel de Física en 2010) se produce un auténtico tsunami en la ciencia del carbono al aislarse por vez primera una lámina de átomos de carbono bidimensional de espesor atómico.³

Sin embargo, sería injusto circunscribir las nanoformas de carbono a tan solo estos tres sistemas (fullerenos, nanotubos y grafeno) ya que se conocen muchos más, los cuales no son tan conocidos ni han sido tan explorados desde el punto de vista de su reactividad química y propiedades.⁴ Por citar tan solo algunos ejemplos, es preciso mencionar los fullerenos endoédricos que son aquellos que poseen un átomo, molécula o clúster en su interior, los denominados nanocuernos (nanohorns) en forma de asta, las nanocebellas (nanoonions) o fullerenos conteniendo a otros fullerenos, los denominados guisantes de carbono (peapods) que son nanotubos de carbono conteniendo fullerenos en su interior, los nanovasos (nanocups) formados por especies de conos de carbono truncados a

modo de vasos que suelen encontrarse apilando entre ellos, los nanocapullos (nanobuds) en donde un fullereno surge de un nanotubo de carbono a modo de un capullo en un tallo, etc. Todas estas formas mencionadas, además de muchas otras posibilidades tales como el potencial infinito número de los denominados fullerenos que no siguen la regla del pentágono aislado (regla IPR, Isolated Pentagon Rule), los denominados fragmentos de fullerenos, que son estructuras no planas en forma de cuenco (bowl) o, por ejemplo, los puntos cuánticos de grafeno (graphene quantum dots) que presentan propiedades excepcionales debido al confinamiento de electrones, configuran algunas de las formas en las que el elemento químico carbono nos ha sorprendido con este nuevo alótropo que podemos denominar genéricamente “fullerenos” y que completa los ya conocidos diamante y grafito que, a diferencia de los fullerenos, son estructuras reticulares insolubles.

En esta breve publicación quiero centrarme, especialmente, en dos aspectos singulares de estas nanoestructuras de carbono, el primero de ellos es mostrar cómo se puede racionalizar la diferente reactividad de las nanoformas de carbono más estudiadas, específicamente los fullerenos, nanotubos de carbono y grafeno, si bien se puede extender a todos los sistemas conocidos, atendiendo a parámetros estructurales relativamente sencillos (Figura 1).⁵ El segundo aspecto y, quizás más llamativo, es la interconversión observada entre diferentes nanoformas de carbono, lo que da idea de la enorme versatilidad del elemento químico carbono.⁶

Con respecto al primer aspecto, las nanoestructuras de carbono conjugadas no planas tales como fullerenos, nanotubos de carbono y cualquiera de las formas mencionadas anteriormente a excepción del propio grafeno, presentan dos factores como responsables de su reactividad química: uno de ellos es el grado de piramidalización inducida por la curvatura de la superficie de carbono en cada uno de los átomos (θ_p) con respecto al sistema π ($\theta_p = \theta_{\sigma\pi} - 90^\circ$), y el otro es la pérdida de alineamiento de los orbitales π entre pares de átomos de carbono adyacentes.

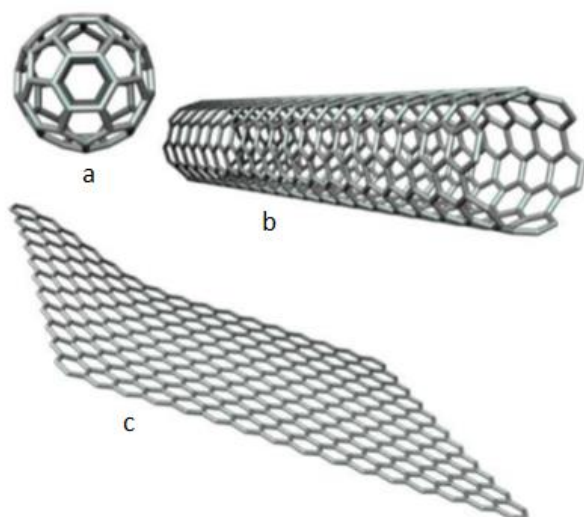


Figura 1. Estructuras de carbono de baja dimensionalidad representadas por (a) el fullereno C_{60} (0 D), (b) un nanotubo de carbono de pared sencilla (1D) y (c) una lámina de grafeno (2D).

Si consideramos que los fullerenos están curvados en dos dimensiones, que los nanotubos de carbono están curvados en solo una dirección y que el grafeno presenta una estructura plana y, por tanto no está curvado, se entenderá que el grado de piramidalización θ_p , entendido como la diferencia existente entre el ángulo medido y 90° (de la simetría trigonal), varía progresivamente desde los $\theta_p = 0^\circ$ del grafeno, los pocos grados de los nanotubos de carbono (dependiendo de su diámetro y número de capas) a la máxima desviación observada para los fullerenos. A modo de ejemplo, el fullereno C_{60} presenta un valor de $\theta_p = 11,6^\circ$, mientras que este valor para un nanotubo de pared sencilla del mismo diámetro es de $\theta_p = 6,0^\circ$. Evidentemente, el grado de reactividad es mayor para aquellas estructuras que presentan un valor mayor para θ_p (Figura 2).

El segundo factor topológico que influye sobre la reactividad de estas especies es la pérdida de alineamiento orbitalico entre átomos adyacentes de carbono. La pérdida del alineamiento de los orbitales es el origen de la tensión torsional en los nanotubos y determina su reactividad. Este valor depende, naturalmente de la naturaleza del propio nanotubo en función de los vectores (n,m) que definen su comportamiento y propiedades.

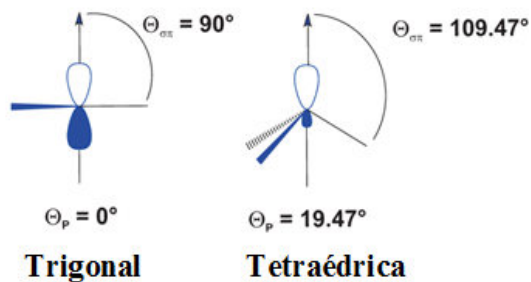


Figura 2. Grado de piramidalización ($\theta_p = \theta_{\pi} - 90^\circ$) definido como la situación entre una estructura trigonal y otra tetraédrica.

El segundo aspecto singular a destacar en las nanoformas de carbono es el hecho de que resulta sorprendente comprobar cómo las diferentes manifestaciones de los fullerenos, como alótropos de carbono, pueden transformarse entre sí, dando idea de la gran versatilidad de este elemento singular de la Tabla Periódica. Se ha descrito como los nanotubos de carbono pueden transformarse en nanocintas de grafeno y, a su vez, como el grafeno puede transformarse en fullerenos, en un baile de átomos de carbono que el científico empieza a comprender y a controlar.⁶ Sin duda que los fullerenos en general, a pesar de su relativamente reciente descubrimiento, llevan muchos años en nuestro planeta y, también, en el espacio interestelar formando parte de otros asteroides.⁷ Sin embargo, su observación solo ha sido posible, una vez más en ciencia, cuando las técnicas de medida y observación disponibles lo han permitido. En este sentido, las técnicas de microscopía electrónica (SEM, TEM) y de fuerza atómica (AFM) así como la microscopía de efecto túnel (STM) han participado de forma decisiva en estos descubrimientos y ya son, de hecho, una herramienta imprescindible en la investigación química.

Es evidente que el impacto real de estas nuevas nanoformas de carbono en nuestra sociedad solo tendrá lugar cuando influyan en nuestras vidas de alguna manera. En este sentido, aunque se conocen algunas aplicaciones prácticas de fullerenos y, especialmente de nanotubos de carbono, el grafeno está llamado a producir un salto cuántico en este sentido, siendo muchas las

expectativas que esta nueva forma de carbono ha producido en el ámbito científico y tecnológico. Aunque ya existen múltiples aplicaciones a nivel de laboratorio y algunas ya a nivel comercial, las expectativas levantadas por este nuevo material ligero, flexible y barato con propiedades ciertamente sorprendentes son enormes. Los años próximos nos darán una medida exacta de su potencial tecnológico e impacto social.

Referencias

- 1) H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, *Nature*, **1985**, 318, 162. Las conferencias pronunciadas con motivo de la concesión del Premio Nobel han sido publicadas: a) H. Kroto, "Symmetry, Space, Stars, and C₆₀", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **1997**, 36, 1578; b) R. E. Smalley, "Discovering the Fullerenes", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **1997**, 36, 1594; c) R. F. Curl, "Dawn of the Fullerenes: Conjecture and Experiment", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **1997**, 36, 1566. Para una actualización sobre fullerenos, véase: N. Martín, "The revival of Fullerenes?", *Interface*, **2013**, 22, 51.
- 2) a) Descubrimiento de nanotubos de carbono de pared múltiple: S. Iijima, *Nature* **1991**, 354, 56. Descubrimiento de nanotubos de carbono de pared sencilla: b) S. Iijima, T. Ichihashi, *Nature* **1993**, 363, 603. c) D. S. Bethune, C. H. Klang, M. S. de Vries, G. Gorman, R. Savoy, J. Vasquez, R. Beyers, *Nature* **1993**, 363, 605. Para una actualización sobre nanotubos de carbono, véase: D. M. Guldi, N. Martín, eds. "Carbon Nanotubes and Related Structures"; VCH-Wiley, Weinheim, Germany, **2010**.
- 3) K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, *Science*, **2004**, 306, 666. Para una actualización sobre grafeno, véase: L. Rodríguez-Pérez, M. A. Herranz, N. Martín, "The Chemistry of Pristine Graphene", *Chem. Commun.*, **2013**, 49, 3721.
- 4) a) Para una revisión sobre nanoformas de carbono, véase: J. L. Delgado, M. A. Herranz, N. Martín, "The Nanoforms of Carbon", *J. Mater. Chem.* **2008**, 18, 1417; b) "Nanoestructuras de carbono: un nuevo desafío científico", *Anales de la RSEQ de Química*, **2007**, 103, 5.
- 5) A. Hirsch, O. Vostrowsky, *Top. Curr. Chem.* **2005**, 245, 193.
- 6) a) D. V. Kosynkin, A. L. Higginbotham, A. Sinitskii, J. R. Lomeda, A. Dimiev, B. K. Price and J. M. Tour, *Nature*, **2009**, 458, 872; (b) L. Jiao, L. Zhang, X. Wang, G. Diankov and H. Dai, *Nature*, **2009**, 458, 877; c) G. Otero, G. Biddau, C. Sánchez-Sánchez, R. Caillard, M. F. López, C. Rogero, F. J. Palomares, N. Cabello, M. A. Basanta, J. Ortega, J. Méndez, A. M. Echavarren, R. Pérez, B. Gómez-Lor, J. A. Martín-Gago, *Nature*, **2008**, 454, 865.
- 7) Científicos de la Universidad de Western Ontario han descubierto en la nebulosa planetaria Tc 1, mediante el espectro infrarrojo del telescopio espacial Spitzer, que su espectro IR está dominado por las bandas de fullereno C₆₀ y, en menor extensión, por C₇₀, ambos en forma neutra. Se estima que la cantidad de fullerenos presente en Tc 1 es alrededor del 1,5 % del carbono presente, siendo equivalente a la masa de tres Lunas. Véase: E. J. Cami, J. Bernard-Salas, E. Peeters, S. E. Malek, "Detection of C₆₀ and C₇₀ in a young planetary nebula". *Science* **2010**, 329, 1180.

La Química Supramolecular en las Nanociencias

Roberto Cao Vázquez
caov@fq.uh.cu

Laboratorio de Bioinorgánica. Facultad de Química. Universidad de La Habana

Graduado de Licenciatura en Química de la Universidad de La Habana en 1971. Doctor en Ciencias Químicas del Instituto Tecnológico Lensoviet, Leningrado, URSS en 1975. Doctor en Ciencias de la Universidad de La Habana en 2007. Profesor Titular del Departamento de Química Inorgánica. Presidente de la SCQ de 2009 a 2012. Ganador de 8 premios anuales de la ACC. Ostenta la Orden Frank País y la Carlos J. Finlay. Ha recibido reconocimientos a diferentes niveles.



La Química Supramolecular (QS) trata sobre las interacciones no-covalentes entre las moléculas.¹ Pudiera decirse que este novedoso campo de la química formalmente surge en el año 1987 cuando Charles J. Pedersen (DuPont, EEUU) y Ronald J. Cram (UCLA, EEUU), con los éteres corona y esferandos, respectivamente, y el francés Jena Marie Lehn (Univ. Strasburg, Francia), quien trabajó en los criptandos, recibieron el Premio Nobel de Química.

En un compuesto supramolecular, las moléculas se asocian por su afinidad geométrica y/o electrónica, por reconocerse molecularmente. En estas asociaciones no-covalentes tienen mucha importancia las atracciones electrostáticas y los enlaces de hidrógeno.

En el DNA la asociación de las dos hebras por enlaces de hidrógeno tiene la característica de que una se encuentra frente a otra. Sin embargo, el caso más común en la química supramolecular (QS) es que una de las moléculas tenga una forma cóncava y otra sea más pequeña, con un tamaño tal que pueda introducirse dentro de la primera. Se dice entonces, que la molécula cóncava se comporta como un receptor u hospedero y la que se incluye, un sustrato o huésped. Así pues, la QS se centra fundamentalmente en interacciones sustrato-receptor o huésped-hospedero. Para indicar quién incluye a quién se utiliza el

símbolo @ con el sustrato (huésped) a la izquierda y el receptor (hospedero) a la derecha: sustrato@receptor.

Los mejores receptores son aquellos de naturaleza tridimensional, como los esferandos, criptandos, calixarenos, ciclodextrinas (CDs), etc. En Cuba, la QS surgió en 1990 en nuestro laboratorio basada en el estudio de derivados de ciclodextrinas.² Nuestro trabajo en el campo de la QS ha continuado desde entonces pero con un giro importante desde finales del siglo pasado hacia las Nanociencias. Este cambio no fue ni casual ni mucho menos forzado.

Uno de los pilares fundamentales de las Nanociencias es precisamente la QS. Esta afirmación se basa en el hecho de que en la QS los procesos son reversibles y espontáneos, ambas condiciones fundamentales en todo dispositivo nanométrico.

En un inicio, nuestro laboratorio se centró en el desarrollo de monocapas autoensambladas (SAMs) sobre electrodos y nanopartículas, fundamentalmente de oro y plata. Para ello, se utilizaron CDs perioladas que permitieran que los nuevos grupos funcionales introducidos se asociaran a los metales nobles (bandos) oro y plata. Las cavidades de las CDs sirvieron para reconocer molecularmente diferentes tipos de especies, como la dopamina, un importante neurotransmisor (Figura 1a), o enzimas para el

desarrollo de biosensores (Figura 1b-1e). También se ha inmovilizado supramolecularmente una enzima, la lacasa, sin usar CD (Figura 1f).

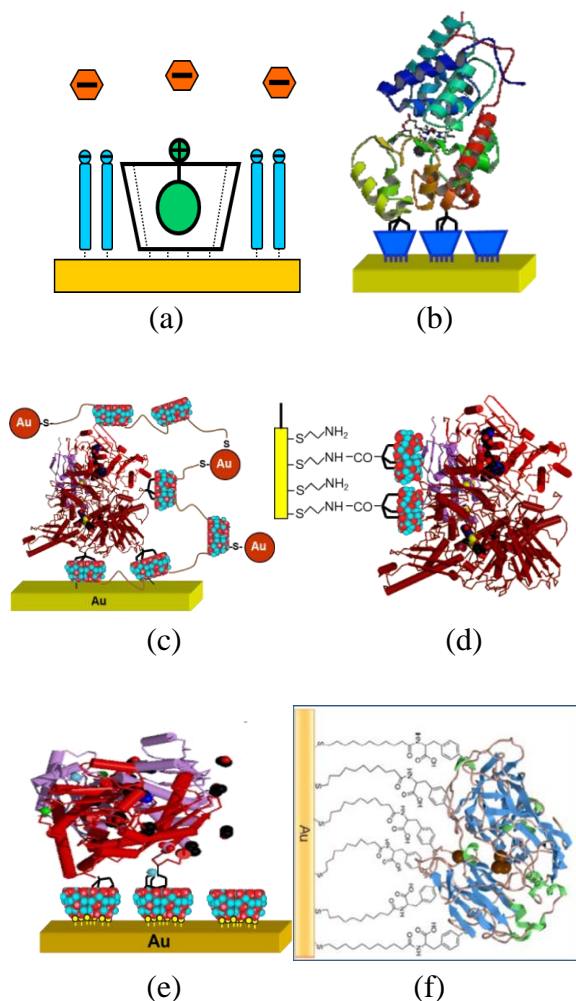


Figura 1. Representación esquemática de diferentes sensores y biosensores electroquímicos desarrollados por nosotros basados en procedimientos supramoleculares: a) detección de dopamina; b) H_2O_2 con peroxidasa de rábano de caballo; c) y d) xantina con xantina oxidasa;^{5,6} e) L-fenilalanina con fenilalanina deshidrogenasa;⁷ f) lacasa sobre derivado de *Tyr*.⁸

El concepto de monocapa auto-ensamblada (en inglés: self-assembled monolayer, SAM) se refiere a la asociación aproximadamente vertical de un conjunto de moléculas sobre una superficie preferentemente metálica, semiconductor o alguno de sus óxidos. La altura de la monocapa es la de una molécula, o sea, de unos pocos nanómetros. Por ello, se

considera que el sistema resultante es bidimensional al ser la altura despreciable. Se construyeron SAMs de CDs sobre nanopartículas de Au (AuNP) para igualmente inmovilizar enzimas en la búsqueda de sistemas nanométricos con propiedades terapéuticas y de diagnóstico (Figura 2).⁹

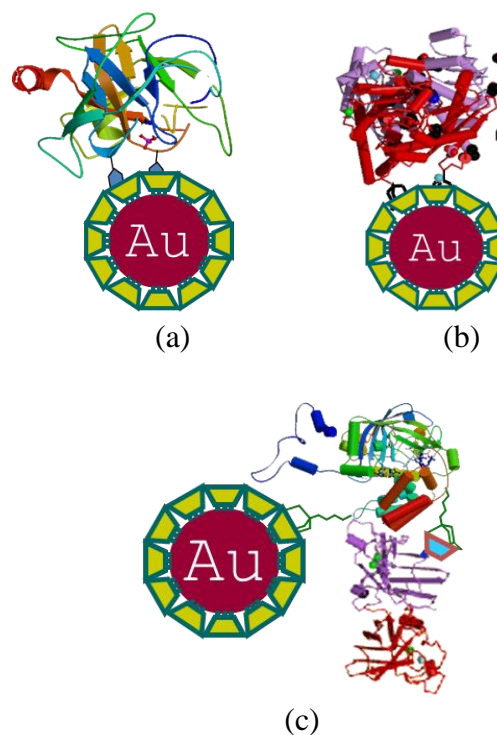


Figura 2. ANPs recubiertas con CDs pertioladas para inmovilizar supramolecularmente enzimas: a) tripsina nativa;¹⁰ b) L-Fenilalanina deshidrogenasa modificada con adamantano;¹¹ c) catalasa modificada con adamantano y superóxido dismutasa modificada con CDs.¹²

También fueron construidos compuestos de coordinación sobre AuNPs¹³ pero con una doble finalidad: terapia y diagnóstico, un novedoso enfoque que ha dado en llamarse: nanoteranosis. Los dos principales dispositivos nanoteranósticos desarrollados por nosotros se presentan esquemáticamente en la Figura 3.

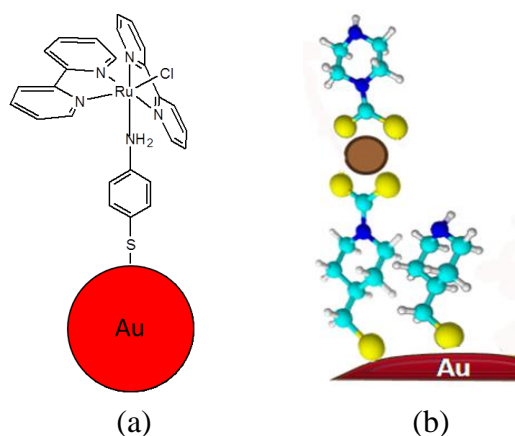


Figura 3. Dispositivos nanoteranósticos desarrollados basados en la construcción de compuestos de coordinación sobre AuNPs: a) complejo de Ru para la regulación y detección de óxido nítrico;¹⁴ b) SAM mixta que contiene un bis(ditiocarbamato)cobre(II) para dismutar radical superóxido¹⁵ que anteriormente fue construido capa-a-capas.¹⁶

En la actualidad se trabaja en el diseño y construcción de AuNPs conjugadas a anticuerpos monoclonales, con especial énfasis en nanoestrellas.

