

NOVEDADES CIENTÍFICAS EN 2018

EN QUÍMICA

En la siguiente reseña se presenta una breve selección de las investigaciones actuales que se refieren a aspectos de la Química considerados principalmente bajo los puntos de vista de las estructuras de nuevos compuestos, de métodos de preparación más eficientes, y de la exploración y aprovechamiento de energías más limpias y sostenibles.

Como es habitual en esta sección, los trabajos a los que se refieren los comentarios se identifican por sus autores, el título de la revista donde se han publicado (abreviado en su caso), el correspondiente volumen y las páginas que abarcan, o bien el número del artículo según la notación utilizada por la revista, a fin de facilitar su localización a los lectores interesados. El año de publicación es de 2018 en todos los casos.

NUEVOS ELEMENTOS Y COMPUESTOS

Por lo que se refiere a la obtención de nuevos elementos químicos, se sigue a la expectativa de que se descubra el elemento 119 (provisionalmente el “ununenio”). A ello se dedica un equipo del laboratorio japonés de Nishina dirigido por Hideto Enyo. Su método consiste en bombardear una muestra de curio, cuyo número atómico es 96, con haces de vanadio, de número atómico 23, con la intención de lograr una fusión que dé un núcleo con la suma exacta de 119 protones (BBC Mundo Ciencia, 10 de enero de 2018). El procedimiento no está ni mucho menos garantizado, pues otras combinaciones ensayadas hasta ahora no han tenido éxito. En caso de que se consiguiera este objetivo, además del aliciente de la novedad en sí, se podría inaugurar la fila 8ª de la Tabla periódica, capaz de alojar otros 17 elementos más, cuya obtención subsiguiente compondría un extenso programa de trabajo para muchos años. El gran inconveniente que presentan todos estos átomos tan pesados es que su núcleo, nacido a duras penas, resulta muy difícil de estabilizar con todos los electrones que le corresponden, pues resulta sumamente inestable y se desintegra espon-

táneamente. Si algún día se consiguiera el átomo completo y estable, las leyes de la Química que conocemos predicen que su comportamiento se debería ajustar al de un típico metal alcalino, a semejanza de los demás elementos que le anteceden en el grupo 1, en todos los cuales resulta favorecido el estado monovalente.

El capítulo de nuevos compuestos ofrece una perspectiva totalmente diferente, pues sería imposible consignar, siquiera mínimamente, aquellos obtenidos durante el período al que corresponde esta revisión, y que han pasado a reforzar el nutrido catálogo que ofrece la Química. Tan sólo como ejemplo de la versatilidad de los compuestos químicos en sus variadas manifestaciones, se puede citar la preparación de unas moléculas autorreplicantes, o sea dotadas de una cualidad esencial de la materia viva que es la de fabricar copias de sí mismas. Para mayor semejanza con los seres vivos, presentan además un comportamiento parásito y depredador, que emerge cuando varios de estos replicadores entran en contacto entre sí (Otto y col., *Angew. Chem.*, 57, 10564-10568).

PROPIEDADES SINGULARES DE LA MATERIA

¿Cuánto tiempo hacía que en esta sección no se hablaba del agua? Posiblemente no mucho, pues siempre hay ocasión para ello. No en vano el agua se ha denominado el espejo de la ciencia, pues de un modo u otro, los conocimientos que se atesoran acerca de esta sustancia reflejan los avances más recientes en campos muy diversos. Tal es el caso de la Química estructural, donde recientemente se ha presentado un estudio de la ordenación a corto alcance de las moléculas del agua líquida. Pese a su aparente sencillez, estas moléculas tienden a adoptar una disposición de forma tetraédrica extendida en las tres direcciones del espacio, que está estabilizada por los enlaces de hidrógeno intermoleculares que ligan las unidades vecinas (Figura 1). Tal estructura es responsable de propiedades de gran trascendencia ambiental, como por ejemplo la densidad máxima que alcanza el hielo a 4°C. Pero los tetraedros son también los bloques de construcción de otros materiales tan importantes como el carbono, el silicio o el germanio, que comparten entre sí características físicas tales como unas estructu-