Agradecimientos

El autor agradece encarecidamente a todos los colaboradores que permitieron que este sueño se convirtiera en realidad, es especial a: Reynaldo Villalonga, Alex Fragoso, Alicia Díaz García, Roberto Cao Milán, Darío González Abradelo, Rudy Martín y Manuel Antuch.

Referencias:

1. Lehn, J.-M., *Supramolecular Chemistry*. Ed. VCH. Weinheim. **1995**.
2. Villalonga, R.; Cao, R.; Fragoso, A. *Chem. Rev.* **2007**, *107*, 3088-3116.
3. Fragoso, A.; Almirall, E.; Cao, R. Echegoyen, L. *Chem. Commun.* **2004**, 2230-2231.
4. Camacho, C., Matias, J. C., Chico, B., Cao, R., Gómez, L., Simpson, B. K., Villalonga, R. *Electroanal.* 5. Villalonga, R.; Camacho, C.; Cao, R.; Hernández, J.; Matías J. C. *Chem. Commun.* **2007**, 942 – 944.
6. Villalonga, R.; Matos, M.; Cao, R. *Electrochem. Commun.* **2007**, *9*, 454-458.
7. Villalonga, R.; Tachibana, S.; Cao, R.; Ramirez, H. L. *Biochem. Eng. J.* **2006**, *30*, 26-32.
8. Antuch, M.; Abradelo, D. G.; Cao, R. *New J. Chem.* **2014**, *38*, 386 – 390.

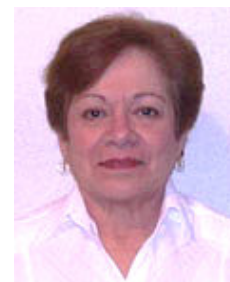
9. Cao, R.; Villalonga, R.; Fragoso, A. *IEE Proc.- Nanobiotechnol.* **2005**, *152*, 159-164.
10. Villalonga, R.; Cao, R.; Fragoso, A.; Ortiz, P. D.; Damiao, A. E.; Villalonga, M. L. *Supramol. Chem.* **2005**, *17*, 387-391.
11. Villalonga, R.; Tachibana, S.; Cao, R.; Ortiz, P. D.; Gomez, L.; Asano, Y. *J. Exp. Nanosci.* **2006**, *1*, 249-260.
12. Villalonga, R.; Cao, R.; Fragoso, A.; Damiao, A. E.; Ortiz, P. D.; Caballero, J. *J. Mol. Cat. B: Enzymatic* **2005**, *35*, 79-85.
13. Cao, Jr, R.; Díaz-García, A. M.; Cao, R. *Coord. Chem. Rev.* **2009**, *253*, 1262-1275.
14. Díaz-García, A. M.; Fernández-Oliva, M.; Ortiz, M.; Cao, R. *Dalton Trans.* **2009**, 7870-7872.
15. Cao, Jr. R.; Villalonga, R.; Díaz-García, A.M.; Cao, R.; Rojo, T.; Rodríguez-Argüelles, M. C. *Inorg. Chem.* **2011**, *50*, 4705-4712.
16. Cao, Jr., R.; Díaz, A.; Cao, R.; Otero, A.; Cea, R.; Rodríguez-Argüelles, M. C.; Serra, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 6927-6930.

Quiralidad en Fullerenos

Margarita Suárez
msuarez@fq.uh.cu

Laboratorio de Síntesis Orgánica. Facultad de Química. Universidad de La Habana

Graduada de Licenciatura en Química en 1968. Doctora en Ciencias Químicas por la Universidad de La Habana en 1980. Profesora Titular del Departamento de Química Orgánica desde 1976. Profesora de Mérito de la Universidad de La Habana (2012). Miembro de la Academia de Ciencias de Cuba. Ha publicado 140 artículos científicos. Ha obtenido 8 premios anuales de la ACC. Ha recibido las Ordenes Carlos J. Finlay y Frank País. En 2007 recibió el Premio Internacional *Sofia Kolovalovskaia*, por sus logros científicos en el área de las Ciencias Exactas.



Cuando en 1848 Louis Pasteur logró reconocer que los cristales de tartrato de sodio presentaban dos formas diferentes, donde cada una es imagen especular de la otra, encuentra un fenómeno que se conoce como quiralidad, vocablo que proviene del griego *chéir* que significa mano. Este descubrimiento permitió identificar, en el nivel molecular, las estructuras especulares llamadas enantiómeros. Los enantiómeros son isómeros que no son superponibles, y su relación es objeto-imagen.

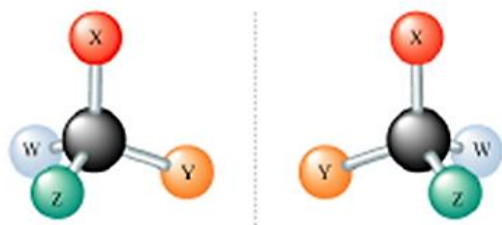


Figura 1. Representación de un par de enantiómeros

La característica más importante de los enantiómeros es que tienen las mismas propiedades físicas y químicas porque se trata de la misma molécula ya que solo difieren en cómo están colocados los sustituyentes. Debido a esto, es sumamente difícil obtener en el laboratorio los enantiómeros puros. Únicamente se pueden distinguir entre ellos cuando se utiliza la luz polarizada; y se conocen como dextrógiros y levógiros dependiendo del sentido en que desvían el plano de la luz polarizada y también cuando reaccionan con

una molécula quiral. Actualmente se han desarrollado técnicas para determinar la configuración de los centros estereogénicos en las moléculas quirales y también hay diferentes nomenclaturas que permiten describir correctamente a estas moléculas.

Los fullerenos, considerados como la tercera forma alotrópica del carbono, son moléculas constituidas únicamente por estos átomos, siendo el más abundante el C₆₀, (Figura 2). Las excepcionales propiedades químicas, electroquímicas y fotofísicas de los fullerenos les hacen ser unos candidatos ideales para el desarrollo de la denominada *electrónica molecular orgánica*. Su posible aplicación en la obtención de dispositivos fotovoltaicos o cables moleculares, hacen que su estudio sea muy atractivo. Así mismo, ellos también son de interés en química médica y en biotecnología donde han demostrado su eficacia como inhibidores de varias enzimas, en procesos de neuroprotección, presentando actividad citotóxica sobre células tumorales e incluso provocando la ruptura del DNA con irradiación con luz visible.

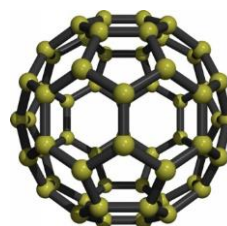


Figura 2. [60]fullereno

De fundamental importancia, fue el aislamiento y caracterización estructural del fullereno quiral D₂-C₇₆ en 1991 (Figura 3).¹ Sin embargo, a pesar de que la quiralidad de fullerenos es un aspecto que está reconocido,² son escasos los ejemplos donde se empleen derivados fullerénicos enantioméricamente puros; por ejemplo, se han usado en la síntesis inducida de polímeros helicoidales,³ o en la obtención de inhibidores de la proteasa del VIH.⁴ No obstante, estos derivados quirales son siempre obtenidos a través de largos y costosos procesos de separación cromatográfica extraordinariamente cara y limitada.⁵

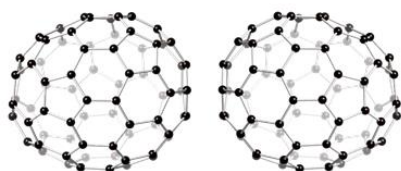
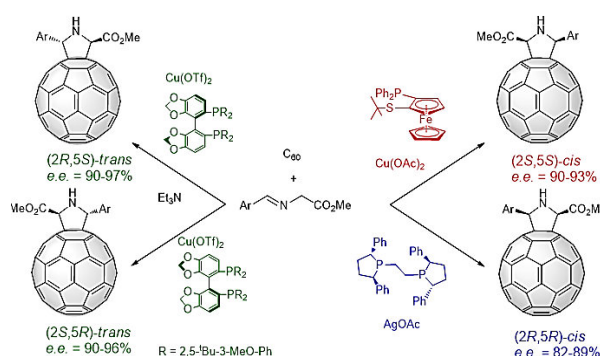


Figura 3. Estructura de los enantiómeros del D₂-C₇₆, ejemplo de fullereno quiral.

El trabajo conjunto con el Grupo de Materiales Moleculares Orgánicos que dirige el Dr. Nazario Martín, permitió desarrollar un método que permite, por primera vez, la síntesis de fulleropirrolidinas quirales “a la carta” mediante una reacción de cicloadición 1,3-dipolar enantioselectiva del [60]fullereno con iluros de azometino N-metalados catalizada por metales.⁶ El desarrollo estereoquímico de la reacción es posible por modificación del catalizador metálico [Ag(I) o Cu(II)] con una variedad de ligandos quirales en cantidades catalíticas (Esquema 1).

Un proceso enantioselectivo también se encontró en la reacción de retrocicloadición como mostró el estudio por espectrometría de masas sobre pirrolidino[60]fullerenos cuasi-enantioméricos. Los cálculos teóricos (DFT) muestran correspondencia con los resultados experimentales.⁷



Esquema 1- Síntesis estereodivergente de pirrolidino[60]fullereno.

En particular, la combinación adecuada del metal y del ligando es capaz de modular en diferentes maneras el sentido de la inducción quiral y obtener fullerenos de configuración absoluta opuesta, con excesos enantioméricos alrededor del 90%. Cabe destacar que tal resultado es aún más llamativo por ser la primera vez que se describe una reacción con catalizadores quirales empleando un reactivo no coordinante, como el fullereno C₆₀. En este sentido, el empleo del ion acetato como contra-anión del metal catalítico ha tenido un papel fundamental puesto que, además de actuar como base, se coordina al complejo catalítico permitiendo así una mejor discriminación enantiofacial. En definitiva, que en cierto modo, es posible preparar fullerenos quirales *a la carta* mediante la elección cuidadosa del coctel catalítico adecuado.⁸

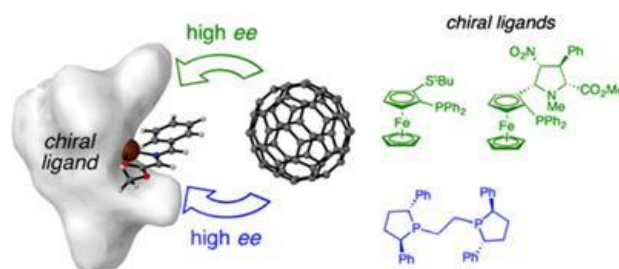
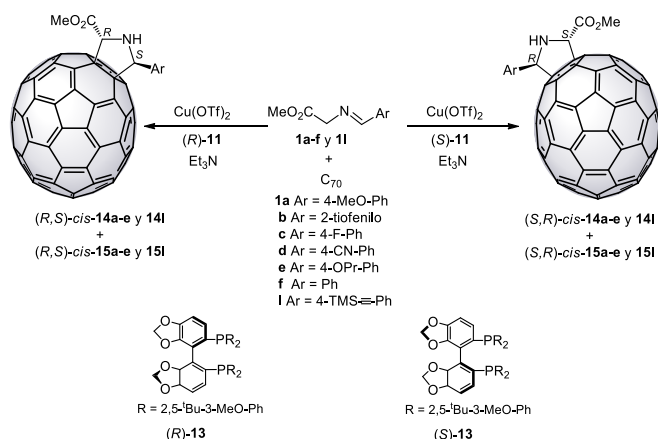


Figura 4. Resumen gráfico del artículo Stereodivergent Synthesis of Chiral Fullerenes by [3 + 2] Cycloadditions to C₆₀ (*J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 705-712)

Debido al interés en los fullerenos superiores, esta metodología fue aplicada exitosamente en el C₇₀, obteniendo un alto grado de estereocontrol dando lugar a los isómeros *cis* o *trans* con excelente exceso enantiomérico (Esquema 2).⁹



Esquema 2. Síntesis estereodivergente de pirroindino[70]fullereno.



Figura 5. Resumen gráfico del artículo Hierarchical Selectivity in Fullerenes: Site-, Regio- Diastereo-, and Enantiocontrol of the 1,3-Dipolar Cycloaddition to C₇₀ (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 6060–6064)

Esta nueva metodología, constituye un importante avance en la química de los fullerenos y abre nuevas vías para la obtención de nanoestructuras de carbono quirales de interés en diferentes disciplinas científicas como la *química médica* o incluso la *electrónica molecular orgánica*.

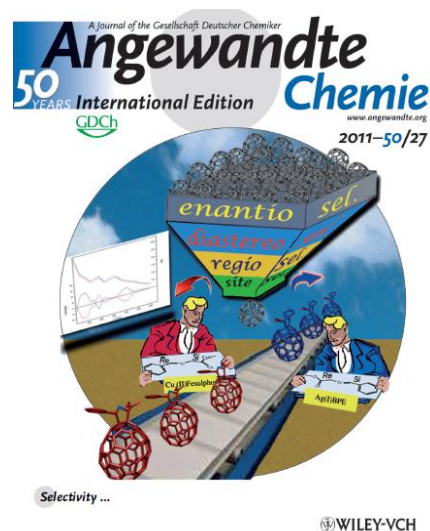


Figura 6. Portada de la revista donde se publicó el artículo Hierarchical Selectivity in Fullerenes: Site-, Regio-, Diastereo-, and Enantiocontrol of the 1,3-Dipolar Cycloaddition to C₇₀

Referencias

- 1.- R. Ettl; I. Chao, F. Diederich, R. L. Whetten, *Nature*, **1991**, *353*, 149.
- 2.- A. Kraszewska, P. Rivera-Fuentes, C. Thilgen, F. Diederich, *New J. Chem.*, **2009**, *33*, 386-396
- 3.- S. Ohsawa, K. Maeda, E. Yashima, *Macromolecules*, **2007**, *40*, 9244.
- 4.- S. Marchesan, T. Da Ros, G. Spalluto, J. Balzarini, M. Prato, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2005**, *15*, 3615.
- 5.- C. Thilgen, I. Gosse, F. Diederich, *Top. Stereochem.* **2003**, *23*, 1.
6. S. Filippone, E. Maroto, A. Martín-Domenech, M. Suárez, N. Martín, *Nature Chem.* **2009**, *1*, 578.
7. E. Maroto, S. Filippone, A. Martín-Domenech, M. Suárez, N. Martín, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 12936.
8. E. Maroto, S. Filippone, M. Suárez, R. Martínez, A. de Cózar, F. Cossío, N. Martín, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 705.
9. E. Maroto, A. de Cózar, S. Filippone, A. Martín-Domenech, M. Suárez, F. Cossío, N. Martín, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2011**, *50*, 6060.

Los Polímeros en la Ciencia de los Biomateriales

Carlos Peniche Covas
peniche@fq.uh.cu

Departamento de Química Física. Facultad de Química. Universidad de La Habana

Profesor Titular de la Facultad de Química, Licenciado en Química (1969), Doctor en Ciencias Químicas (PhD, 1973), Doctor en Ciencias (2006). Ha recibido numerosos premios como investigador-docente en la Universidad de La Habana, así como tres Premios Relevantes en el Fórum Nacional de Ciencia y Técnica. En cuatro ocasiones recibió el Premio Nacional de la Academia de Ciencias de Cuba, dos en 1994 y dos en 2007. Ha sido Distinción Especial del Ministro de Educación Superior en cuatro ocasiones por los resultados en la investigación. Recibió el Premio Nacional de Química en 2011. Es académico de Mérito de la ACC. Ostenta las Medallas Frank País y Carlos J. Finlay.



Breve introducción a los Biomateriales

Un **biomaterial** es cualquier tipo de material natural o sintético que se destina para estar en contacto con el tejido vivo o con fluidos biológicos. Los biomateriales se diseñan y producen usualmente para la reconstrucción o reemplazo de los tejidos vivos o para un sistema auxiliar de soporte vital.¹

Materiales externos al organismo fueron usados ya por antiguas civilizaciones de Egipto, India, Italia y Grecia para sustituir o reconstruir partes del cuerpo con el propósito de mejorar la calidad de vida de personas heridas o enfermas. Sin embargo, estas tempranas aplicaciones generalmente resultaban fallidas debido a infecciones. No fue sino después de la introducción de técnicas quirúrgicas asépticas en la segunda parte del siglo XIX que el empleo de los biomateriales devino factible. Desde entonces, y principalmente a partir de la primera mitad del siglo XX, se ha producido un considerable progreso en el arte de la reconstrucción de los tejidos dañados como resultado del desarrollo de la medicina, la bioquímica y la ciencia de materiales.

Un requisito importante que deben cumplir todos los biomateriales es la **biocompatibilidad**. La biocompatibilidad es “la capacidad de un determinado material para dar respuesta apropiada en una aplicación específica”.¹ En otras palabras un material biocompatible debe desempeñar su papel en contacto con los organismos vivos sin dar lugar a reacciones indeseadas en la interfaz material-

tejido. Los factores más importantes que modulan las respuestas del organismo humano a los biomateriales son su naturaleza, composición, morfología y la geometría de su superficie.

Por otra parte, un biomaterial puede ser **bioinerte** o **bioactivo**. Un material bioinerte no provoca respuesta alguna del organismo, mientras que un material bioactivo produce una respuesta deseada en los tejidos circundantes.

Los biomateriales son clasificados en cuatro tipos: **metales** (incluyendo las aleaciones), **cerámicas**, **polímeros** y **materiales compuestos** (composites).

Los **metales** y sus aleaciones se emplean para la sustitución o reparación de los tejidos duros en ortopedia (tornillos, placas, endoprótesis), en estomatología (rellenos dentales, implantes y prótesis), en terapia (electrodos, isótopos) y en instrumentos quirúrgicos.

Las **cerámicas**, los vidrios y las vitrocerámicas son una gran familia de biomateriales amorfos no metálicos. Poseen muy baja reactividad química y por tanto son generalmente bioinertes (Al_2O_3 , ZrO_2). Algunos de estos materiales son reabsorbibles ($\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$). La hidroxiapatita ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) es una cerámica bioactiva ampliamente utilizada en cirugía. Los materiales cerámicos, por su baja resistencia a la fatiga, suelen ser usados en recubrimientos o como polvo para rellenar cavidades óseas.

Los **composites** son materiales compuestos por al menos dos constituyentes (o dos fases diferentes) que mantienen su integridad física o química y conservan una interfaz definida. En dependencia de la naturaleza de la fase continua, los composites se pueden clasificar en cerámicos, metálicos o poliméricos.

Los Biopolímeros

Los **polímeros**, naturales o sintéticos son los materiales más ampliamente empleados en el diseño de biomateriales por su gran versatilidad en términos de composición, microestructura y propiedades, y por ser componentes importantes de la mayor parte de los tejidos blandos. Incluso el hueso, es en esencia un material compuesto por un polímero natural, el colágeno, y un material cerámico, la hidroxiapatita.

Otra importante característica de los polímeros es que pueden ser modificados químicamente para aportarles grupos funcionales específicos o ser enlazados a otras moléculas para promover su bioactividad o realizar una determinada función al ser implantados.

La gran variedad de composiciones, estructura y propiedades que puede ser obtenida con los polímeros permite conseguir materiales poliméricos que reproduzcan las propiedades físicas de los tejidos vivos, ya sean tejidos duros (hueso, diente) o tejidos blandos (membranas, arterias, piel, sangre y hasta órganos).

Los polímeros que se emplean en el desarrollo de biomateriales se suelen denominar **biopolímeros**, con independencia de su origen natural o sintético.