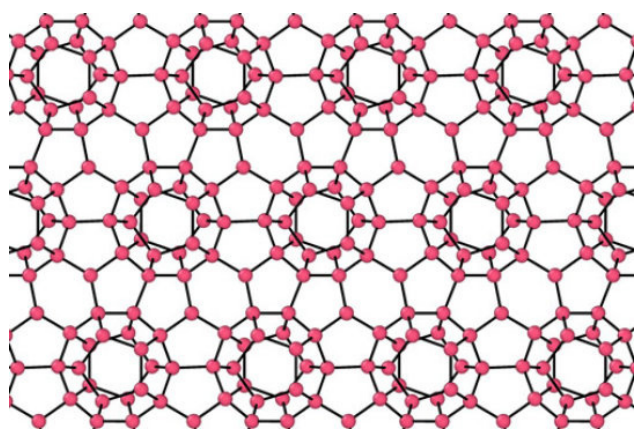


Figura 1. Esquema de la complejidad de la ordenación espacial que emerge de las interacciones entre las moléculas de agua. Los átomos de oxígeno se representan en forma de esferas de color rojo y los enlaces de hidrógeno que conectan unas moléculas de agua con otras se representan como segmentos de color negro. Según Russo y col. (2018).

ras cristalinas muy abiertas, ciertas anomalías en estado líquido y escasa capacidad de formación de vidrios en condiciones ordinarias. Modificando de forma sistemática el grado de formación de los tetraedros en el marco de un modelo teórico adecuado, se ha logrado precisar cómo se produce el cambio desde el comportamiento del agua al de otros líquidos tetraédricos. Con ello se comprenden mejor las causas de que el agua sea tan especial y tan anómala (Russo, Akahane y Tanaka, *PNAS*, 115, E3333-E3341).

Todavía es posible añadir algo más acerca del hielo, aunque no en el sentido literal del término, sino en el otro más peculiar de “hielo de espín”. Con este nombre se designa un sistema magnético cuyo estado más estable de mínima energía no es, ni mucho menos, único. El motivo se debe a que los momentos magnéticos o espines de los constituyentes del sistema están orientados en forma de tetraedro, de modo similar a la distribución espacial de los protones en torno a los átomos de oxígeno en el hielo ordinario. La estructura resultante se caracteriza por no poseer una ordenación única, ni siquiera en las plácidas condiciones que se atribuyen al cero absoluto de temperatura. Por ello el hielo de espín, a semejanza del hielo común, posee de modo inevitable una gran entropía residual a temperaturas muy bajas. Como ejemplos naturales de hielo de espín se conocen algunas sales de elementos de transición interna, tales como el titanato de disprosio $Dy_2Ti_2O_7$ y el titanato de holmio $Ho_2Ti_2O_7$. En teoría se pueden estudiar unas formas artificiales de hielo de espín que contienen dominios magnéticos en una configuración especial a escala nanométrica, conocida como red de Shakti. Se ha encon-

trado recientemente que tales formas adoptan una novedosa ordenación topológica, que como tal depende de las conexiones mutuas de los componentes del sistema y resiste a las deformaciones, en la cual surgen efectos cuánticos no usuales (Schiffer y col., *Nature Physics*, 14, 723–727). El hallazgo puede tener aplicaciones prometedoras para la dinámica dependiente de la memoria en superconductores y otros sistemas electrónicos.

MAGNETOQUÍMICA

Las siempre intrigantes propiedades magnéticas han inspirado algunos trabajos de alcance químico. Entre ellos merece citarse un estudio de la inducción del fenómeno del ferromagnetismo en películas delgadas de platino, controlada por líquidos iónicos paramagnéticos y acompañada además del efecto Kondo, con el que se designa al aumento que se produce en la resistencia eléctrica en materiales conductores a baja temperatura cuando son dopados con impurezas magnéticas, contrariamente a la disminución que se produce normalmente (Ye y col., *Sci. Adv.*, 4, eaar2030).

En esta línea destaca también la producción de magnetismo en dispositivos ultrafinos preparados a base de cristales de van der Waals constituidos por haluros mixtos de cromo (Tafti y col., *Adv. Mater.*, 30, 1801325). El cloruro de cromo $CrCl_3$ y el bromuro de cromo $CrBr_3$ son ejemplos de haluros de metales de transición que presentan magnetización en el plano y fuera del plano, respectivamente. Mediante la preparación de haluros mixtos, de fórmula general $CrCl_{3-x}Br_x$, se puede cubrir todo el intervalo de variación de la magnetización entre ambos límites (Figura 2).

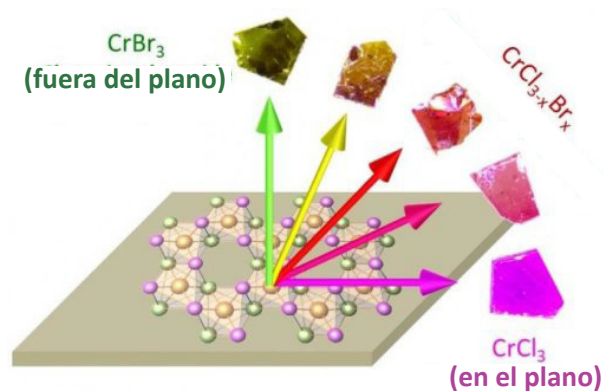


Figura 2. Esquema del intervalo de variación de la magnetización entre los límites representados por el cloruro de cromo $CrCl_3$ y el bromuro de cromo $CrBr_3$, en el plano y fuera del plano respectivamente. Mediante la preparación de haluros mixtos, de fórmula general $CrCl_{3-x}Br_x$, se puede cubrir la variación del ferromagnetismo que tiene lugar en 2 dimensiones entre ambos límites. Según Tafti y col. (2018).

MATERIA EN LA NANOESCALA

Una de las propiedades más interesantes que se encuentran al explorar las propiedades químicas a la escala de los nanómetros, de tan grande interés actual, es la designada como nanoagregación. Con este término se designa la asociación de un conjunto de unidades para constituir una estructura más compleja dentro de esa reducida escala de tamaño. Se trata de un comportamiento espontáneo surgido como respuesta a ciertos estímulos, que además de su interés intrínseco, presenta el aliciente de imitar algunos procesos biológicos fundamentales. De ahí que se piense que su estudio ayudaría a comprender mejor las características fundamentales de tales procesos. Un ejemplo muy representativo se encuentra en el ensamblaje reversible de microtúbulos naturales mediante el uso de ciclodextrinas modificadas que actúan como receptores artificiales. El proceso se puede regular mediante la luz (Liu y col., *Angew. Chem.*, 57, 8649-8653). Su conocimiento puede apoyar aplicaciones clínicas para el tratamiento de enfermedades relacionadas con una agregación inadecuada de proteínas, tales como las causadas por amiloides.

En relación con las patologías de raíz química, desde hace tiempo se recomienda tener mucha precaución en la manipulación de los nanomateriales, por los posibles efectos nocivos de la acumulación de partículas muy pequeñas sobre el organismo. Por ello resulta muy oportuno un ensayo para valorar de modo precoz la toxicidad de este tipo de sustancias al actuar de modo sinérgico con otras, aunque por separado todas ellas sean biocompatibles. Se ha encontrado así que las nanopartículas de oro se convierten en tóxicas al entrar en contacto con ciertos surfactantes, que por su parte son de uso común, de tal modo que la presencia simultánea de unas y otros presenta riesgos evidentes para nuestra salud (Tanguay, Hutchison y col., *ACS Nano*, 12, 5312-5322).

NUEVOS MÉTODOS DE SÍNTESIS QUÍMICA

Un objetivo permanente de la síntesis química es la construcción de moléculas con una estructura lo más compleja posible, haciendo uso de métodos cada vez más ingeniosos y eficientes. En esta línea de confluencia de tradición y vanguardia destaca la reciente preparación de anillos carbocíclicos formados por la condensación de 3 núcleos, que constan respectivamente de 5-8-5 eslabones (Frederich y col., *Chem. Sci.*, 9, 5389-5393).

El conjunto resultante constituye la pieza de construcción básica de unos 30 productos naturales diferentes. Algunos miembros de esta familia presentan actividad en cultivos celulares, por lo que la subestructura que se ha construido tiene interesantes aplicaciones potenciales en Química médica. La síntesis propuesta permite conseguir un rendimiento apreciable, hasta de varios gramos, siguiendo un proceso formado por 4 etapas (Figura 3).