Los polímeros sintéticos más empleados son los acrílicos (polimetacrilato de metilo, hidrogeles acrílicos, α -cianoacrilatos de alquilo) las poliamidas, los poliésteres (entre ellos el poli(ácido láctico), el poli(ácido glicólico) y los copolímeros de ambos, que son familias de polímeros biodegradables y reabsorbibles muy empleados en aplicaciones quirúrgicas), los polietilenos, los polipropilenos, el policloruro de vinilo, las siliconas y los poliuretanos. Por su parte, entre los polímeros naturales más comúnmente utilizados se encuentran el colágeno, la

gelatina, la albúmina, la amilosa, la amilopectina, el ácido hialurónico, el sulfato de condroitina, la quitina y la quitosana.¹

Los polímeros sintéticos tienen la ventaja de que pueden ser obtenidos de forma reproducible, con la composición deseada y propiedades ajustables y suelen ser procesados fácilmente a nivel industrial, con bajo costo. Sin embargo, pueden presentar problemas de biocompatibilidad, relacionados frecuentemente con la presencia de monómero libre que quedó sin reaccionar, aditivos u otras impurezas, tales como residuos de catalizador no removidos.

Los polímeros naturales presentan propiedades especiales que los hacen apropiados para sus aplicaciones médicas. Están ampliamente distribuidos en la naturaleza, donde desempeñan diversas funciones en los organismos vivos: protección (seda), soporte mecánico (colágeno, elastina, celulosa, glucosaminoglicanos, quitina, quitosana), almacenamiento de energía en plantas (amilosa), contracción muscular y movilidad (actina, miosina), etc.¹ Se obtienen a partir de recursos naturales renovables, son biodegradables y biocompatibles.

Además, la similitud de los polímeros naturales con otras sustancias naturales brinda la posibilidad de diseñar materiales de baja toxicidad, que pueden funcionar biológicamente a nivel molecular para el tratamiento de enfermedades o daños al organismo, lo que suele explotarse cada vez más en biotecnología, medicina y farmacia. Adicionalmente, los biopolímeros de origen natural se degradan por las enzimas naturales y por tanto, no constituyen una fuente de contaminación ambiental en las aplicaciones industriales a gran escala.

Sin embargo, los polímeros naturales están presentes generalmente formando parte de una matriz compleja y en muchas ocasiones su aislamiento requiere procedimientos de extracción que involucran tratamientos químicos fuertes que pueden alterar su composición y estructura. En estos casos, no es fácil garantizar la reproducibilidad del producto. También los productos naturales son generalmente difíciles de purificar y modificar.

Además, exhiben una considerable variabilidad en dependencia de la fuente.

En el caso de las proteínas debe considerarse que pueden causar respuesta inmunogénica en el huésped. Otras dificultades del uso de las proteínas como biomateriales están en su procesamiento, ya que se descomponen o modifican a temperaturas relativamente bajas, y su variabilidad en estructura macromolecular (especificidad de especies y tejidos).

A partir de la combinación racional de los polímeros naturales y sintéticos se inició a fines del siglo pasado el diseño de un nuevo tipo de materiales, denominados **materiales poliméricos bioartificiales**.² Estos materiales combinan la biocompatibilidad específica de los polímeros naturales con las características de los materiales sintéticos, especialmente sus buenas propiedades mecánicas. Así, por ejemplo, se han desarrollado materiales bioartificiales basados en colágeno (colágeno-ácido poliacrílico), ácido hialurónico (ácido hialurónico-alcohol polivinílico), almidón (almidón-alcohol polivinílico), hidrogeles de quitosana-polímeros sintéticos (quitosana-alcohol polivinílico) los cuales resultan adecuados como matrices sensibles al pH para la liberación controlada de fármacos.

El grupo de Biopolímeros de BIOMAT

En el grupo de Biopolímeros del Centro de Biomateriales (BIOMAT) de la Universidad de La Habana se trabaja con polímeros naturales (quitosana, alginato, pectina) y sintéticos (poli(ácido láctico), el poli(ácido glicólico) y sus copolímeros, el polietilenglicol, la *N*-isopropilacrilamida, aunque el peso fundamental de las investigaciones ha estado centrado principalmente en aplicaciones biomédicas de un polímero de origen natural: la quitosana.

La quitosana es un aminopolisacárido compuesto por dos tipos de unidades estructurales distribuidas de manera aleatoria a lo largo de la cadena, la *N*-acetil-D-glucosamina (NAG) y la D-glucosamina, (GA) las cuales se encuentran unidas entre sí por enlaces glicosídicos del tipo $\beta(1\rightarrow4)$. De manera que lo que usualmente se conoce como quitosana es en realidad una familia de

copolímeros con diferente contenido de GA, generalmente superior a 55 por ciento.³

La quitosana es soluble en disoluciones acuosas ácidas diluidas debido a la protonación de los grupos amino que presenta a lo largo de su cadena. A partir de las disoluciones de quitosana es posible preparar películas, membranas, fibras, micro y nanopartículas.

Por su carácter policationico, la quitosana forma complejos polielectrolitos (CPEs) con polianiones. Además, la presencia de los grupos funcionales amino e hidroxilo en la quitosana posibilita la obtención de numerosos derivados que permiten diversificar sus propiedades y ampliar su empleo en distintas aplicaciones.

La quitosana es un polímero biocompatible, biodegradable, no-tóxico y mucoadhesivo, por lo que resulta atractiva para su aplicación en medicina y farmacia. Este polisacárido se degrada por la acción de la lizosima, enzima presente en los mamíferos. La lipasa, una enzima presente en la saliva y en los fluidos gástrico y pancreático humanos, también degrada la quitosana. Además, los productos de la degradación enzimática de la quitosana no son tóxicos. Por otra parte, la quitosana es un buen hemostático, mientras que sus derivados sulfatados exhiben actividad anticoagulante. Se conoce que la quitosana acelera la curación de las heridas, con una mejor estética, es hipocolestémica e hipolipidémica, posee acción antimicrobiana, antiviral y antitumoral. La actividad inmunoadyuvante de la quitosana también ha sido reconocida.³ Estas características excepcionales de la quitosana han motivado numerosas investigaciones con vistas a la posible aplicación de este polímero y sus derivados en biomedicina.

En correspondencia con lo anterior, los temas que se abordan en el grupo de Biopolímeros están encaminados al empleo de la quitosana como matriz para el desarrollo de sistemas de liberación controlada de fármacos, en aplicaciones biomédicas y biotecnológicas y para su empleo en ingeniería de tejidos.

Entre los sistemas de liberación controlada de fármacos diseñados en el grupo se encuentran las nanopartículas de CPEs de la quitosana con distintos polianiones (ácido

poliacrílico, alginato de sodio) los cuales han resultado exitosos como sistemas de liberación pH dependientes de fármacos como el 5-fluorouracilo y el metronidazol. También se han preparado CPEs de la quitosana con la bemiparina (heparina de bajo peso molecular), donde en este caso el principio activo que se libera es el propio polianión (bemiparina).

Se preparan además nanopartículas de derivados solubles de la quitosana (glicolquitosana, *N*-succinilquitosana, *N*-fructosilquitosana) para facilitar el suministro de principios activos poco solubles en agua (α -tocoferol, vitamina D2, testosterona). Para ello se ancla el fármaco al derivado de quitosana, con lo cual se obtienen moléculas anfifílicas que en medio acuoso se autoensamblan para formar nanopartículas capaces de liberar el fármaco de forma controlada en medios ligeramente ácidos.

Especial interés despiertan las partículas de quitosana con respuesta magnética que se han preparado en el grupo, que no sólo resultan adecuadas para la liberación sitio-específica de fármacos, sino también para otras aplicaciones biomédicas (terapia térmica) y biotecnológicas (inmovilización de enzimas).

En lo que respecta a las aplicaciones en ingeniería de tejidos, se preparan nanocomposites basados en quitosana-hidroxiapatita como material soporte para regeneración ósea guiada; matrices basadas en quitosana para el tratamiento de lesiones dérmicas (películas y membranas de quitosana y del CPE quitosana-pectina); hidrogel superabsorbentes con respuesta al pH, consistentes sistemas interpenetrados de quitosana con monómeros acrílicos (quitosana/acrilamida/ácido acrílico, quitosana/acrilamida/ácido itacónico, quitosana/ácido acrílico), los cuales presentan buenas propiedades mecánicas y son adecuados para la liberación controlada de proteínas y otros principios activos.

A modo de conclusión

Pero lo anterior, la obtención y caracterización físico-química de estos sistemas, es sólo el comienzo del fascinante y complejo camino hacia su aplicación práctica en el campo de los biomateriales. Para cada

nuevo material promisorio preparado por el químico se requiere su evaluación biológica, que involucra entre otros, los ensayos *in vitro* de su comportamiento en fluidos biológicos simulados para determinar su bioestabilidad o su biodegradabilidad ante la acción del pH y enzimas, y la evaluación de su bioactividad y su citotoxicidad. Con los materiales exitosos se procede a realizar ensayos *in vivo* con animales de laboratorio donde se comprueba su biocompatibilidad y su desempeño en la función para la cual fueron diseñados, para sólo después comenzar los ensayos clínicos correspondientes. Así pues, para desarrollar un nuevo biomaterial, el químico necesita de la interacción indispensable con bioquímicos, farmacéuticos, médicos, estomatólogos e ingenieros. Esta multidisciplinariedad característica de la Ciencia de los Biomateriales es enriquecedora para el químico y contribuye decisivamente a la obtención de nuevos materiales poliméricos con propiedades superiores para su empleo en el mejoramiento de la calidad de vida de las personas.

Referencias

1. Biomateriales; Eds. R. Sastre, S. de Aza, J. San Román, Faenza Editrice Ibérica, s.l. Italia, **2004**.
2. L.Lazeri, *Progress in bioartificial polymeric materials. Trends Polym. Sci.*, **1996**, *4*, 249-252.
3. C. Peniche, W. Argüelles-Monal, F.M. Goycoolea, *Chitin and chitosan: major sources, properties and applications*. En "Monomers, polymers and composites from renewable resources", Eds. M. Belgacem y A. Gandini, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, **2008**.

El desarrollo de la Química y la Tecnología Química en la Industria Azucarera Cubana

Jorge T. Lodos Fernández
jorge.lodos@zerus.azcuba.cu
Grupo Azucarero AZCUBA

Doctor en Ciencias, profesor e investigador titular, académico. Tiene 9 patentes concedidas y ha publicado 140 artículos y 5 libros vinculados, fundamentalmente, a la química y la tecnología química de la agroindustria azucarera. Ha recibido 11 premios y 3 órdenes nacionales.



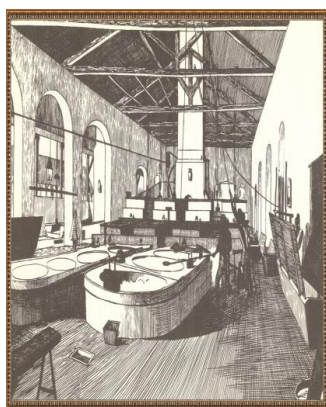
En este trabajo se describe el desarrollo de la química y la tecnología química en la industria azucarera cubana, con especial énfasis en las instituciones, temas y resultados más importantes hasta 1960, y de 1960 a 1990.

1. Antecedentes hasta 1960 cuando se nacionaliza.

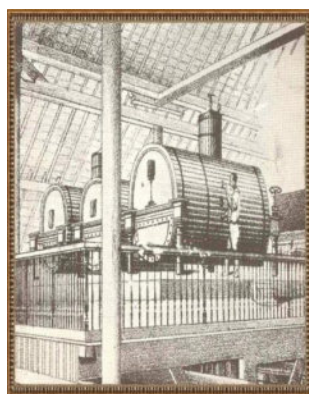
1.1. El inicio. Desde fines del siglo XVIII, el desarrollo económico y técnico de Cuba se asoció a la caña y el azúcar. La Sociedad de Amigos del País insistía en aplicar la Química a la Industria Azucarera y, a principios del siglo XIX, Arango y Parreño proponía crear una Escuela de Química para ello. El “Ensayo sobre el cultivo de la caña de azúcar” de 1862, del químico cubano Álvaro Reynoso, es aun utilizado en muchos países. Reynoso también estudió la fijación de CO₂ por la caña, sin saber aún del efecto invernadero, y fue precursor de usar sus subproductos, la actual “diversificación”. Martí citó “los lauros imperecederos... y. justa fama .. del ilustre químico cubano Álvaro Reynoso”.

1.2. La industria azucarera, la pionera. El azúcar fue la primera industria alimenticia en emplear la Química y se adelantó muchos años a la idea moderna de control técnico y químico,

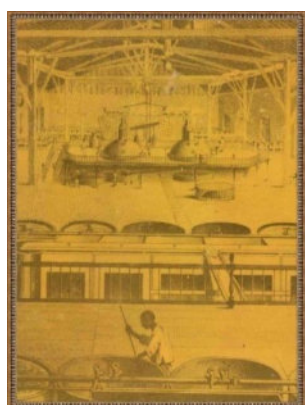
tan corriente ahora en las fábricas. Los azucareros pueden sentirse orgullosos de haber sido pioneros de la industria química pues, una gran parte de los equipos básicos de esta se desarrolló para la producción azucarera, como las centrífugas y los evaporadores. También lo fue en el uso de la energía renovable, un término tan de moda actualmente. Originalmente, la caña se “molía” con energía humana (esclavos), luego con energía animal (bueyes), hidráulica o eólica y, finalmente, con energía mecánica de biomasa (fue la primera en utilizar máquinas de vapor de leña y bagazo). Ante la escasez de leña por la deforestación de los bosques, a mediados del siglo XVIII, los azucareros del Caribe desarrollaron una tecnología de evaporar el jugo con 5 calderos de cobre de mayor a menor, que se convirtió, a principios del siglo XIX, en el evaporador discontinuo al vacío (1812) y, veinte años más tarde, en su similar continuo. Finalmente, la tecnología de evaporar con varios cuerpos se patentó en los EE.UU., un antecedente de la “protección” de la propiedad intelectual. En el 2002, la Sociedad Americana de Química declaró este invento como uno de los más importantes en toda la historia de la ingeniería química norteamericana.



Evaporador (siglo XVII)



Evaporador discontinuo al vacío (1812)

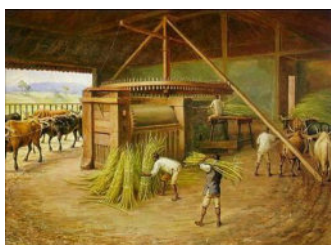


Evaporador continuo al vacío (1830)



Evaporador a triple efecto

Figura 1. Evaporadores.



Trapiche movido por bueyes



Trapiche movido por agua



Central "eólica" (siglo XVII)

Figura 2. La energía "renovable" en los comienzos.

1.3. La industria azucarera al triunfo de la Revolución. En los años 50 del siglo XX, la industria azucarera cubana era la primera exportadora mundial pero, técnicamente, dependía de los EE.UU. Solo existían

modestos esfuerzos en la Universidad de Villanueva, en su Facultad de Ingeniería Química Azucarera y laboratorio de servicios de análisis a la Industria Azucarera; en la Universidad de Oriente (UO), en su Facultad de Química; y en el Instituto Cubano de Investigaciones Tecnológicas (ICIT).

2. LA EDAD DE ORO: DE LA NACIONALIZACIÓN AL AÑO 1990.

2.1. El inicio. Desde el triunfo de la Revolución, se le concedió una gran importancia a la Industria Azucarera y de sus Derivados como base del desarrollo económico del país. En 1963, el "Che", entonces Ministro de Industrias, crea el Instituto Cubano de Investigaciones de los Derivados de la Caña de Azúcar (ICIDCA) sobre la base del ICIT y, un año más tarde, envía una carta a la Universidad de La Habana (UH) enfatizando la necesidad de aplicar la Química a la solución, entre otros, de los problemas de la Industria Azucarera. Las líneas fundamentales del ICIDCA eran el desarrollo de tecnologías para la producción de pulpa, papel y otros derivados de bagazo y para la fermentación de mieles. También, el desarrollo de técnicas de análisis químico tradicional e instrumental. En 1968, se crea un División "Azucarera", donde se estudiaba producir azúcar blanco con óxido de magnesio en lugar de cal, lo que se evalúa en el Central Camilo Cienfuegos.

2.2 El primer "Salto". El ICIDCA, a fines de los años sesenta, promueve dos importantes programas que marcarían por muchos años a muchas instituciones, químicos e ingenieros químicos cubanos: "Furanos", como materia prima para el desarrollo de una Química Orgánica nacional, en particular, polímeros y

productos bioactivos, y “Color en Azúcar”, para evitar el deterioro del azúcar crudo a granel durante su almacenaje y transportación marítima. En el Programa “Furanos”, los químicos y los ingenieros químicos desarrollaron e introdujeron en la producción varias resinas poliméricas y fármacos humanos y veterinarios originales. En las Universidades de entonces se crearon grupos para apoyar este programa. El Grupo de la UH, en particular, con colaboración soviética, lideró la síntesis de derivados furánicos con más de 30 maestrías y doctorados, formando un personal muy calificado cuya influencia, posteriormente, trascendió a los furanos. Todo ese esfuerzo propició que, a principios de los ochenta, se iniciase la construcción de una fábrica de furfural y se adquiriese y montase otra de alcohol furfurílico. En el Programa “Color en azúcar”, los químicos y los tecnólogos químicos identificaron sus causas, mecanismo químico y condiciones fisicoquímicas que lo aceleraban o inhibían, y dieron soluciones originales químicas (añadir reactivos), tecnológicas (introducir equipos para tratar el azúcar) y ambientales (diseño del almacén), entre otras, que resolvieron el problema.

2.2. El segundo “Salto”. Este tiene lugar al crearse el Instituto de Investigaciones Azucareras (ICINAZ) en 1972 en Quivicán, e integrarle el Central “Pablo Noriega”, que permitió evaluar en condiciones industriales reales desarrollos propios o ajenos, a “ciclo completo”, del laboratorio a la producción. Al inicio de los ochenta, se inauguraban en esa misma área, el Cuba 9 (Centro de Investigaciones de pulpa y papel de bagazo, a ciclo completo, con una fábrica asociada), y el Cuba 10 (Centro de investigaciones de producciones fermentativas basadas en productos azucareros, a ciclo completo, con

una planta piloto asociada) que completaron el CEDIC o Centro de Desarrollo Integral de la Caña de Azúcar. Paralelamente, en los años setenta, se crea una red de instituciones que coordina actividades de desarrollo azucareras. En el MINAZ, al ICIDCA e ICINAZ se le suma el Instituto de Investigaciones de la Caña de Azúcar (INICA), que se transfiere de la Academia de Ciencias, y se crean, entre otros, el Instituto de Proyectos Azucareros (IPROYAZ), la Empresa de Diseño Industrial (EDIMEC) y la Empresa de Automatización Industrial (EDAI), que fortalecen el “ciclo completo”. En la mayoría de los Centros de Enseñanza Superior se crean Grupos de Investigación asociados a la Química y a la Tecnología Azucarera y de los Derivados. La Universidad Central de Las Villas (UCLV) por su situación geográfica y tradición, se convierte en la Universidad “Azucarera”, con un Central piloto y un importante desarrollo en Química y Tecnología azucareras. Igual sucede con los grandes institutos de investigación, como el Centro Nacional de Investigaciones Científicas (CNIC) y el Centro de Ingeniería Genética y Biotecnología (CIGB) que participan de programas de investigación azucareros. En la esfera agropecuaria sucede algo similar, y en los Institutos de Ciencia Animal (ICA) y Ciencia Agrícola (INCA), y en el Laboratorio de Nutrición de la Caña de la Universidad de La Habana (UH), por ejemplo, se le dedica un importante esfuerzo a la caña de azúcar como producto agrícola en sí, y como una materia prima directa, o incorporándole los productos obtenidos de ella para alimento animal. En todos esos trabajos, la Química y la Tecnología Química jugaban un importante papel.



Central cubano (Años ochenta)



Campo de caña y cosechadora KTP

3. ALGUNOS RESULTADOS. Corriendo el riesgo de que falte alguno o su centro promotor, por ignorancia del autor, a continuación aparece un listado de los más relevantes en el periodo estudiado.

- El ICIDCA desarrolla las bases tecnológicas para el desarrollo de la producción de pulpa, papel, tableros, cera, furfural, alcohol y levadura, entre otros subproductos y derivados; y se construyen decenas de fábricas que convierten a Cuba en el país más diversificado del mundo.
- El ICIDCA desarrolla la tecnología de uso de los residuales de la producción de alcohol en la fabricación de levadura *Torula* que se aplica en todas las fábricas, y desarrolla, produce y comercializa el estimulador de plantas “Fitomas” y las resinas furánicas “Fural”.
- El ICA y el ICIDCA desarrollan tecnologías que permiten obtener 1 MMTM anuales de alimento animal para rumiantes y monogástricos con subproductos de la industria azucarera,
- El CNIC desarrolla y comercializa el policosanol (PPG) y la tecnología de refinar con ozono.
- El Instituto de Investigaciones para la Industria Alimenticia (IIIA) desarrolla la tecnología de producción de guarapo embotellado y de sus derivados saborizados.
- El IMRE y la Facultad de Física de la UH desarrollan, y el MINAZ produce los colorímetros “Colormatic” y el medidor de sobresaturación “Saturomatic”, basados en LEDs.
- La Facultad de Ingeniería Química del ISPJAE desarrolla la tecnología de “Clarificación balanceada”, que se evalúa industrialmente, y la de “Cristalización por enfriamiento”.
- El Área de I+D del Central Camilo Cienfuegos desarrolla sustituir miel de abejas por sirope rico en fructosa y glicerina baratos, en dietas de entomófagos, que se extiende a todo el país.
- El CIGB y el ICINAZ desarrollan microorganismos modificados genéticamente e inmovilizados para invertir sacarosa.
- La UCLV y el ICINAZ estudian la desinfección de jugos con agentes físicos y químicos, y diseñan métodos de control y la adición sucesiva, según medición, de biocidas, tensoactivos y enzimas, parte de un proceso más integral de “Quimización” con floculantes, anti-incrustantes, decolorantes e inhibidores enzimáticos y de corrosión, entre otros productos químicos.

- El Centro de Bioactivos Químicos (CBQ) de la UCLV desarrolla y comercializa el “Vitrofural” y el “Dermofural”, bactericidas y fungicidas furánicos.
- Muchas instituciones, coordinadas por el ICINAZ, participan del estudio del mecanismo físico y químico de la cristalización, incluyendo estudios reológicos, cinéticos y la influencia de agentes químicos. Se realizan los experimentos “Zona” y “Masa cocida” en el Cosmos. Uno de los resultados es la introducción en todos los nuevos centrales del Cristalizador “Cassette”.
- El ICINAZ desarrolla, produce y comercializa anticorrosivos como “Anticor” y “Protektor”, los tensoactivos “Sucrotensores” y el inhibidor enzimático “IFOPOL”, y la tecnología de obtención de dextrosa y siropes ricos en fructosa que se introduce en dos fábricas.

Cerca de cien doctorados y patentes se han obtenido en estos temas, arrastrando un número importante de diplomas y maestrías. Esta producción se presentaba en eventos técnicos nacionales como las Conferencias de la Asociación de Técnicos Azucareros de Cuba (ATAC) y de la UO y UCLV, y se publicaba en 4 revistas “azucareras”: ICIDCA, ATAC, Cubazúcar (MINAZ) y Centro Azúcar (UCLV). Todo ese esfuerzo culmina con la construcción en los años ochenta de 7 nuevas fábricas de azúcar, lo mejor de la tecnología cubana y mundial de la época, que sirvieron de modelo al desarrollo de otros países. También, como se mencionó, la industria azucarera de Cuba se convirtió en la más “diversificada” del mundo azucarero con fábricas de pulpa, papel y tableros, de alcohol, ron y levadura Torula, de alimento animal, de extracción de cera, de

producción de glucosa, sorbitol y alcohol furfurílico, y de sus derivados de segunda y tercera generación, con una quimización muy avanzada de sus procesos, y con una capacidad de desarrollo químico y tecnológico envidiables. Aun cuando la coyuntura de precios del azúcar en el mercado mundial ha influido sobre nuestra realidad actual, el conocimiento desarrollado y los resultados obtenidos por los especialistas cubanos en Química y en Tecnología Química se mantienen latentes en los mismos para enfrentar las tareas que se les reclame.

4. Conclusiones: La Química y La Tecnología Química y, sobre todo, los hombres y mujeres que las dominan, hicieron posible el desarrollo que alcanzó la Industria Azucarera cubana en 1990.

5. Agradecimientos: A los químicos e ingenieros químicos que crearon la Industria Azucarera cubana.

Una mirada a la sociedad desde la termodinámica

José Manuel Nieto Villar
nieto@fq.uh.cu

Departamento de Química Física. Facultad de Química. Universidad de La Habana

Profesor Titular de la Facultad de Química. Doctor en Ciencias Químicas. Su trabajo docente y de investigación lo realiza en el área de la Termodinámica. En los últimos 10 años ha publicado más de 25 artículos en revistas científicas y tres libros de texto. Ha ocupado el cargo de Decano de la Facultad de Química. Miembro de Las Cátedras Sistemas Complejos *H. Poincaré* y del Instituto de Filosofía de la Academia de Ciencias de Cuba. Miembro del Consejo Científico y Miembro de las Sociedades Cubanas de Química y Física y de la Junta Directiva de la Sociedad Cubana de Química. Presidente del Tribunal Permanente de Grado Científico de Ciencias Químicas. Vicepresidente de la Cátedra Honorífica *M.V. Lomonosov*.



Motivado por el deseo de la admirable profesora y amiga, la Dra. Margarita Suarez y a la usanza que conduce a un profesor a comunicar de forma respetuosa e incisiva la doctrina que profesa, me he atrevido abordar este escabroso y controvertido tema relacionado con la sociedad desde una mirada termodinámica. Es menester señalar, que ni con mucho me considero un especialista en la termodinámica y mucho menos en el tema de la sociedad, por lo cual estas líneas constituyen *per se* una atrevida excursión y más que todo, una provocación a la reflexión y al debate desde una óptica diferente.

Cuando se hace una clasificación histórica ortodoxa de las sociedades, lo concebimos atendiendo al modelo económico imperante, así hablamos del feudalismo, el capitalismo y sus diferentes manifestaciones, el socialismo etc.

La realidad actual, ha demostrado, especialmente con el advenimiento de fuertes crisis económicas, las cuales a su vez han conllevado a crisis sociales y culturales, que la auto-organización que manifiesta la sociedad trasciende en muchos casos el modelo económico imperante. Así por ejemplo, el financiamiento que ha tenido que hacer el estado a la empresa privada, a los bancos, en EUA en la crisis del 2007.

Otro ejemplo interesante, resultan las llamadas economías emergentes; en particular el caso de China que ha experimentado en la última década un crecimiento sustancial de su PIB y donde se mezclan al menos dos tipos de formas económicas, hasta el momento entendidas antagónicas entre si, por citar algunos ejemplos extremos.

En la actualidad se observa, la aparición de estructuras auto-organizadas de carácter inter-territorial e independiente de los modelos económicos imperantes en las partes que los conforman; como puede ser el caso ALBA, Unión Europea, Unión Euro-Asiática, etc.

La Corporación, representa un caso singular de un sistema termodinámico auto-organizado espacio/temporal que trasciende las fronteras de una Nación. A partir de la enmienda 14 de los EUA a finales del siglo XIX, la Corporación adquirió la forma de “persona jurídica”, lo cual le confiere a un grupo de personas, accionistas, los mismos derechos legales que a una única persona. Por ejemplo, resulta chistoso y paradójico a su vez, como las corporaciones reciben epítetos como “anciano bondadoso” (General Electric), “joven dinámica” (Nike), “tontita” (Disney), “joven extrovertida” (McDonald), etc. En la actualidad, su economía supera la del gobierno, por ejemplo, de las 100 economías

más grandes del mundo, 49 representan a estados y 51 a corporaciones.

Se observa cómo cada día más, a pesar de las crisis económicas, existe una concentración del capital en manos de un grupo cada vez más reducido e independiente de fronteras y que impone una suerte de globalización la cual conlleva, en la mayoría de los casos, en última instancia a una pérdida de la identidad cultural de los pueblos independientemente del tipo de economía y estructura social imperante en los mismos.

La sociedad, vista desde una óptica de la termodinámica, podemos postular que constituye un sistema dinámico abierto, que se auto-organiza espontáneamente, espacial y temporalmente fuera del equilibrio termodinámico y que exhibe una alta robustez, complejidad, adaptabilidad y en el que se manifiestan propiedades emergentes.

Ahora bien, para entender el sentido físico de lo postulado anteriormente, en relación a la sociedad, debemos brevemente, so pena de obviar los aspectos técnicos y sacrificando el rigor de las demostraciones, dar una panorámica conceptual, sin pérdida de generalidad, de los términos acá empleados y sus posibles implicaciones.

De acuerdo a la definición Aristotélica de Sistema, la característica fundamental que lo identifica, es que –el todo es más que la suma de sus partes-. Esta propiedad le permite al sistema, que de hecho lo entendemos en su dinámica, exhibir una serie de propiedades, resultantes de efectos cooperados y lazos de retroalimentación (feedback), denominadas “emergentes”.

La auto-organización se produce producto de que ciertos parámetros, denominados “parámetros de control”, que determinan la cualidad de la dinámica que exhibe el sistema cambian, ya sea por efectos internos o externos, y conducen al sistema dinámico a

una nueva forma de auto-organización a través de un cambio cualitativo, tipo “transición de fase”, denominado bifurcación, y a niveles cualitativamente diferentes de complejidad.

Acá la complejidad, no debe confundirse con complicación, un sistema puede ser muy complicado, es decir necesitar de muchos grados de libertad o variables para su descripción pero manifestar una dinámica muy sencilla, y viceversa. Por otra parte, mientras mayor es la complejidad que exhibe el sistema, resulta más robusto. Estos se caracterizan por exhibir una importante propiedad, la imposibilidad de pronóstico de la dinámica a largo plazo.

De esta apretada síntesis, podríamos derivar las siguientes consideraciones epistemológicas:

1. Entender como una sociedad y en ella, pueden aparecer “espontáneamente” diferentes estructuras (sistemas) jerárquicas producto de una bifurcación, una suerte de azar y necesidad, las cuales resultan inevitables y conducen a la auto-organización espacio-temporal.
2. Las mismas exhiben diferentes grados de complejidad y consecuentemente robustez. Por ejemplo las crisis económicas, aparecen de forma abrupta y su predicción a largo plazo es prácticamente imposible.
3. Mientras mayor complejidad exhiba el sistema, es más robusto y menor son las posibilidades de cambiar la cualidad de su dinámica.
4. La imposibilidad de realizar pronósticos a largo plazo.

Como epílogo, la termodinámica ofrece, al menos un marco conceptual, para entender a la sociedad en su conjunto y consecuentemente las posibilidades y las limitaciones de acción sobre la misma.

Papel de la Universidad en la creación de una cultura ambiental para el desarrollo sostenible

Cristina Díaz López

cristina@rect.uh.cu

Facultad de Química. Universidad de La Habana

Lic. en Química 1972. Máster en Ciencias Químicas en 1979 y Doctora en Ciencias Químicas por la Universidad de La Habana en 1988. Es Profesora Titular de la Facultad de Química de la Universidad de La Habana, 1990. Jefe Departamento de Química Analítica, 1988-1992 y Vicedecana de Investigaciones y Postgrado, en la Facultad de Química, 1992-2001. Directora Centro de Estudios de Medio Ambiente, 2001-2004; Vicerrectora de Relaciones Internacionales y Postgrado de la Universidad de La Habana, 2004-2012. Tiene publicaciones en revistas nacionales e internacionales. Es coautora de varios libros de texto de la asignatura Análisis Instrumental.



En el marco del Programa de Desarrollo de la Cultura y la Educación en que el gobierno cubano está enfrascado desde hace muchos años, el tema ambiental y el del desarrollo sostenible han tenido un espacio importante, en correspondencia con el proceso institucional para implementar una política ambiental consecuente con la incorporación del tratamiento de los problemas ambientales al proceso de desarrollo del país.

Como parte de este proceso en 1992 se incluyó el artículo 27 en la Constitución de la República de Cuba en el cual se expresa "El Estado protege al Medio Ambiente y los recursos naturales del país. Reconoce su estrecha vinculación con el desarrollo económico y social sostenible para hacer más racional la vida humana y asegurar la supervivencia, el bienestar y la seguridad de las generaciones actuales y futuras...".

En 1994 se crea el Ministerio de Ciencia Tecnología y Medio Ambiente y en 1997 se aprueba la "Estrategia Ambiental Nacional" y la "Estrategia Nacional de Educación Ambiental", este último es un documento programático en el que se manifiesta la necesidad de que la Educación Superior Cubana desempeñe un rol protagónico en el desarrollo de una cultura ambiental en nuestra población como premisa para lograr los objetivos y metas del desarrollo sostenible.

La naturaleza compleja del problema ambiental exige una reflexión integradora donde confluyan fenómenos estudiados por dominios del saber totalmente separados.

La complejidad de lo ambiental incluye la consideración de fenómenos naturales y sociales y dentro de estos los cognoscitivos, los económicos, los políticos y los ideológicos.¹

En el caso de la Universidad de La Habana la cifra de estudiantes en las diferentes modalidades de pregrado en los últimos años ha oscilado de 17 000 a 20 000, los cuales reciben una instrucción y formación curricular medioambiental, que ha ido perfeccionándose progresivamente a partir de la Cumbre de Río en 1992.

Además reciben formación y educación ambiental por vías extracurriculares y no formales a través de actividades de Extensión Universitaria y algunas otras promovidas por la Federación Estudiantil Universitaria (FEU).

En cuanto a la actividad de postgrado, se perfecciona la inclusión de la dimensión ambiental en todas las Maestrías y Especialidades de la Educación Superior Cubana.

El trabajo de extensión universitaria, uno de cuyos objetivos explícitos es la reafirmación de los valores ambientales en los estudiantes, ha incluido en los últimos cursos la participación en cientos de proyectos comunitarios. La mayor parte de estos fue realizada conjuntamente con organizaciones e instituciones provinciales y nacionales. Estas reconocen el impacto positivo de las universidades en el trabajo comunitario. Se trabaja con éxito en incrementar la efectividad en la ejecución de cada proyecto.

De manera general el Ministerio de Educación Superior ha alcanzado en los últimos años un por ciento considerable del total de premios que otorga la Academia de Ciencias de Cuba y de ellos se ha ido incrementando paulatinamente el de los que corresponden a Proyectos que trabajan en los aspectos que más comúnmente se relacionan con la dimensión ambiental natural y humana. A partir del año 2000 dicho Ministerio estableció un premio al “Resultado Aplicado que más haya contribuido a la Protección y Mejoramiento del Medio Ambiente”.

Sin embargo a pesar de los logros enunciados aún subsisten una serie de problemas comunes a casi todas las instituciones del Ministerio de Educación Superior. Entre algunos de los principales están:

1. Limitaciones en la formación de una cultura ambiental con enfoque integrador en los estudiantes, profesores y trabajadores en general.
2. Insuficiente dominio de la temática medio ambiental por parte del personal dirigente.
3. Limitada influencia en la formación en gestión ambiental de las personas de las comunidades ubicadas en las áreas de influencia de las Instituciones de Educación Superior.
4. Condiciones poco adecuadas del medio ambiente físico en la mayoría de las Instituciones de Educación Superior.

El reto entonces para la Educación Superior cubana está en como diseñar una Estrategia de Educación que permita formar profesionales con una cultura ambiental sólida que les posibilite comprender los problemas ambientales en su dimensión más general y holística. Al mismo tiempo esa estrategia debe permitir, de forma orgánica e integrada, interactuar con la comunidad, los gobiernos, las administraciones y el sector empresarial para trasladar esta cultura a todos los sectores de la sociedad y lograr un mayor acercamiento a la realidad del desarrollo sustentable.²

De este modo se podrá contar con un sistema integral para llevar a cabo este proceso de formación.

En el caso de la Universidad de La Habana la expresión de la voluntad política de atender

la creación de un pensamiento y una cultura ambiental en los estudiantes, profesores y trabajadores con un enfoque de sistema integral que trascienda los marcos de la actividad universitaria y que contribuya también a la sostenibilidad de nuestro desarrollo social y económico, fue la creación y reestructuración del Centro de Estudios de Medio Ambiente (CEMA).

El CEMA tuvo como misión “Ser un espacio de reflexión, intercambio, colaboración y debate interdisciplinario en temas ambientales que propicie el desarrollo de una cultura ambiental dentro y fuera del ámbito universitario, desempeñando un papel protagónico en coordinar y promover acciones en los campos de la educación ambiental y la investigación científica”. Sus rasgos principales fueron la interdisciplinariedad, la voluntariedad en la participación, la colaboración entre los centros, el consenso y la flexibilidad.

Estaba compuesto por un pequeño grupo de personas (6) que realizan las funciones de administración y organización y un colegio de dirección conformado por los representantes de la Facultades y Centros de Estudio (cuya composición incluye químicos, físicos biólogos, geógrafos, comunicadores sociales, psicólogos, filósofos, juristas, matemáticos, entre otros).

Su estructura orgánica, matricial, con una forma flexible, poco estructurada jerárquicamente, organizada en forma de proyectos, cuyo principal elemento de dirección es la coordinación de actividades y la cooperación entre sus miembros, le permitió coordinar y promover acciones en el campo de la docencia de pre y postgrado y la investigación científica que propiciaron el desarrollo de esta cultura ambiental con un enfoque holístico. Para ello se vinculó con otras instituciones dentro y fuera del país, relacionadas con la problemática ambiental, tanto para potenciar sus posibilidades como para identificar los problemas a abordar.

Aun cuando en la actualidad no existe como estructura institucional, las premisas sobre las que fue fundado han permitido a la Universidad de La Habana mantener el enfoque interdisciplinario e integrador en la

gestión de la Estrategia Ambiental del centro y la creación de una red de medio ambiente que conserva las mismas bases establecidas para el CEMA. La creación de una nueva forma de pensar, propiciada por el CEMA, para abordar de forma integrada el problema ambiental, exige nuevas formas organizativas no tradicionales que permitan:

- Cooperación orgánica entre los miembros del equipo.
- Suprimir barreras entre diferentes esferas científicas.
- Comunicación entre campos diferentes del conocimiento.³

Esto es esencial para abordar el problema ambiental como problema complejo.

Las BASES sobre las que se elaboró la estrategia fueron:

1. Enfatizar en el componente ético de los problemas ambientales y su solución.
2. Enseñanza de pregrado:
 - Papel central del estudiante como objeto y sujeto de todas las acciones que se realizan.
 - Utilizar el plan de estudios existente en cada carrera, sin crear nuevos planes. Solo introducir algunas asignaturas en los casos que se estimara conveniente. Abordar la problemática ambiental a través de la “ambientalización” de las asignaturas del currículo docente.
 - Diseñar actividades que tributen de forma coherente a la formación ambiental de los estudiantes y que abarquen todas las esferas de acción de los mismos, es decir actividades lectivas, trabajo de investigación y extensión universitaria, dentro de su especialidad.
 - Diseñar actividades de carácter multidisciplinario que les permitan una mejor comprensión de estos problemas y les evidencien la necesidad de la cooperación interdisciplinaria para solucionarlos.
3. Enseñanza de postgrado:
 - Papel central del objeto de estudio, que deberá ser abordado con un enfoque integrador.
 - Énfasis en la interdisciplinaria como eje central para la consolidación de los conocimientos impartidos en la enseñanza de pregrado y para acercarse de modo

efectivo a las soluciones reales de los problemas detectados.

Para ilustrar la materialización de esta estrategia se muestran algunos ejemplos de acciones concretas realizadas y resultados obtenidos.