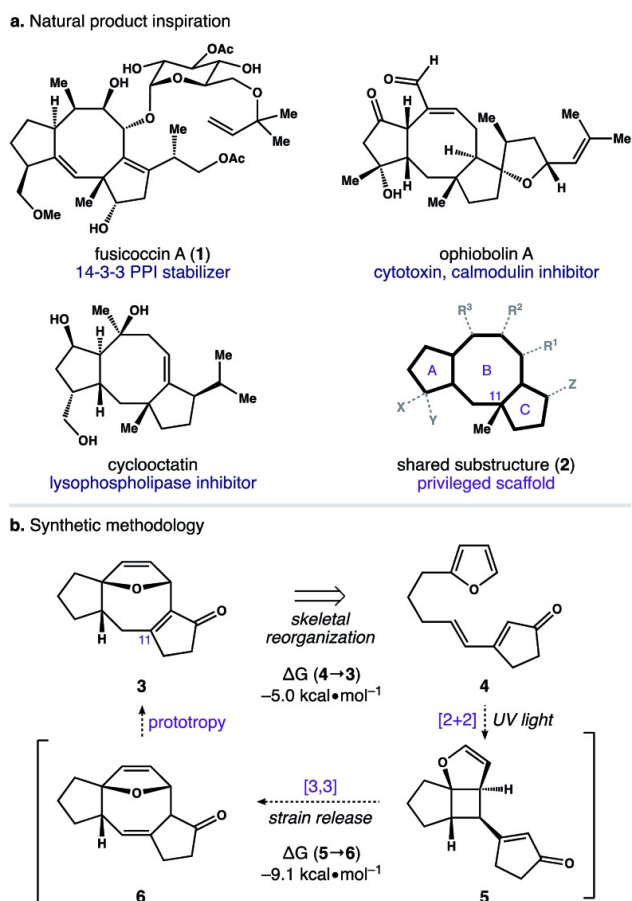


Figura 3. Diseño de un procedimiento modular que permite la preparación de sistemas cíclicos condensados de 5-8-5 eslabones (estructura 6). Según Frederich y col. (2018).

AVANCES EN CATALÍISIS

La fabricación industrial de productos químicos se rige cada vez más por criterios orientados hacia la conservación y sostenibilidad del medio ambiente. Bajo este punto de vista resulta esencial la puesta a punto de nuevos métodos que aprovechen materias primas abundantes y de bajo precio, y que permitan en lo posible reciclar las sustancias contaminantes que se produzcan. Estos objetivos estimulan la búsqueda de catalizadores eficaces y económicos, que por ahora siguen siendo en gran parte de naturaleza metálica.

Dentro de esta línea, el metanol o alcohol metílico $\text{CH}_3\text{-OH}$ es un compuesto químico de gran importancia económica, pues no sólo se utiliza como reactivo para obtener directamente productos específicos, sino que también es el precursor de otros muchos compuestos, destinados a su vez a tratamientos posteriores. Su obtención a escala industrial se basa principalmente en la hidrogenación del gas CO , pero sería muy conveniente rentabilizar otra vía alternativa a partir del gas CO_2 , el conocido agente del efecto invernadero cuyo aprovechamiento resolvería uno de los grandes problemas de la contaminación actual. Con este objetivo se ha investigado la producción de metanol mediante la hidrogenación del CO_2 , activada con un catalizador metálico formado por una aleación de Pd - Cu (Guo, Song y col., *ACS Catal.*, **8**, 4873-4892). Se ha encontrado que la presencia de agua condiciona sustancialmente la cinética del proceso.

Otro procedimiento alternativo de obtención de metanol se basa en la conversión del metano CH_4 , un compuesto tan abundante y de bajo precio que su activación y subsiguiente transformación a voluntad resultan ser unos objetivos que por sí mismos inspiran una línea de investigación del más alto nivel. Por ello se han llegado a considerar como el *Santo Grial* de la catálisis. Con estas intenciones se ha propuesto un método (Cui y col., *Chem*, **4**, 1902-1910) que hace uso del efecto catalítico de unos modestos átomos individuales de Fe, confinados en un soporte de grafeno (Figura 4). El método propuesto posibilita que el proceso se desarrolle, sin necesidad de recurrir a metales preciosos siempre caros y escasos,

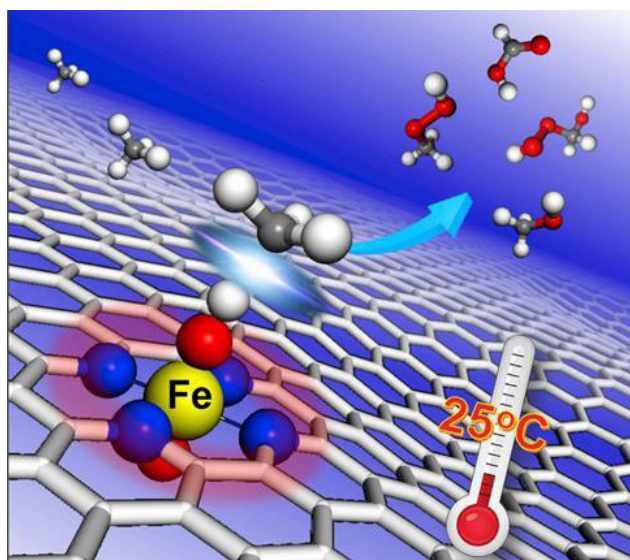


Figura 4. Representación artística de la conversión de metano (CH_4) a metanol (CH_3OH) a temperatura ambiente, mediante catálisis con grafeno dopado con átomos de Fe. Según Cui y col. (2018).

a temperatura ambiente. Esta es una diferencia fundamental respecto de procesos más tradicionales, que necesariamente han de transcurrir a altas temperaturas como condición para que se rompan los fuertes enlaces covalentes C-H que estabilizan la molécula de metano.