ACCIONES GENERALES:

PREGRADO

- Incorporación de la dimensión ambiental a las Estrategias Educativas de cada Facultad, de modo que se disponga de un instrumento institucional y político para velar por el desarrollo de esta cultura ambiental en cada área.
 - Elaboración de la Estrategia Ambiental de cada Facultad, Centro de Investigaciones y otras áreas centrales de la Universidad para garantizar coherencia y complementariedad en las acciones docentes e investigativas que se diseñen para los estudiantes y profesores, así como garantizar que el trabajo de extensión universitaria que se realice tenga una componente ambiental explícita.
 - Existencia de un Programa de Extensión Universitaria adecuado a las concepciones más actuales de esta actividad, considerándola en su función totalizadora por estar presente en cada uno de los eslabones estructurales de la universidad.
 - Utilización del Proyecto de Educación de Valores llevado a cabo por el Centro de Estudios para el Perfeccionamiento de la Educación Superior para reforzar en los estudiantes y profesores la creación de actitudes y valores que contribuyan al enfoque de la problemática ambiental desde un punto de vista ético.
- Como parte de la investigación se han elaborado y aplicado estrategias educativas dirigidas a potenciar el desarrollo de valores en los estudiantes en diferentes niveles curriculares: asignatura,^{4,5} año académico⁶ y carrera.⁷
- Diseño e impartición de curso sobre Medio Ambiente a la Escuela Formadora de Trabajadores Sociales.
 - Creación de asignaturas optativas o electivas, tales como Sociología Medio Ambiental, Derecho Ambiental, Biodiversidad Cubana, Comunicación y

Medio Ambiente, etc. para ser ofrecidas a estudiantes de diferentes especialidades.

- Creación de la asignatura Seguridad Nacional, dentro de la cual se aborda el tema de Gestión de Riesgos
- Creación del Comité de Bioética en la Universidad como centro de reflexión y debate, donde el tema de Bioética y Medio Ambiente ha sido y continúa siendo un punto importante de análisis. Participan en estos debates estudiante y profesores así como profesionales de otras instituciones.

POSTGRADO

- Puesta en marcha de una Maestría en Manejo Integrado de Zonas Costeras con un marcado carácter interdisciplinario e integrador para abordar las investigaciones relacionadas con los problemas ambientales y de otro tipo asociados a estas zonas. Esto ha constituido una experiencia importante para profesores y estudiantes de postgrado.
- Diseño y puesta en marcha de una Maestría en Medio Ambiente y Desarrollo con el mismo enfoque enunciado en el caso anterior.
- Puesta en marcha de la Maestría en Población, Ambiente y Desarrollo Local.
- Diseño y puesta en marcha de la Maestría en Estudios del Caribe. (aborda temas de cambio climático y población y ambiente en el Caribe).
- Ejecución de una serie de Proyectos de participación comunitaria en distintas Facultades y Centros de Estudio en los cuales se han integrado estudiantes y profesores de diferentes especialidades y que respondan en buena medida a las líneas de investigación que sustentan las maestrías interdisciplinarias que se han diseñado.
- Diseño y ejecución de un Programa de capacitación en medio ambiente para los funcionarios y directivos del gobierno y la administración de la Ciudad de La Habana, que les permita mejorar su función y hacer más exitosa la gobernabilidad ambiental para un desarrollo sostenible. Este programa ha incluido una maestría y un diplomado en Administración Pública, un diplomado en Gestión de Gobierno y cursos y seminarios de temáticas diversas así como

un Taller para el perfeccionamiento de la Estrategia Ambiental de la provincia.

- Elaboración del material “Gestión Municipal y Estrategias Ambientales: necesidades y responsabilidades” para las comisiones permanentes de la Asamblea Provincial del Poder Popular.
- Participación en la Red de Formación Ambiental del Ministerio de Ciencia Tecnología y Medio Ambiente, donde la Universidad es la responsable de la capacitación por vías formales de los funcionarios tanto de este ministerio como del gobierno a nivel municipal y provincial en la Ciudad de La Habana.

OTRAS ACCIONES:

- Cursos para trabajadores de áreas administrativas de la UH y de Servicios Comunales de la Ciudad.
- Proyecto “Creemos en la Esperanza”. Involucró ocho escuelas de la cuenca de la Bahía de La Habana.
- Diseño de tres juegos didácticos para niños y adolescentes “Recuperar para tener”, “Mi amigo el Bosque” y “SOS Bahía”.
- Actividades en las residencias estudiantiles.
- Organización del Taller “Agua, Sequía y Desertificación”.
- Organización del Taller “Medio Ambiente y Ciencias Sociales”.
- Creación de Cátedras de Medio Ambiente en las Sedes Universitarias Municipales.
- Fortalecimiento de alianzas con organismos nacionales en especial con la Agencia de Medio Ambiente.
- Incremento de la participación en proyectos internacionales.

ALGUNAS ACCIONES PARTICULARES REALIZADAS EN LA FACULTAD DE QUIMICA DE LA UH QUE ILUSTRAN DIFERENTES ARISTAS DE LA ESTRATEGIA.

1. Introducción de la asignatura Química Ambiental en el último año de la carrera con el objetivo de profundizar en el papel de los químicos a favor de la protección y prevención de los problemas de contaminación ambiental que pueden ir asociados al desempeño profesional.

2. Introducción paulatina en las prácticas de laboratorio del tratamiento de los residuales generados. Estudio de alternativas para la sustitución de los reactivos más tóxicos y/o peligrosos, que incluye un análisis económico preliminar. Todo este trabajo es realizado por los propios estudiantes.
3. Establecimiento de una Sección de Química Ambiental dentro de la Jornada Científica Estudiantil que cada año se celebra, donde se han incluido Mesas Redondas con análisis muy críticos de como la carrera forma o no una cultura ambiental de la profesión.

La experiencia de la asignatura Química Ambiental ha dado resultados muy alentadores en la formación de los estudiantes, los cuales han podido, cada vez con más rigor, elaborar, presentar y debatir trabajos acerca de cómo enfrentar los retos del cambio climático en el Caribe, esencialmente en los pequeños estados insulares como Cuba. Estas ponencias se presentan en un seminario dedicado al Cambio Climático dentro del tema de Contaminación Atmosférica de la asignatura y en el curso 2012-2013 las dos parejas de estudiantes que abordaron estas temáticas fueron seleccionadas para presentar sus trabajos en un Taller Pre Congreso de la Cátedra de Estudios del Caribe celebrado en diciembre del 2012 en la Universidad de La Habana.⁸

CONCLUSIONES

El papel de las Universidades ante el reto del Desarrollo Sostenible, está en contribuir a formar hombres con una cultura y un actitud social en la que su enfoque de los problemas ambientales no se traduzca en acciones determinadas por presiones profesionales, laborales o coyunturales, sino donde el medio ambiente y el respeto hacia el mismo se haya constituido en un valor, en patrón de conducta, en un rasgo de su personalidad. Solo así podremos enfrentar los problemas del desarrollo.

Como lograr esta cultura estará determinado por el contexto económico, social y político en que cada Universidad se desenvuelva. Hemos tratado de mostrar algunas de las acciones emprendidas por la Universidad de La Habana, la que en su

compromiso con la sociedad favorece la formación de personal calificado, capaz de producir los nuevos conocimientos necesarios para fomentar un verdadero movimiento social ambientalista.

BIBLIOGRAFIA

- (1) Delgado, C. **2002**. "Hacia un nuevo saber". Cuba. Inédito.
- (2) Díaz, C., Mieres, A., Henriques R.D., Rodriguez, M., Rial, R., Gonzalez V. (2002) "Papel de la Universidad en la creación de una cultura ambiental para el Desarrollo Sostenible". Congreso Internacional del Medio Ambiente y Desarrollo Sustentable **2002**, Viña del Mar, Chile.
- (3) Henriques, R.D. **2002**. "Nuevo diseño de un Centro de Estudios Universitario". Memorias 3^a Convencion Internacional de Educación Superior, La Habana, Cuba.
- (4) Zumbado, H. **1999**. "Formación y desarrollo de intereses profesionales y de la responsabilidad del estudiante universitario a través de la asignatura Análisis de los Alimentos II. Tesis de Maestría. CEPES. Universidad de La Habana.
- (5) Iglesias, M. **2001** "Estrategia educativa para el desarrollo del interés profesional a través de la asignatura Etica Médica". Tesis de Maestría. CEPES. Universidad de La Habana.
- (6) González, V. y Ameneiros, J. **1999** "La orientación profesional como estrategia para el desarrollo del interés profesional y la responsabilidad del estudiante en su formación profesional". Informe de Investigación. CEPES. Universidad de La Habana.
- (7) González, V. (**2000**) "La Orientación Profesional en la Educación Superior". Monografía. CEPES. Universidad de La Habana.
- (8) Díaz C., Sánchez G., Valdés T., Rodríguez D., Hernández Y., (**2012**). "Experiencias recientes de la formación ambiental en la carrera de Lic. en Química de la Universidad de La Habana". Taller Pre evento "La Universidad y los retos ambientales: cambio climático y desastres naturales en el Gran Caribe". VI Conferencia Internacional "Cuba y el Caribe: 40 años de relaciones", La Habana, 5-7 diciembre 2012.

La Química Computacional como herramienta de la Química Experimental

José Manuel García de la Vega
garcia.delavega@uam.es

Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain

El Dr. José M. García de la Vega es Catedrático de la Universidad Autónoma de Madrid, España. Su especialidad es la Química Teórica. Ha sido profesor visitante de la Universidad de Edmonton en Canadá y desde 2010 es Profesor Invitado de la Universidad de La Habana. Es autor de más de 130 artículos científicos y de 5 libros.



Resumen

El objetivo principal de la Química Computacional es predecir e interpretar para un sistema químico sus propiedades moleculares, sus reacciones químicas y la relación de su estructura molecular con su reactividad. La Química Computacional supone una ayuda a la caracterización de nuevas moléculas y de sus propiedades. Desde un punto de vista práctico, la Química Computacional emplea una amplia gama de técnicas de cálculo que se encuentran en constante desarrollo y mejora, basadas en desarrollos metodológicos de la Química Teórica. La naturaleza del sistema molecular de interés y la del problema a estudiar condicionan la selección del método a utilizar. Algunos programas de cálculo de la Química Computacional pueden ser usados por cualquier químico, no sólo por especialistas, siendo suficiente que tengan conocimientos básicos de los fundamentos de los métodos teóricos, habilidades en el uso del software y hardware, y la intuición química para analizar los resultados. En resumen, la Química Computacional ayuda a la Química Experimental modelando moléculas y simulando procesos químicos a nivel molecular.

Introducción

La química trata del estudio de las sustancias: composición, estructura, propiedades y transformaciones. La Química Teórica (QT) tiene como objetivo explicar el

comportamiento de las sustancias que observamos a nivel macroscópico, a partir de las interacciones fundamentales que ocurren entre los electrones y los núcleos de una molécula. Utiliza la mecánica cuántica, la mecánica estadística y las matemáticas para determinar las propiedades estáticas y dinámicas de las moléculas aisladas o conjuntos relativamente pequeños de moléculas, así como para conectar estas propiedades de nivel microscópico con las propiedades que se observan a nivel macroscópico. La QT ha ayudado a descubrir nuevas estructuras y a determinar el camino para sintetizarlas. Inicialmente a la QT se le denominaba Química Cuántica, de la unión de las palabras química y mecánica cuántica, y así las primeras monografías recibían esta denominación.¹⁻⁴

La Química Computacional (QC) surge como una evolución de la QT con el objetivo de investigar el comportamiento de la materia a nivel molecular, empleando métodos matemáticos que han sido programados e implementados en ordenadores.⁵⁻⁷ La implementación y la aplicación de las técnicas de la QC nos permite investigar múltiples propiedades moleculares como son: la geometría molecular (forma y tamaños relativos de las moléculas), la energía de todo tipo de especies químicas (incluyendo intermedios, estados de transición, estados excitados, etc.) y las magnitudes termodinámicas (entalpías, energías internas, entropía, etc.) en fase gas, en disolución y en

fase condensada. La QC nos permite también, calcular propiedades espectroscópicas, eléctricas y magnéticas de moléculas individuales y predecir de modo rutinario los espectros IR, UV y RMN, siendo una herramienta indispensable para la correcta interpretación y asignación de los datos experimentales. La QC puede caracterizar la estructura de moléculas complejas y sus propiedades físicas en las fases condensadas.

Con el uso de la QC, podremos calcular magnitudes cinéticas como constantes de velocidad, secciones eficaces de reacción, factores de efecto túnel, etc. y a partir de esta información, podremos caracterizar los mecanismos de reacción y la reactividad química. Además, en la mayor parte de las aplicaciones se considera válida la aproximación de Born-Oppenheimer para la separación del movimiento electrónico y nuclear.² De esta manera, los métodos de la QC se utilizan también para explorar las superficies de energía potencial (energía electrónica y energía de repulsión internuclear) en función de la geometría molecular.

Métodos de la Química Computacional

Debido a la gran variedad de métodos existentes y a la diversidad de sus aplicaciones, no es fácil establecer una clasificación sistemática de los métodos de la QC. Actualmente, existe una gran cantidad de métodos y de su software correspondiente que se manifiesta en el número elevado de acrónimos incluidos en cualquier libro o publicación dedicado a la QC. Sin embargo, para poder avanzar en el conocimiento y aplicación de la QC es conveniente partir de una primera clasificación de los métodos teóricos que se resume en la Tabla 1. En ella, se incluyen los cuatro tipos de métodos de menor a mayor complejidad: Mecánica Molecular (MM), semiempíricos, la teoría del funcional de la densidad (DFT, acrónimo en inglés) y ab initio (palabra latina que significa desde lo básico).

a) Métodos de la Mecánica Molecular

Estos métodos estiman el cambio en la energía potencial de un sistema molecular como consecuencia de pequeñas variaciones en las distancias y ángulos de enlace y sobre

todo, de los cambios conformacionales originados por las interacciones intramoleculares.⁸ En la práctica se requiere implementar potenciales de interacción que contengan parámetros optimizados a partir de información experimental o teórica. La gran ventaja de estos métodos es la rapidez de los cálculos, lo que permite modelar sistemas hasta con cientos de miles de átomos. Los métodos MM también permiten simular el comportamiento dinámico y las propiedades termodinámicas de las fases condensadas, aplicando condiciones periódicas. Sus principales limitaciones son que no proporcionan ninguna propiedad electrónica y su ámbito de aplicación viene predeterminado por los potenciales y parámetros empleados. Algunas de las limitaciones de los métodos MM pueden ser superadas empleando potenciales más sofisticados, que incluyan términos que describan la polarización electrónica, la transferencia de carga y la formación y/o rotura de enlaces químicos. La inclusión de estos términos permite simular moléculas con distintos tipos de enlace químico y en un amplio intervalo de condiciones. Además, como se comentará más adelante, este tipo de métodos pueden combinarse con otros métodos más sofisticados, permitiendo obtener una información estructural y aproximada de la molécula y tratar según la mecánica cuántica una parte de ella.

b) Métodos Semiempíricos

Los métodos semiempíricos son métodos químico cuánticos, es decir, obtienen la energía y orbitales moleculares, pero lo hacen simplificando los cálculos más sofisticados como los de tipo Hartree-Fock (HF) o DFT, y reemplazando integrales de las expresiones de los cálculos por formas paramétricas ajustadas estadísticamente empleando grandes conjuntos de datos experimentales (geometrías moleculares, calores de formación, etc.).⁵ El objetivo de usar estas drásticas aproximaciones es reducir los tiempos de cálculo. Los métodos semiempíricos comenzaron con la aproximación π -electrónica de Hückel hasta los desarrollos más modernos están basados en distintas aproximaciones de las integrales (CNDO, INDO y NDDO), usadas en los

Tabla 1: Resumen de los cuatro principales grupos de métodos de la Química Computacional

Métodos	Características	Ventajas	Desventajas	Aplicaciones
Mecánica Molecular	Mecánica clásica. Potenciales de interacción.	Cálculo inmediato. Información de la geometría de moléculas muy grandes.	Aplicación limitada por el potencial. No aplicable a procesos con rotura o formación de enlaces.	Sistemas muy grandes (hasta 100.000 átomos). Geometrías moleculares.
Semiempíricos	Mecánica cuántica. Aproximaciones con parámetros empíricos.	Gran rapidez de cálculo. Capaces de calcular estados de transición y estados excitados.	Requiere información experimental para los parámetros. No son fiables para moléculas con metales de transición y especies inestables.	Sistemas de tamaño medio-grande (hasta 10.000 átomos). Algunas propiedades moleculares.
Teoría del Funcional de la Densidad	Mecánica cuántica. Teorema de Kohn y Sham. Densidad electrónica.	Rapidez de cálculo. Usos específicos para estado sólido.	Exceso de métodos. No hay pautas de mejora sistemática.	Sistemas de tamaño medio (hasta 1.000 átomos). Todo tipo de propiedades moleculares.
Ab Initio	Mecánica cuántica. Ecuación de Schrödinger. Función de onda.	Exactitud y precisión. Mejora sistemática de los resultados.	Lentitud de cálculo. Los métodos avanzados son de uso complicado.	Sistemas pequeños (hasta 100 átomos). Todo tipo de propiedades moleculares.

cálculos.⁷ Los métodos semiempíricos son casi tan rápidos como los cálculos MM y es posible realizar este tipo de cálculos en sistemas de miles de átomos. La fiabilidad de este tipo de métodos es pequeña para algunos tipos o familias de moléculas (por ejemplo, moléculas con metales de transición) y en propiedades moleculares que no se han tenido en cuenta en la parametrización. Por lo tanto, el uso satisfactorio de estas técnicas está condicionado a la experiencia computacional previa y su validación frente a métodos más exactos. Los métodos semiempíricos más modernos (AM1, PM3 y PM6) permiten predecir geometrías y propiedades moleculares de compuestos orgánicos con un bajo coste computacional.

c) Métodos de la Teoría del Funcional de la Densidad

Hoy día los métodos más populares en la QC son los métodos DFT que formulan el problema de la estructura electrónica molecular en términos de una magnitud observable, la densidad electrónica, en vez de hacerlo en la función de onda multielectrónica.^{9,10} Desde un punto de vista matemático, la energía electrónica del sistema pasa a ser un funcional de la densidad. La implementación de los métodos DFT conduce a las ecuaciones de Kohn-Sham (KS), muy semejantes a las ecuaciones HF porque la

densidad electrónica se expresa a partir de orbitales moleculares. En la práctica, un cálculo KS-DFT es muy parecido a un cálculo HF basado en los orbitales moleculares. Existe un número amplísimo de métodos DFT, muchos de ellos disponibles en los programas de cálculo más conocidos.⁶⁻¹⁰ Esta sobreabundancia de métodos DFT se debe al hecho de que el funcional de la densidad incluye un componente denominado funcional de intercambio-correlación, cuya forma analítica es desconocida. Por eso, existen tantos funcionales DFT como aproximaciones a la energía de intercambio-correlación han sido propuestas. Cabe destacar que muchos métodos DFT son en cierto modo semiempíricos, pues los correspondientes funcionales de intercambio-correlación contienen uno o varios parámetros ajustados a datos experimentales. La ventaja de los métodos DFT es que si el funcional de intercambio-correlación, se comporta bien para el problema a estudiar, entonces son métodos eficientes y fiables, mucho más rápidos que los métodos más sofisticados de tipo ab initio. Por este motivo, los métodos DFT se han convertido en la opción más popular para simular todo tipo de sistemas moleculares. No obstante, las desventajas de los métodos DFT deben tenerse presentes a la hora de utilizarlos: i) la dificultad en

seleccionar el funcional más adecuado; ii) la imposibilidad de refinar sistemáticamente los resultados como sí que es posible con los métodos *ab initio*; y iii) la presencia de errores sistemáticos de muchos funcionales. En la práctica, tanto la experiencia computacional acumulada como la validación frente a resultados experimentales o *ab initio* son necesarias para escoger el funcional DFT más adecuado. El funcional de tipo híbrido B3LYP es el más usado en química, porque permite obtener geometrías, propiedades espectroscópicas y energías termoquímicas razonablemente precisas para compuestos orgánicos. Existe una gran variedad de acrónimos para nombrar los distintos funcionales disponibles (PBE, M06, PW91, PBE, LYP, etc.), que a su vez se subclasifican en varios tipos (LDA, GGA, meta-GGA, híbridos, etc.).⁹ La tendencia actual es incluir términos de dispersión en los cálculos DFT.

b) Métodos *Ab Initio*

Estos métodos resuelven de modo aproximado la ecuación de Schrödinger para obtener la energía y la función de onda electrónicas del sistema de interés.^{6,7} Se denominan *ab initio* porque no emplean otra información que no sea la de las constantes físicas fundamentales. Conceptualmente, los métodos *ab initio* parten del método variacional HF basado en el uso de orbitales moleculares. Es posible formular familias de métodos *ab initio*, como las de tipo perturbativo Moller-Plesset (MP), o de métodos más avanzados de tipo: Coupled-Cluster (CC) e Interacción de Configuraciones (CI, acrónimo en inglés), que están organizadas jerárquicamente en términos de su capacidad para describir la correlación electrónica (HF→MP2→...→MP4(SDQ)→... CCSD→CCSD(T) ...→Full-CI) de modo que, en principio, es posible predecir cualquier propiedad molecular con una exactitud controlable. En la práctica, no sólo la implementación, sino también la aplicación de los métodos *ab initio* más exactos puede ser muy complicada, así como requerir hardware de altas prestaciones y una gran cantidad de tiempo de cálculo. Los métodos *ab initio* con una mejor relación calidad coste, CCSD(T), van adquiriendo un mayor protagonismo

gracias a la creciente potencia de los ordenadores y a las constantes innovaciones en el campo del software.

La gran variedad metodológica de la QC es un inconveniente, porque es necesario conocer bien los fundamentos de muchos métodos para seleccionar en cada caso el método adecuado e interpretar correctamente los resultados y ello dificulta su aplicación. Por otra parte, se han escrito excelentes monografías prácticas sobre este tipo de métodos que, sin llegar a entrar en los detalles técnicos explican claramente los fundamentos y las pautas que se deben emplear en su aplicación a un sistema determinado.^{11,12} Al mismo tiempo, la disponibilidad de muchos métodos es un punto fuerte de la QC, ya que permite a los usuarios con conocimientos más avanzados aprovechar la información de distintas técnicas aplicadas a un mismo problema. Generalmente, un estudio de modelización molecular para un problema concreto puede implicar la aplicación de varios métodos. Además, es posible formular métodos híbridos, denominados, QM/MM, que se caracterizan por la partición de un sistema químico en dos regiones: i) una región QM (Quantum Mechanics) que corresponde a la parte relevante o activa del sistema y que se trata específicamente mediante un método basado en la mecánica cuántica (*ab initio* o DFT) y ii) una región MM que incluye el resto del sistema y que se describe mediante un método de mecánica molecular.⁷ El cálculo QM/MM se define por los métodos QM y MM empleados y por la forma de tratar la interfase entre las regiones QM y MM.

Aplicación de la Química Computacional

En la Figura 1, se resume la interrelación entre recursos hardware y software que son necesarios para un uso eficiente de la QC. Por un lado, se emplean programas de edición y visualización molecular, ya sea como aplicaciones locales instaladas en los ordenadores personales (PCs) o portátiles (laptops) del usuario o investigador. Los programas de cálculo y simulación necesitan grandes recursos computacionales por lo que es muy importante que se ejecuten en ordenadores optimizados para cálculo científico (*clusters*) o en centros de computación. Los usuarios de la QC no deben

preocuparse de la gestión de dichos programas, tan sólo de la realización de sus trabajos y de la transferencia de datos, siendo por tanto imprescindible el apoyo prestado por técnicos de sistemas para el aprovechamiento de los recursos computacionales de uso compartido. Los resultados teóricos obtenidos se contrastan con los obtenidos en el laboratorio. Y por último, se puede correlacionar los resultados obtenidos en el laboratorio con los calculados, realizando simulaciones de las medidas del laboratorio y preparando nuevos cálculos para reproducir propiedades de las experiencias. En muchas ocasiones el trabajo conjunto de grupos de investigación teóricos y experimentales, permite obtener excelentes resultados cuando se combinan ambos aspectos y se consiguen aunar esfuerzos conjuntos.¹³

Una secuencia típica para el estudio de modelos moleculares consistiría en seleccionar un método para el modelo planteado y comenzar su estudio empleando alguno de los programas de visualización molecular con los que se construye y analiza la geometría de todo tipo de sistemas químicos. En muchos casos, estos programas ofrecen modelos previos que ayudan a la modelización molecular y suelen incorporar otras funciones como son la realización de cálculos inmediatos a nivel MM, la visualización de orbitales moleculares, la animación de modos normales de vibración y la simulación de espectros basados en cálculos ab initio o DFT, etc. Partiendo de la geometría del modelo inicial, los programas de cálculo se encargan de minimizar su energía (optimizando su geometría molecular) y de calcular las propiedades moleculares requeridas (energías libres, energías de solvatación, propiedades electrostáticas y espectroscópicas, etc.). Habitualmente, el investigador emplea varios métodos por lo que es bastante normal utilizar más de un programa de cálculo, ya que la implementación de algunas técnicas es más eficiente en unos programas que en otros.

Existen muchos programas de edición molecular. Algunos son comerciales y otros están desarrollados por entidades sin ánimo de lucro. En algunos casos específicos, los programas son muy complicados de usar y

están totalmente orientados a un tipo de sistemas químicos determinado (macromoléculas, materiales cristalinos, proteínas, etc.) y en algunos casos son muy dependientes del sistema operativo en el que se trabaja. En la actualidad, existe un amplio catálogo de programas de cálculo en QC que ofrecen todo tipo de métodos (MM, semiempíricos, DFT y ab initio). Entre todos ellos destacan varios paquetes comerciales y otros libres, algunos de gran sencillez y con un amplio abanico de métodos y técnicas (ADF, AMBER, CHARMM, GROMACS, GAMESS, GAUSSIAN, MOLPRO, NWChem. ORCA, Q-Chem, Spartan, Turbomole, VASp, WIEN2K, etc.). y que en muchos casos llevan asociados algún programa de edición y visualización (Avogadro, Chem Office, Gauss View, Molekel, Molden, Pymol, Tmolex, VMD, etc.). Otros programas están diseñados específicamente para estado sólido para biomoléculas, etc. o, exclusivamente, para un tipo de métodos (como los de mecánica molecular). Sin embargo, otros programas son muy complicados y necesitan conocimientos profundos del método implementado y del tipo de software. Por último, hay que señalar que los cálculos en QC generan una gran cantidad de datos, especialmente cuando muchas investigaciones se realizan para estudiar amplias familias de moléculas o sistemas con miles de átomos. Por esta razón, el usuario debe ser capaz de agilizar el tratamiento y el análisis de los datos.

Perspectivas futuras de la Química Computacional

Con el desarrollo de la química teórica en el siglo XX y de la tecnología computacional, hoy es posible diseñar moléculas casi de la misma manera como un ingeniero diseña un puente o un automóvil. La metodología avanza en la dirección de lograr más precisión, de tratar sistemas más grandes y de lograr más rapidez. Se establece una correlación entre los avances metodológicos e informáticos. Estos avances se encaminan más al uso de varios procesadores (sea en un mismo ordenador o en un clúster de ordenadores) que al aumento de velocidad de cada procesador. Esto impone la creación de nuevos métodos y algoritmos que sean fáciles de paralelizar y la adaptación a los

programas para poder utilizar la gran potencia de cálculo emergente. Además, la QC se va convirtiendo en una herramienta útil que permite crear y comprobar en los ordenadores dispositivos moleculares innovadores. Actualmente, en todos los centros de investigación se utilizan paquetes computacionales que permiten realizar cálculos de estructura electrónica. Los resultados de estos cálculos sirven, junto con la información experimental, para alcanzar una mejor comprensión de los problemas fenomenológicos de la química.

En la QC se ha ido pasando de tratar sistemas pequeños en fase gas a grandes sistemas en fase condensada. Sin embargo, sigue siendo necesario estudiar sistemas de interés químico con dos o tres átomos e investigar la evolución de su disociación y su dinámica reactiva con métodos muy sofisticados.¹⁴ El objetivo final es modelar cada vez mejor la química real. Para ello se requieren cálculos dinámicos para estudiar la evolución de los sistemas en tiempos compatibles con los implicados en las medidas experimentales. Los estudios computacionales de sistemas complejos son la nueva frontera de la química teórica. Si la simbiosis entre químicos teóricos y experimentales es siempre deseable, en el estudio de sistemas complejos es totalmente imprescindible.¹³

Los métodos de la QC tienen ya un papel muy destacado en la investigación en nanotecnología, en el estudio de la adsorción sobre superficies, en catálisis homogénea y heterogénea, en bioquímica, etc. El profundo conocimiento, a nivel molecular, adquirido por los químicos teóricos, les permite plantearse el problema inverso: diseñar moléculas y materiales que posean una determinada propiedad química o física y proponer su síntesis a partir de sus propiedades. Sin embargo, la historia de la química demuestra que se puedan encontrar nuevas ideas y líneas de investigación que nos permitan abordar el problema de la estructura electrónica de sistemas complejos por nuevos métodos.

Epílogo

En las épocas anteriores al desarrollo de la mecánica cuántica, la química tuvo que elaborar modelos que pudieran explicar la

estructura de las moléculas. Modelos que, en muchos casos, estaban alejados de las leyes fundamentales de la física. Sorprendentemente, los químicos desarrollaron estos modelos con una extraordinaria visión para poderse explicar las observaciones del comportamiento de la materia y sus cambios aun sin el sustento de las leyes fundamentales y adelantándose a muchos conceptos que años más tarde la física avalaría. Hoy día, admiramos la gran capacidad deductiva de los científicos de los siglos XVIII y XIX como Avogadro, Berzelius, Dalton, Faraday, Kekulé, Lavoisier, Lewis, Proust, Vant Hoff, etc, quienes desprovistos de las técnicas modernas para investigar el mundo microscópico, sentaron las bases de molécula y de enlace químico lo que supuso el desarrollo de la investigación química del siglo XX.

La química cuántica nace en 1927, cuando Fritz London y Walter Heitler aplicaron la ecuación de Schrödinger, formulada el año anterior, para explicar a nivel microscópico la estabilidad de la molécula más sencilla que puede existir, la molécula de hidrógeno. Con este trabajo comienza la aplicación de los postulados y métodos de la mecánica cuántica para estudiar y predecir las propiedades de las moléculas, tanto aisladas como cuando participan en una reacción química. La molécula de hidrógeno, está formada por cuatro partículas: dos núcleos y dos electrones, donde suponemos que los núcleos son puntuales. Increíblemente, este sistema tan “sencillo” no puede resolverse de manera exacta en la mecánica cuántica. Los químicos teóricos no podían esperar a que la mecánica cuántica tuviera los métodos necesarios y tenían dos opciones, esperar a tener una descripción rigurosa o generar modelos propios capaces de explicar los comportamientos químicos observados.

Hay que resaltar que en los últimos años se han concedido dos premios Nobel de Química, dedicados a la Química Computacional: en 1998, a Walter Kohn y John Pople por el desarrollo y la aplicación de métodos informáticos a cálculos mecánico cuánticos y en 2013, a Martin Karplus, Michael Levitt y Arieh Warshel por el desarrollo de modelos multiescala para sistemas químicos complejos.

En este último premio Nobel, la Academia argumentó la concesión a los tres científicos estadounidenses "porque sentaron las bases para los poderosos programas que son usados para entender y predecir los procesos químicos" y puntualizó: "Los modelos computarizados que reflejan la vida real se han convertido en cruciales para la mayoría de los avances en la química hoy". Estas afirmaciones nos da una idea del futuro de la QC y dan validez a las palabras que escribió Paul A. M. Dirac en 1929: *Deberían desarrollarse métodos prácticos aproximados de la aplicación de la mecánica cuántica, que puedan guiar a una explicación de las características principales de sistemas atómicos complejos sin demasiados cálculos.*

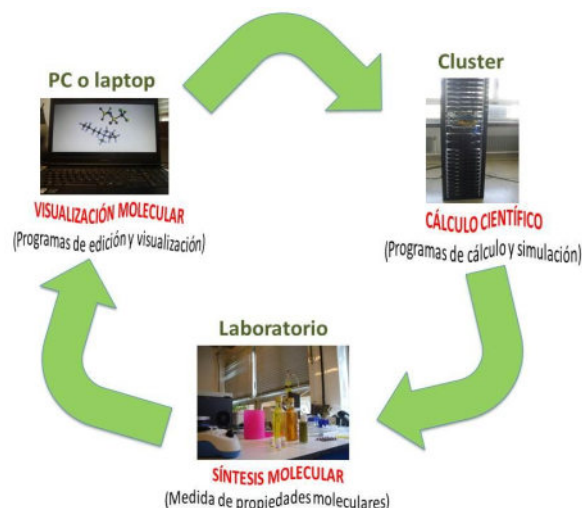


Figura 1. Esquema de trabajo de la Química Computacional

Referencias

1. A. Szabo and N.S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, Dover Publications, New edition, **1996**.
2. I.N. Levine, *Quantum Chemistry*, Prentice Hall; 5ª ed., 1999.
3. J.P. Lowe, *Quantum Chemistry*, Academic Press; 2nd ed., **1993**.
4. F.L. Pilar, *Elementary Quantum Chemistry*, Dover Publications; 2nd Reprint ed., **2011**.
5. E. Lewars, *Computational chemistry. Introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics*, 2nd ed., Springer, 2011.
6. F. Jensen, *Introduction to computational chemistry*. 2nd. ed., John Wiley & Sons Ltd., **2007**.
7. C.J. Cramer, *Essentials of computational chemistry. Theories and models*, John Wiley & Sons Ltd., **2004**.
8. A.R. Leach, *Molecular modelling. Principles and applications*, Pearson Education Ltd., **2001**.
9. R.G. Parr, W. Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, **1994**.
10. W. Koch, M. C. Holthausen, *A chemist's guide to density functional theory*, 2nd ed., Wiley-VCH Verlag GmbH., **2001**
11. D. Young, *Computational Chemistry A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems*, John Wiley & Sons. **2001**.
12. A. Gelessus, J.O. Joswig, T. Heine, *Computational Chemistry Workbook Learning Through Examples* Pap/Cdr, Workbook Edition, John Wiley & Sons, **2009**.
13. A. Ruiz, C. Morera-Boado, L. Almagro, J. Coro, E.E. Maroto, M.A. Herranz, S. Filippone, D. Molero, R. Martinez-Alvarez, J.M. Garcia de la Vega, M. Suarez, and N. Martín, *Dumbbell-type Fullerene-Steroid Hybrids: A Join Experimental and Theoretical Investigation for Conformational, Configurational and Circular Dichroism Assignments*, *J. Org. Chem.*, **2014**, 79, 3473-3486,.
14. O.B.M. Teixeira, V.C. Mota, J.M. Garcia de la Vega, A.J.C. Varandas, *Single-sheeted double many-body expansion potential energy surface for ground-state ClO₂*, *J. Phys. Chem. A*, **2014**, 118, 4851-4862.

El papel de la Química Cuántica en la Química

Pedro J. Ortiz del Toro

pedro@fq.uh.cu

Departamento de Química Física. Facultad de Química. Universidad de La Habana

Graduado de Licenciatura en Química en la Universidad de La Habana. Obtuvo la Maestría en Ciencias en 1973 y el Doctorado en 1981. Es Profesor Titular del Departamento de Química-Física de la Universidad de La Habana, donde imparte las asignaturas de química cuántica, termodinámica estadística y espectroscopia molecular. Comparte el crédito de la introducción y desarrollo de esas asignaturas en la Facultad de Química-UH. Realiza investigaciones sobre la estructura y dinámica de moléculas y macromoléculas utilizando métodos espectroscópicos y teóricos.



Primero que todo, dos ideas generales. La primera es que el propio desarrollo científico hace cada vez más difusas las fronteras de separación entre las diferentes disciplinas. La segunda, que el progreso científico es el resultado de la mutuamente provechosa interacción entre la teoría y los experimentos. La teoría se utiliza para interpretar hechos experimentales, y normalmente sugiere nuevos experimentos; mientras que por su parte, los experimentos son la vía para comprobar las predicciones teóricas, y usualmente conducen a una optimización de la teoría.

En este contexto, la Química tiene asignada una difícil tarea: estudiar las propiedades de las sustancias y las reacciones químicas que las transforman en otras, lo cual se acomete con mayor éxito cuando se auxilia del conocimiento de la estructura de las moléculas que componen dichas sustancias. En particular, el conocimiento de la estructura electrónica de átomos y moléculas resulta esencial para la correcta descripción de las propiedades físicas y químicas.

Moléculas, átomos, electrones y los procesos en que intervienen, pertenecen al micromundo, y de ello se encarga la mecánica cuántica, por lo que, en el contexto de las limitaciones de cualquier definición, es muy acertado decir que la química cuántica es la aplicación de la mecánica cuántica a la Química, siendo una parte esencial de su estructura teórica.

Entre los aspectos fundamentales de esta teoría es posible destacar que la predicción del comportamiento microscópico se realiza en términos de ideas cuánticas, tales como: la

cuantización de las magnitudes físicas, el comportamiento onda-corpúsculo y la incertidumbre en la evaluación simultánea de ciertas variables dinámicas.

Las nociones de orbital atómico y orbital molecular y sus expresiones algebraicas, que son esenciales en la predicción de las propiedades de átomos y moléculas respectivamente, se obtienen mediante tratamientos cuánticos. Esta información constituye la base conceptual y brinda los procedimientos de trabajo necesarios para la interpretación del enlace químico, tema central de la Química.

Una vertiente muy importante de la química cuántica lo constituye el desarrollo de métodos teóricos de cálculo de propiedades físicas y químicas, que conforman la química cuántica computacional. La química cuántica computacional se ha favorecido con el desarrollo y eficiencia de las computadoras y de los programas de cálculo, y su consolidación se reconoce con el otorgamiento de los premios Nobel de Química correspondientes a los años 1998 (Pople, Kohn) y 2013 (Karplus, Levitt, Warshel) así como por la utilización en la literatura científica especializada de estos métodos de trabajo, no solo con un perfil netamente teórico, sino también en casi todas las áreas de investigación científica.

Los métodos de la química cuántica computacional se encuentran entre los más útiles en la investigación científica moderna, y son especialmente importantes cuando se requiere información sobre la estructura de átomos y moléculas, así como sobre la

reactividad química de estos. Por una parte, juegan un rol significativo en la interpretación de los resultados experimentales, de forma tal que, cuando coinciden la teoría y el experimento, se puede confiar en que la interpretación es correcta. Por otra parte, en ausencia de información experimental, brindan predicciones teóricas que pueden facilitar el curso de una investigación posterior.

A un profesional especializado en cualquier disciplina científica donde se utilicen sustancias químicas (es difícil encontrar excepciones), le resulta útil adquirir una formación básica en los conceptos y métodos cuánticos, de tal forma que pueda aplicarlos en su área de interés particular. El carácter unificador de aspectos aparentemente dispersos o independientes es una cualidad muy útil de las ideas cuánticas.

Un área fundamental, donde la química cuántica es particularmente importante, lo constituye la enseñanza de la Química. Gracias al desarrollo de conceptos teóricos unificadores, la exposición de la Química a los estudiantes es cada vez más directa y lógica de lo que fue posible anteriormente. Es común la impartición de más de un curso de química cuántica en los programas de las carreras de licenciatura en Química de muchas universidades, y algo muy importante, los textos modernos de las diferentes áreas de la Química incluyen capítulos dedicados a las ideas y los métodos cuánticos.

La Metrología Química y su Importancia

Manuel Álvarez Prieto
malvarez@imre.oc.uh.cu
Facultad de Química
Universidad de La Habana

Graduado de la Universidad de La Habana en 1977. Máster en Química Analítica y Doctor en Ciencias Químicas. Profesor e Investigador Titular. Especialista en Metrología Química y calidad de laboratorios de ensayos. Espectroscopista atómico analítico.



La Metrología Química es la ciencia de las mediciones de las magnitudes químicas y sus aplicaciones. Las magnitudes químicas son aquellas que expresan la propiedad de los materiales consistente en la cantidad de una especie química por unidad de masa, volumen, área o cantidad total de especies químicas de un sistema. Esa propiedad se designa genéricamente con la palabra concentración. Sin embargo, esa denominación incluye algo más de una decena de magnitudes diferentes que en determinados contextos deben especificarse para evitar ambigüedades. Ejemplos de esas magnitudes son la concentración de masa, la fracción de masa, la concentración de cantidad de sustancia, la fracción de volumen y la fracción de moles. La Química Analítica tiene como objeto medir esas magnitudes. La Metrología Química, que trata sobre los principios de esas mediciones, se ha establecido como campo del conocimiento científico en las últimas décadas.

El químico analítico tiene a su disposición innumerables técnicas, métodos, procedimientos, instrumentos y herramientas para realizar la medición de las magnitudes químicas. Sin embargo, las mediciones no son perfectas. Durante la ejecución de las mediciones se manifiestan errores (no entendido aquí como disparates o equivocaciones), que de forma natural se manifiestan durante la aplicación de los procedimientos de medición. Ellos provocan que los resultados tampoco sean perfectos. Los resultados constituyen estimados de la magnitud que se mide. No obstante, mediante la aplicación de determinadas prácticas y técnicas, los errores pueden mantenerse dentro de límites aceptables. De eso se encarga la Metrología Química, que a su vez nutre la Química Analítica.

Muchas de las ramas de las actividades económicas y sociales necesitan de las mediciones

de las magnitudes químicas. Estas se realizan en materias primas, productos intermedios y finales de la industria, en los estudios ambientales, en las actividades de la salud pública, en la agricultura, en las investigaciones y producciones biotecnológicas, en el manejo de los recursos hídricos y en muchos otros campos. Es difícil encontrar una actividad en la sociedad moderna, que directa o indirectamente no utilice los resultados de la Química Analítica y por tanto de la Metrología Química. Cuando un paciente concurre al médico y este lo remite al laboratorio clínico para determinar su concentración de colesterol en sangre, es necesaria la Metrología Química. Cuando un laboratorio de aguas determina la concentración de cadmio en agua potable para decidir si es apropiada para el consumo, es necesaria la Metrología Química. Cuando un laboratorio determina la composición de un mineral para fijar su precio de venta, también es necesaria la Metrología Química. Existen innumerables ejemplos.

Los resultados de las mediciones que se obtienen se utilizan para tomar decisiones, que a su vez son diversas por su naturaleza. A menudo es necesario determinar la concentración de una especie química en un producto para determinar si cumple con cierta especificación. Por ejemplo, existe una especificación sobre la concentración mínima de grasa que debe poseer la mantequilla destinada al consumo. La determinación de ese contenido en un lote de producción por parte de las autoridades supervisoras constituye un medio de protección al consumidor. Ese tipo de decisión, establecer si se cumple con una especificación, es muy común. Los requisitos que deben tener los resultados analíticos para que la decisión sea correcta con una alta probabilidad, es un asunto del cual se encarga la Metrología Química. Esos requisitos están relacionados con la exactitud, la

precisión con la cual se obtienen los resultados, la incertidumbre de la medición que posean y algunos otros.

Cuando es necesario decidir el precio de un material, la decisión es de otra naturaleza. Un mineral, cuya composición química sea determinante para obtener un producto final, debe ser analizado químicamente para tal fin. Los resultados que deben utilizarse deben tener características específicas en cuanto a exactitud, precisión y otras. La decisión en cuanto al precio fijado debe garantizar que tanto el vendedor como el comprador no incurran en riesgos diferentes de los pactados. De ese asunto se encarga la Metrología Química.

Existen varios principios que rigen las actividades prácticas del análisis químico. Ante todo, las mediciones analíticas deben realizarse para satisfacer requisitos acordados, para satisfacer un objetivo definido. Esas mediciones deben realizarse mediante métodos, procedimientos y medios que hayan sido comprobados para asegurar que son adecuados para su uso. A su vez, el personal que realiza las mediciones analíticas debe estar calificado, ser competente y demostrar que puede llevar a cabo las tareas necesarias de forma apropiada. También deben realizarse valoraciones periódicas e independientes sobre el desempeño técnico del laboratorio. Las mediciones que se realicen en un laboratorio deben ser equivalentes a las realizadas en cualquier otro laboratorio. Por último, los laboratorios que realizan mediciones analíticas debe tener procedimientos de control y aseguramiento de la calidad bien definidos, y sus actividades deben basarse en los principios de gestión de la calidad. Muchas de esas actividades están regidas por los principios de la Metrología Química.

De cualquier forma, la utilidad que tengan los resultados para tomar decisiones determinará la calidad que poseen. Y la calidad es un concepto constantemente utilizado por todos en nuestra vida diaria. Con el objetivo de asegurar la calidad de los resultados de análisis químico, en la actualidad se han establecido un conjunto de principios dirigidos a organizar la actividad de los laboratorios de ensayos. Esos principios se recogen de una manera organizada en una norma internacional, denominada ISO/IEC 17025. Su última edición en español tuvo lugar en el año 2005. En Cuba fue adoptada como norma nacional hace varios años. En ella se establecen un conjunto de principios técnicos y de gestión, cuya aplicación exitosa permite a los laboratorios asegurar que emiten resultados confiables. Ello les permite adquirir un reconocimiento internacional de su competencia

técnica a través de un proceso de acreditación ante un órgano de acreditación. Cuba dispone de un órgano de acreditación nacional reconocido, que se encarga de organizar y desarrollar los procesos de acreditación de los laboratorios de nuestro país. El Órgano de Acreditación de Acreditación de la República de Cuba (ONARC) es firmante de los Acuerdos de Reconocimiento Multilateral (ARM) y miembro pleno del organismo mundial que organiza todo lo concerniente a la acreditación de los laboratorios. La principal ventaja derivada de esa membresía del ONARC y de ser firmante de los ARM estriba en que las acreditaciones otorgadas en nuestro país tienen reconocimiento mundial. Ese hecho proporciona ventajas en el comercio internacional. Los resultados de un laboratorio nacional acreditado ante el ONARC son reconocidos como confiables por las entidades nacionales y extranjeras interesadas en ellos.

Algunos laboratorios nacionales de ensayos de análisis químicos están incorporados al movimiento mundial dirigido hacia la acreditación de laboratorios. En la actualidad nuestro país dispone de varios laboratorios con ensayos de análisis químico que ostentan la condición de acreditados, y en los cuales se aplican los principios de la Metrología Química. En las últimas décadas ha habido grandes avances en la Metrología Química, en las técnicas de aseguramiento y control de la calidad, así como en la organización de los laboratorios. A esos avances han contribuido tanto los científicos como los practicantes.

La formación de doctores: el doctorado en Química

Jorge Núñez Jover

jorgenjover@rect.uh.cu

Director de Postgrado de la Universidad de La Habana

Julieta Coro Bermello

julieta@fq.uh.cu

Facultad de Química Universidad de La Habana

Jorge Núñez Jover, es Licenciado en Química, Doctor en Ciencias Filosóficas. Profesor Titular de la Facultad de Filosofía e Historia. Director de postgrado de la Universidad de La Habana. Vicepresidente de la Sociedad Cubana de Historia de la Ciencia y la Tecnología.

Julieta Coro Bermello es Profesora Titular de la Facultad de Química de la Universidad de La Habana y Doctora en Ciencias Químicas. Es coordinadora del programa de Doctorado en Química de la Universidad de La Habana.



Introducción

Recientemente el programa de doctorado que desarrolla la Facultad de Química de la UH fue acreditado con la calificación de excelente por la Junta Nacional de Acreditación. Este resultado se basa, sobre todo, en la trayectoria de los últimos 10 años. El Doctorado en Ciencias Químicas es el primer programa de ese nivel acreditado en la UH.

¿Pero cómo se llegó hasta aquí? El doctorado que hoy tenemos en Cuba es el resultado de una dilatada y compleja trayectoria académica. Sin embargo, para los jóvenes químicos que hoy matriculan en él se trata de algo “natural” que probablemente siempre existió. Esa “naturalización” de los avances académicos que hemos logrado a veces impide reconocer el enorme esfuerzo académico que ha debido desplegarse para llegar a la situación que hoy tenemos.

Por otra parte, el Doctorado en Ciencias Químicas es parte y reflejo de la problemática más general de los doctorados en Cuba. El doctorado en Cuba está hoy sometido a una discusión sobre sus derroteros futuros.

En esta contribución hemos reunido alguna información sobre el programa recién evaluado

con algunas informaciones y reflexiones sobre la problemática del doctorado en Cuba.

El doctorado en Química

El Doctorado en Ciencias Químicas fue establecido en Cuba y radica en la Facultad de Química de la Universidad de La Habana desde el año 1977, fecha en la que fue aprobado por la Comisión Nacional de Grados Científicos (CNGC). En estos 37 años se han graduado 154 personas.

En los primeros 20 años de su desarrollo, el doctorado en química se nutrió de la ayuda que brindaban especialistas de varios de los países del antiguo campo socialista. En este sentido, varios de ellos visitaban a nuestro país y guiaban las tesis, pero mayoritariamente eran los estudiantes cubanos quienes realizaban estancias de investigación en el extranjero. La mayoría de las tesis en química de esa etapa se realizaron en las antiguas República Democrática Alemana y Unión de Repúblicas Socialistas Soviéticas.

Fue muy importante para nuestro país poder formar a profesionales que son hoy parte importante de nuestros líderes científicos. De esa manera se sentaban las bases para poder

tutorar nuestras futuras tesis de manera independiente.

El Doctorado Curricular Colaborativo (DCC) en Química se aprobó por la CNGC en el año 2006 como una nueva vía para lograr el título de Doctor en Ciencias Químicas. Este tiene como ventaja que está articulado con la Maestría en Química, con lo que de manera eficiente el estudiante de postgrado puede lograr su título en un período relativamente corto. En Cuba, ya desde la década del 70, muchos químicos realizaban la maestría previa a comenzar su doctorado, con lo que ya desde esos años existía una relación entre ambos programas.

En los últimos 10 años se han graduado de Doctor en Ciencias Químicas en la Universidad de La Habana 58 estudiantes, que laboran fundamentalmente en centros de investigación y universidades. Esta ha sido la década en la que se han graduado más doctorantes en nuestra ciencia en Cuba. Con ello se demuestra la madurez alcanzada por nuestro programa de doctorado.

Ser doctor, hoy en día constituye uno de los sueños de muchos de los graduados en Licenciatura en Química y otras especialidades afines. Este es uno de los mayores logros de nuestro sistema de educación postgraduada. Mantener la exigencia en la formación de los doctores en ciencias químicas en Cuba es uno de los mayores retos que tenemos todos los que disfrutamos día a día al formar nuevas generaciones y contribuimos poco a poco al desarrollo de la ciencia en nuestro país.

Una mirada a la trayectoria¹

Es erróneo “naturalizar” los resultados académicos que hoy tenemos. Ellos son el resultado de perseverantes, prolongados y arduos procesos de construcción de un espacio académico del cual podemos sentirnos orgullosos.

Al mirar hacia atrás es posible decir que 1962 fue un año clave. El 10 de enero de ese año se promulgó en Cuba la Reforma de la Enseñanza Superior en Cuba. No fue un acontecimiento solitario. El 20 de febrero de ese mismo año se promulgó la Ley 1011 del Gobierno Revolucionario que creó la Comisión Nacional de la Academia de Ciencias de Cuba subordinada al Consejo de Ministros. Dio comienzo, asimismo, el despliegue de los centros de investigación asociados al Ministerio de Industrias. Se fundó también el Instituto de Ciencias Básicas y Preclínicas Victoria de Girón, institución de sumo valor en la trayectoria posterior de las ciencias médicas cubanas. El 8 de marzo de ese año Fidel fundó la Estación Experimental de Pastos y Forrajes Indio Hatuey primera institución de conocimiento creada por la Revolución en el sector agropecuario. Todos esos eventos, vistos de conjunto, ilustran muy bien el interés del poder revolucionario por echar las bases de la ciencia nacional.

¿De qué tipo de Reforma se trataba? En el apartado «Fines de la Universidad» el documento de la Reforma dice: «realizar investigaciones científicas, desarrollar el espíritu de investigación en los universitarios y colaborar con las instituciones científicas y organismos técnicos extra-universitarios». En otro momento: «La función de las instituciones de investigación científica tiene que estar necesariamente ligada a las instituciones de enseñanza superior [...] Existe así un nexo evidente entre el desarrollo de la economía y de la sociedad cubanas y la formación de científicos y técnicos». Es decir, la Reforma asumió la tarea de incorporar la ciencia a la Universidad.

Antes de la Reforma los títulos de doctorado se otorgaban en el pregrado; es el caso de los Doctorados en Ciencia Físico-Matemáticas y Físico-Químicas que dieron lugar a las Licenciaturas en Matemática, Física y Química.

También otorgaban títulos de doctorado los estudios en Ciencias Biológicas y Ciencias Farmacéuticas que con la Reforma pasaron a ser licenciaturas.

El ideario de la Reforma tuvo continuación a través del Consejo Nacional de Universidades que permitió el trabajo conjunto de las tres universidades públicas de entonces: la Universidad de La Habana (1728), la Universidad de Oriente (1947) y la Universidad Central de Las Villas (1952). El Consejo Nacional de Universidades, en su Primer Seminario Anual de las Universidades Cubanas, desarrollado en diciembre de 1964, insistió en el valor de «la investigación y experimentación científicas» e identificó «distintos niveles: puras o básicas, de interés para organismos estatales y de interés docente». En la estructura de dirección de las universidades se definió que uno de los vicerrectorados sería el de investigación.

Llama la atención la importancia concedida a la investigación básica -se afirmó que a la larga «rendía *el 1 000 %*». Se estimó que tanto esta como la investigación aplicada debían ser estimuladas «con el único requisito de que sean serias». La investigación universitaria se valoraba a partir de su carácter formativo y con interés docente. Era preciso que cada profesor dedicara «una cantidad apreciable de su tiempo a la investigación» como parámetro para garantizar su superación, tarea en la cual «la ayuda técnica» -entiéndase los profesores extranjeros invitados- sería necesaria. Juntos, los visitantes foráneos y los cubanos más calificados, debían tener como tarea principal la de «formar un núcleo de futuros investigadores». La investigación se incorporaría a los planes de estudio de los alumnos y se expresaría en un trabajo de grado realizado en un año aproximadamente. Por otra parte, desde entonces se apuntó al estudio de doctorado como una meta a alcanzar, concebido como «un trabajo original y aportativo cuya duración será

de dos o tres años, bajo la supervisión de personal altamente calificado».

Un artículo publicado en la prensa por un profesor de la UH en ocasión del Centenario de la Facultad de Ciencias (1963) revela que por entonces la Escuela de Química trabajaba en la química de los azúcares y sus derivados y en la mezcla de tabacos; la de Ciencias Biológicas, en la biología marina; la de Psicología, en estudios sobre la adolescencia y el ausentismo laboral; en la de Matemáticas se fomentaba un grupo de cibernética. La investigación apenas comenzaba.

Al hacer uso de la palabra en el acto de clausura de la jornada por dicho centenario, el Presidente de la República Osvaldo Dorticós Torrado dijo lo siguiente:

“Con sincera satisfacción y justificada esperanza concurrimos hoy a este acto a unir nuestra presencia y nuestra voz a la celebración del Centenario de la Facultad de Ciencias de la Universidad de La Habana, en el interés, sobre todo, de que se enfatice así el respaldo y reconocimiento de nuestro Partido y de nuestro Gobierno a lo que estimamos un esfuerzo eficaz y una promesa alentadora [...]. Nuestra Revolución, real y profunda, es y debe ser una Revolución de ambiciones infinitas [...]. Cualquiera de los esfuerzos que hoy se gestan en el desarrollo económico de la nación, están evidenciando lo que acabamos de decir. No es posible avanzar con la premura y la impaciencia que es tono de nuestro ritmo revolucionario, si a los entusiasmos y a la convicción ideológica no van unidas la sabiduría y la técnica [...]. La Revolución Cubana no sólo es una Revolución que no habrá de detenerse en las transformaciones económicas, sociales y políticas, sino también es una Revolución que no habrá de detenerse en el gran desarrollo cultural y científico de la nación”.

Los cambios mayores vinieron más adelante.

Según ha referido el Doctor José M. Miyar Barrueco, el año 1966 representó el inicio de profundas transformaciones en la Universidad conducidas directamente por Fidel. Desde

entonces la actividad científica se transformó radicalmente. En ocasión de recibir el título de Doctor Honoris Causa (2008), Miyar Barrueco, quien asumió como Rector de la Universidad de La Habana precisamente en la etapa que consideramos, presentó diversos testimonios que utilizo a continuación:

“Noche a noche, en sus largas visitas e intercambios con alumnos y profesores bajo los árboles de la entonces Plaza Cadenas, hoy Agramonte, nos ayudó a comprender el camino y los objetivos de ese proceso, al definir como un elemento estratégico cardinal el impulso a la investigación científica, concebida esta no solo como parte de la actividad académica de laboratorio o social, dentro de la Universidad. Sumaba así esta tarea a las nuevas concepciones [que] transformarían totalmente a la Universidad.

“El objetivo principal consistía en darle a la institución un peso creciente en la exploración, la búsqueda y la profundización del conocimiento, de la actividad académica que debía conducir -entre otras cosas- a despertar en los jóvenes el espíritu y la mentalidad científica y la búsqueda constante de nuevas formas de participar en la sociedad que, como siempre señalara, debía desbordar los muros académicos y convertirse en un factor fundamental en la Revolución, investigando, aportando, interviniendo en todos los campos de las ciencias, la tecnología, la economía, la producción agrícola y pecuaria; en fin, en toda la vida económica y social de país.

Según Miyar Barrueco: “El primer proyecto concreto de investigación planteado por el Comandante a la Universidad de La Habana en 1966, aparentemente muy sencillo, fue a la Escuela de Biología: el estudio de una plaga que asolaba las plantaciones de plátano llamado Picudo Negro. Ese devino un paso concreto, fundamental en el orden académico y participativo de la Universidad de La Habana

con un rango superior, al abordar aspectos críticos en problemas concretos del país. Por necesidad del estudio que se hacía, por una plaga demoledora de los platanales en aquel momento, se creó un grupo de investigaciones que rápidamente pasó, como pensó Fidel, a los proyectos futuros de la Universidad, formando grupos de integración o multidisciplinarios para la profundización y estudio integral de la plaga”.

El balance de ese periodo, Miyar Barrueco lo resumió así: “Solo debo expresar que fue tal el auge y desarrollo de aquellas concepciones que, por decisión del Comandante en Jefe y ante el resultado positivo de las transformaciones y la participación decisiva, entusiasta y creadora de instituciones como el CNIC y de la Universidad, se decidió incorporarla estructuralmente. o sea, integrar las principales instituciones, centros, estaciones experimentales y proyectos de desarrollo tecnológico y agropecuario a la Universidad de La Habana. Junto al Centro Nacional de Investigaciones Científicas, a la Universidad de La Habana se integraron diferentes instituciones de la mayor responsabilidad y nivel en sus especialidades en el país”.

A fines de 1967 surgieron «los equipos polivalentes», luego denominados «equipos de investigaciones agrícolas», los cuales desarrollaron estudios integrales en caña, cítricos, arroz, café, piña, plátano, vegetales, frutales, plantas oleaginosas. Esas acciones tenían carácter multidisciplinario e involucraron a varias escuelas como las de Agronomía, Biología, Química y Economía. Se establecieron estaciones y subestaciones experimentales en cítricos -Güira de Melena-; piña, café y algodón -Bauta-; arroz -Guanamón de Armenteros-; caña -San Nicolás de Bari- y frutales -Camagüey. Los entonces estudiantes y profesores de Química participaron muy activamente en esas tareas.

Marcos Lage quien fuera Director de la

Escuela de Ingeniería Eléctrica y a partir de 1967, vicerrector de Investigaciones, resume lo que él llama «la esencia de la época» en tres trazos: estrechar vínculo de profesores y estudiantes con los problemas del país; lograr que la nueva generación tuviera su «bautismo de fuego» mediante la inmersión en la realidad del país y, de manera particular, en contacto con su «penuria técnica»; y trabajar coordinadamente, promoviendo integración y multidisciplinariedad. A finales de 1967, la Facultad de Ciencias incorporaba la mayor parte de sus áreas a la investigación con ochenta y dos proyectos -el 40 % de ellos, de la Escuela de Química-. Mientras, las Facultades de Ciencias Médicas, Tecnología y Ciencias Agropecuarias contribuían al «desarrollo incipiente» de la investigación universitaria.

La creación del Centro Nacional de Investigaciones Científicas (CNIC) en 1965 y su incorporación a la UH en 1966 fueron actos de la mayor importancia para los estudios de posgrado.

El CNIC desempeñó, desde su nacimiento, un papel fundamental en la formación de investigadores y en el aprovechamiento de la colaboración internacional. Con ello devino motor importante de la joven institucionalización de la ciencia cubana. El tiempo confirmaría su condición de semillero de centros de investigación e investigadores de alto nivel.

El aliento que Fidel le daba a la investigación y al papel de la universidad en ella se hacía visible constantemente. El 13 de marzo de 1969 decía: «La Universidad no estará vinculada sólo a los procesos productivos. La Universidad deberá vincularse a las investigaciones, y las universidades deberán ser centros de investigación de todo tipo»

Entre 1968 y 1970 se crearon numerosos centros de investigación, entre ellos el Centro de Nutrición de la Caña, influyente en la

formación de químicos.

La formación de alto nivel

En el período cobró auge el proceso de formación de alto nivel, tanto en Cuba, con apoyo de la asesoría extranjera, como en el exterior. La importancia de esa tarea se hace evidente si se aprecia que excepto en Humanidades y prácticamente en Ciencias Médicas, no todo el claustro era graduado universitario -aunque con cifras siempre superiores al 90 %-.

A inicios de los setenta los profesores con título de Máster alcanzaban el 6,6 % en Ciencias y el 3 % en Tecnología, que eran las más aventajadas. Ciencias Agropecuarias tenía un 3,4 % de doctores y las otras no llegaban al 1 %. El diagnóstico realizado por el Consejo Asesor de la Educación Posgraduada de la Universidad de La Habana en junio de 1974 encontró 29 profesores con título de Doctor, lo que representaba el 1,1 % del claustro y 173 (6,7 %) estaban en proceso de obtención del grado.

Para tener una idea comparativa, hoy la UH tiene 723 doctores (alrededor del 44% del claustro) y centenares de estudiantes de doctorado.

En los setentas había un creciente movimiento de becas, cursos de verano y otras formas de intercambio y movilidad profesional. En 1970, 1971 y 1972 se desarrollaron unos cincuenta cursos de verano como promedio por año y movilizaron siempre más de mil participantes, con notable presencia de personas provenientes de la esfera de la producción y los servicios. Los profesores extranjeros participantes en esos mismos años fueron 172, 143 y 89, respectivamente, con gran peso en Ciencias, a la que seguía Tecnología.

A partir de 1968 comenzaron a regresar a la Isla profesionales formados en el exterior con nivel de doctorado.

La primera defensa de tesis de doctorado realizada en Cuba tuvo lugar en el CNIC en el

año 1969. Entre 1969 y 1975 se efectuaron otras dieciocho defensas de tesis de profesionales cubanos: once hombres y siete mujeres. Entonces no existía todavía en Cuba una ley de grados científicos; a los tribunales se integraban prestigiosos investigadores cubanos y extranjeros. Para Química fue importante la graduación de los primeros másteres, vinculados al CNIC.

La clave de la época fue ambición científica impulsada desde el gobierno, expresada en la creación del CENIC; apoyo internacional de investigadores solidarios, jóvenes talentosos que dedicaron grandes esfuerzos a su formación; avance a marcha forzada; definición de normativas para defender las tesis a pesar de la escasa experiencia en ese campo. Nada podía detener el avance científico del país.

Adelantando un poco la información, cabe mencionar que hasta el año 1976 se habían formado cincuenta y ocho doctores en Cuba y ciento ochenta y seis en total. Comenzaba así a crearse una masa crítica de investigadores que en los años siguientes contribuiría a la consolidación de la ciencia cubana.

En el periodo comprendido entre 1959 y 1976, egresaron de la Universidad de La Habana un total de 34 943 graduados en los distintos grupos de carreras. En ciencias exactas y naturales fueron 3779.

En el corto periodo 1973-1975 se introdujeron cambios institucionales en la ciencia cubana. Es el caso de la creación en 1974 del Consejo Nacional de Ciencia y Técnica que en 1976 dio paso al Comité Estatal de Ciencia y Técnica; se creó el Consejo Asesor de Política Científica del viceministerio de la Educación y la Ley de Grados Científicos, aprobada el 2 de diciembre de 1974. En 1975 se aprobó la «Tesis sobre Política Científica y Tecnológica» del I Congreso del Partido Comunista de Cuba (PCC).

La fundación del Ministerio de Educación

Superior en 1976 impulsó la creación un el 17 de marzo de 1977 de la Comisión Nacional de Grados Científicos (CNGC).

Ese dato permite elaborar una suposición ¿Por qué demoró casi tres años luego de aprobada la Ley en constituirse la CNGC?

Una conjetura puede ser la siguiente. La ley de 1974 fue el resultado de la acción de varios actores interesados en el tema: el Consejo Asesor de Política Científica del viceministerio de la Educación, la Universidad de La Habana y la Academia de Ciencias. Pero el país vivía entonces un proceso de cambios institucionales y esos actores estuvieron inmersos en las transformaciones en curso. El Consejo Nacional de Ciencia y Técnica fue disuelto y en su lugar se creó el mencionado Comité Estatal de Ciencia y Técnica, de muy corta duración. La Universidad de La Habana que había sido protagonista de las ideas de política en el período anterior fue desmembrada y de ella nacieron varias universidades. La perspectiva de crear un Ministerio de Educación Superior que incorporó varios de los cuadros que formaron parte del viceministerio de la Educación Superior del MINED y de la UH probablemente haya restado empuje al Consejo Asesor de Política Científica de ese ministerio.

Es de suponer que la puesta en práctica de la mencionada Ley no parece haber sido vista como una prioridad. Es curioso que la CNGC haya sido subordinada al Consejo de Ministros, aunque el Ministro del MES, Dr. Fernando Vecino Alegret asumió su presidencia. Esta combinación entre una adscripción en extremo centralizada que pareciera ser expresión de la prioridad concedida al tema y la dilatación en su implementación práctica, que parece sugerir lo contrario, confirieron a la creación de la CNGC peculiaridades que luego influirían en su evolución. Por ejemplo, mientras los reglamentos de posgrado han cambiado de acuerdo con las exigencias de los tiempos, las

normativas en materia de grados científicos se han conservado casi inamovibles por años.

Cualesquiera sean los motivos, no fue hasta 1977 que tuvimos CNGC, órgano que se encargó de crear las normativas para realizar los grados científicos en Cuba. Por entonces la mayoría de los doctores se formaban en el extranjero. En la República Democrática Alemana y la Unión de Repúblicas Socialistas Soviéticas se formaron muchos de los doctores en Química que obtuvieron sus títulos en aquellos años.

Cuba asumió en aquellos años muchas de las formas institucionales y mecanismos de funcionamiento que eran propios de los países del Consejo de Ayuda Mutua Económica (CAME) al cual Cuba se había incorporado a inicios de la década.

Se mencionan aquí estos hechos para mencionar que las normativas que emergieron de la época se caracterizaron por:

1. Se tomaron directamente de los doctorados de países del CAME, aun cuando las diferencias de desarrollo de Cuba con respecto a esos países eran enormes. Algo peculiar de Cuba quizás haya sido que para reconocer el trabajo pretérito de valiosos profesionales y aumentar la masa crítica de doctores en el país en la primera etapa se concedieron un cierto número de doctorados por otorgamiento directo.
2. El doctorado del CAME estaba organizado por disciplinas, según ordenamientos epistémicos que la vida pronto cuestionó. Difícilmente la interdisciplinariedad encuentra cabida en ese ordenamiento.
3. No existió entonces ni existe hoy una política de Estado con respecto a los doctorados. Incluso a fines de los ochentas se tomaron medidas al más alto nivel que los desalentaron. Se les atribuyó falta de aplicación práctica a los resultados que ellos generaban. De ahí nació la idea del doctorado como conclusión de la

carrera académica y no como proceso formativo. Restituir la idea del doctorado como proceso de formación demoró algunos años y probablemente hoy no está clara para todos.

4. Desde la segunda mitad de los ochentas se comenzó a desalentar la formación de doctores en los países socialistas. El derrumbe del campo socialista puso fin a aquella etapa.

Un cambio en las políticas va a ocurrir hacia 1994, cuando el MES, en particular su Ministro Vecino Alegret decidió apostar a la formación de doctores con la meta de alcanzar el 50 % del claustro. La UH lo logró temporalmente a inicios de la década siguiente, aunque facultades como Química sobrepasan esa cifra.

Observemos que el contexto en 1994 era bien diferente: hasta la década anterior era posible recibir apoyo de países con gran nivel, por ejemplo, en ciencias básicas. En la década de los 90 la inserción internacional de la ciencia cubana cambió radicalmente y los apoyos ahora vendrán de países como México, España y luego Brasil, Alemania, entre otros. Pero el componente nacional de la formación pasó a ser central.

El aspecto positivo de la decisión del MES consistió en restaurar el doctorado como objetivo (ya vimos que la idea venía de la época de la Reforma). Sin embargo, la mayoría de los Organismos de la Administración Central del Estado no se sumaron a ese interés. Un aspecto no favorable es que la presión por el doctorado y las dificultades reales para investigar en Cuba, sobre todo en ciencias experimentales, llevó a que muchas personas reorientaran sus temas de tesis a campos distantes de tales ciencias.

Todo cambió pero las normativas siguieron siendo las mismas. En 2002 y 2007 la CNGC convocó a talleres para discutir la problemática de los grados científicos. A partir de ese momento se han venido acumulando ideas que hoy pueden servir de base a los cambios en

curso.

Notas finales

En Cuba se han graduado hasta hoy más de 12 mil doctores. Se sabe poco sobre a qué se dedican y cuantos se mantienen activos e incluso la cifra de los que radican en Cuba.

Los doctores que graduamos en la UH en el área de ciencias naturales tienen entre 32 y 35 años, mientras los de ciencias sociales suelen tener edades más avanzadas. Es obvio que debemos acortar los plazos de formación. Hay un grave proceso de envejecimiento de la masa de doctores. Esto compromete el presente y el futuro de la ciencia y la educación superior cubanas.

Los doctorados carecen de un respaldo económico adecuado y descansan de forma excesiva en las becas y otros apoyos internacionales. Ello tiene que ver con la situación económica del país. Pero no estaría de más que avanzásemos hacia verdaderas políticas de Estado en esta materia.

Referencias

1.- Quienes deseen profundizar en esa visión histórica pueden hacerlo consultando el Libro de Jorge Núñez Jover *Conocimiento Académico y Sociedad. Ensayos sobre política universitaria de investigación y posgrado*. Editorial UH, La Habana, 2010. Allí aparecen las referencias bibliográficas y fuentes aquí omitidas.

Perfiles

Por Margarita Suárez Navarro, Editora

Esta sesión se crea para conocer a nuestros químicos, su trayectoria profesional y personal, así como interesantes hechos y curiosidades acerca de ellos.

Perfiles de este número nos acercará al Prof. Carlos Pérez Martínez (e-mail: cp@fq.uh.cu), profesor de la Facultad de Química de la Universidad de La Habana el que tuvo la amabilidad de responder algunas preguntas de un cuestionario previamente establecido. Conozcámoslo mejor...



Prof. Dr. Carlos Pérez Martínez

Carlos Pérez se graduó en 1968 de Licenciatura en Química ha desarrollado una extensa vida laboral en el Departamento de Química Física de la Facultad de Química de la UH, donde es Profesor Titular desde 1977. Presentó su Maestría en 1973, y posteriormente en 1979 obtuvo el Doctorado en Ciencias Químicas en la Universidad de Humboldt, Alemania.

Es conocida y reconocida su calidad como docente y el nivel científico de Carlos Pérez, centrando su actividad pedagógica en la impartición de asignaturas relacionadas con la química cuántica, la espectroscopia y la

termodinámica estadística. Realiza investigaciones de carácter fundamental donde se complementan métodos espectroscópicos y teóricos que han sido aplicados al estudio de varias familias de compuestos orgánicos y biomoléculas. Se destacan los estudios sobre la estructura de productos naturales y derivados furánicos, la determinación estructural de sapogeninas esteroideas y derivados sintéticos análogos a brasinoesteroides, y la determinación de la estructura tridimensional y dinámica de proteínas y péptidos mediante RMN y Dinámica Molecular.

Tiene 70 publicaciones en revistas científicas y una amplia participación en eventos científicos como ponente, autor, presidente de sesiones y organizador. Es autor o coautor de 16 libros de textos y de ejercicios de las asignaturas que imparte. Ha cumplimentado invitaciones en universidades y centros de investigación en Angola, México, Brasil, Colombia, Guatemala, Bolivia, España, entre otras.

Ha ocupado diferentes responsabilidades en el ámbito científico y docente de la Facultad de Química.

Entre los reconocimientos que ha recibido se encuentran el Premio Humboldt en 1980, la distinción “Por el conjunto de la Obra Científica” otorgado por la UH, la Medalla Frank País (2012), y recientemente recibió el Premio Nacional de Química (2013).

A continuación las preguntas y sus respuestas:

1.-Cuales son sus entretenimientos: *lectura (literatura, historia, policiacos) y cine (históricas, comedias).*

- 2.- Si no fuera químico sería... *físico*.
- 3.- De la docencia y la investigación prefiero... *ambas, la posibilidad de transmitir conocimientos sobre algo en lo que se investiga y se conoce con más profundidad*.
- 4.- Mi mayor logro ha sido... *mis hijos y mi profesión*.
- 5.- Algo que me hace reír... *la vanidad humana*.
- 6.- El mejor consejo que he dado.. y que me han dado... *por suerte han sido muchos y a la mayoría los atendí*.
- 7.- Me hubiera gustado descubrir... *el código genético*.
- 8.- Cuando me siento frustrado yo... *me pongo a leer algo interesante*.
- 9.- Mi autor favorito de ficción es... *Gabriel García Márquez*.
- 10.- Mi libro preferido es... *(varios), Cien Años de Soledad (imaginación creativa), Ulises (técnica narrativa), Orgullo y Prejuicio (no hay tema pequeño para un gran libro) Ascenso y caída del Tercer Reich (información de primera mano de un corresponsal en la Alemania nazi)*.
- 11.- Los tres films más importantes de todos los tiempos... *Tiempos Modernos, Ciudadano Kane, El Séptimo Sello*.
- 12.- El avance científico más significativo en los últimos 100 años ha sido... *la teoría cuántica*.
- 13.- El mayor problema que encaran los científicos actuales es... *la supervivencia de la especie en un medio ambiente degradado y una sociedad global poco solidaria*
- 14.- Lo más importante que aprendí de mi familia fue... *la honestidad*.
- 15.- Si pudiera reunirme con tres científicos famosos de la historia, ellos serían... *Albert Einstein, Charles Darwin, Richard Feynman*.
- 16.- Escogí la química como carrera porque... *tuve profesores que me motivaron a ello*.

17.- El descubrimiento científico más apasionante hasta la fecha es... *el código genético*.

18.- Los cinco artículos y/o libros por usted publicados que considere más importantes:

- C. Pérez, F. Löhr, H. Rüterjans, J.M. Schmidt, Self-Consistent Karplus Parametrization of 3J Couplings Depending on the Polypeptide Side-Chain Torsion χ_1 , *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 7081-7083
- Espectroscopia I y II Ed. Félix Varela 2011 ISBN 978-959-07-1361-3.
- Manual de Determinación Estructural de Compuestos Naturales Programa Iberoamericano de Ciencia y Tecnología, CYTED (Coautor y coeditor)/ Convenio Andrés Bello **2007** ISBN: 978-958-698-208-5
- M. Fernández-Oliva, H. Santana, R. Suardíaz, J. A. Gavín, C. S. Pérez, Combined NMR spectroscopy and Molecular Dynamics study of growth hormone releasing peptide GHRP-6 and a cyclic analogue, *Mag. Reson. Chem.* **2012**, *50* 364-371.
- L. Franzoni, C. Lücke, C. Pérez, D. Cavazzini, M. Rademacher, C. Ludwig, A. Spisni, C. L. Rossi, H. Rüterjans Structure and Backbone Dynamics of Apo- and Holo-cellular Retinol-binding Protein in Solution. *J. Biol. Chem.* **2002**, *277*, 21983-21997.

Tributo

Hay profesores que quedan en el recuerdo de sus estudiantes por haber contribuido de forma determinante a la formación de nuevas generaciones de químicos. Este es el caso de docentes que ya no se encuentran entre nosotros físicamente, pero que siguen viviendo en nuestra comunidad educativa.

Es por eso que la revista “Encuentro con la Química” dedica esta sesión a recordar a nuestros profesores que realizaron su trabajo con eficiencia y dignidad.

Los estudiantes de segundo año de Licenciatura en Química, José A Ricardo García y Alejandro Fuentes García, que dirigidos por la Prof. Rebeca Vega Miche, se han dedicado a documentar la historia de la Facultad de Química, han elaborado estos apuntes que rememoran a los profesores Antonio Alzola Vega y a José Blanco Prieto.



José A Ricardo García y Alejandro Fuentes García

El Dr. Antonio Alzola de Vega nació en La Habana el 12 de octubre de 1925. En 1945 matriculó la carrera de Ingeniería Eléctrica en la Universidad de La Habana. En 1953, en la Escuela de Ciencias matricula la carrera de Físico-Química culminándola en 1960. Después de la Reforma Universitaria de 1962 es nombrado Profesor Titular. Desde 1962 hasta 1969 fue jefe de Departamento de Química Física de la recién creada Escuela de Química. Impartió la asignatura de Termodinámica en las carreras de Ciencias e Ingeniería. En esa época colaboró en la realización de investigaciones relacionadas

con las industrias azucarera y alimenticia. Gozaba de mucho prestigio como especialista en Termodinámica. Desde 1964 colaboró en la formación de nuevo personal en la especialidad. Impartió cursos de postgrado tanto en la UH como en el CENIC (Biomedicina). Fue miembro del Consejo Asesor del MES. Participó en el desarrollo de nuevas asignaturas. Elaboró varios libros de texto de reconocido nivel. Recibió varias distinciones, entre ellas la Medalla por la Educación Cubana, la José Tey y la Rafael Ma. Mendive. A pesar de las dolencias que lo aquejaban se mantuvo trabajando casi hasta sus últimos días. Falleció en noviembre de 1988.



Dr. Antonio Alzola de Vega

El Dr. José de Jesús Blanco Prieto nació en La Habana en 1940. Se graduó en la Universidad de La Habana como contador público y licenciado en Química. En la propia Universidad hizo la maestría en Ciencias Químicas y el doctorado en Ciencias Pedagógicas. Profesor titular de Química Inorgánica de la Facultad de Química, donde impartió Química General y cursos de postgrados. Fue profesor invitado en la Universidad Autónoma de Nuevo León, México. Presidente de la Comisión Nacional de la especialidad de Química, director de la Comisión Nacional de Química del Ministerio de Educación Superior, presidente de la Asociación de Pedagogos de la Universidad de La Habana, miembro de la Asociación de

Educadores de América Latina y el Caribe y de la Sociedad Cubana de Química. Publicó numerosos artículos en diversas revistas relacionadas con la industria del fósforo, los métodos de síntesis y caracterización de compuestos de coordinación, el proceso de enseñanza-aprendizaje y el desarrollo de conocimiento y habilidades; además de elaborar varios textos para la enseñanza de la química universitaria. Falleció en 1999.



Dr. José de Jesús Blanco Prieto

La Facultad de Química los recuerda permanentemente ya que hay sendas placas una en el Departamento de Química Física y otra a la entrada del Departamento de Química Inorgánica que los evoca y en las Jornadas Científica Estudiantil se otorgan los reconocimientos Gran Premio Prof. Antonio Alzola de la Vega al trabajo de mayor trascendencia científica y Gran Premio Prof. José Blanco Prieto: al trabajo de mayor impacto educativo.



Tarjas conmemorativas