Otra de las fuentes deseables de energía limpia y sostenible es el hidrógeno molecular H_2 . Es evidente que su producción a gran escala tendría considerable importancia industrial, tanta que se ha llegado a hablar de la economía del hidrógeno. La fuente natural de hidrógeno más abundante no es otra que el agua de nuestro planeta. Por ello puede ser de gran relevancia que se esté desarrollando un catalizador de bajo costo que favorece la disociación de las moléculas de H_2O en sus componentes, bajo la forma molecular de H_2 y O_2 . La reacción en su forma natural es de baja eficiencia, pues desde el punto de vista termodinámico procede “cuesta arriba”, pero es posible activar el desprendimiento de los componentes comunicando energía por electrolisis. El catalizador propuesto está constituido por hierro y níquel, por lo que se clasifica como híbrido, y presenta mucho mejor rendimiento que otros ensayados anteriormente, que además resultan más costosos (Chen, Ren y col., *Nature Comm.*, **9**, art. 2551).

NUEVOS MATERIALES

Desde que se produjo el descubrimiento del grafeno, los materiales bidimensionales (“2D”) han sido objeto de numerosas investigaciones. No obstante, los métodos de preparación conocidos hasta ahora se limitan a la aplicación de unos pocos y simples métodos físicos. Ante esta situación se ha propuesto una nueva estrategia de síntesis química, que se basa en polimerizar fósforo blanco dentro de lo que se denomina un nano-reactor, constituido por un entramado de capas de un compuesto orgánico, que actúa como molde con las cavidades adecuadas (Li, Ma y col., *Chem. Sci.*, **9**, 5912-5918). Una vez lograda la polimerización, el nano-reactor se descompone mediante la acción del agua y de ultrasonidos, liberando las láminas sueltas del compuesto polifosforado, que son esencialmente bidimensionales (Figura 5). Se considera que este procedimiento puede ser modélico para preparar otros materiales 2D de forma similar.

Por lo que respecta a los nuevos materiales formados por estructuras tridimensionales (“3D”) más o menos ordenadas, su diseño y producción adolecen de que la predicción de la estructura cristalina sobre bases teóricas ha

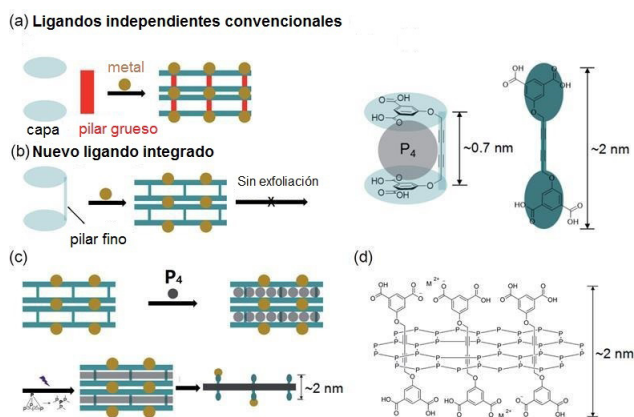


Figura 5. Síntesis de un nuevo material bidimensional (2D) organofosfórico. (a) Entramado de capas formado por ligandos independientes y nuevo ligando integrado propuesto, capaz de generar láminas 2D. (b) Estructura química del nuevo ligando. (c) Preparación del material fosforado 2D dentro del nanoreactor. (d) Estructura del nuevo material fosforado 2D, donde los M²⁺ representan iones metálicos divalentes. Según Li, Ma y col. (2018).

sido uno de los mayores desafíos para la Química del estado sólido desde hace mucho tiempo. Esta predicción se puede dividir en dos etapas principales: 1) la generación de las estructuras cristalinas que son posibles en principio, y 2) la evaluación de sus estabildades respectivas, a fin de elucidar cuáles son las más probables. Desgraciadamente, los algoritmos que se aplican a estos fines, que suelen ser de tipo cuántico, resultan muy lentos y costosos. Por ello es atractivo explorar nuevos esquemas de predicción, tales como los que se basan en el “aprendizaje profundo” procedente de las investigaciones en Inteligencia artificial. En especial, la aplicación de redes neuronales profundas ha demostrado su utilidad en el tratamiento de una amplia colección de datos cristalográficos contenidos en varios repositorios de estructuras cristalinas (Ryan, Lengyel y Shatruk, *J. Am. Chem. Soc.*, 140, 10158-10168). Utilizando datos de entrada en

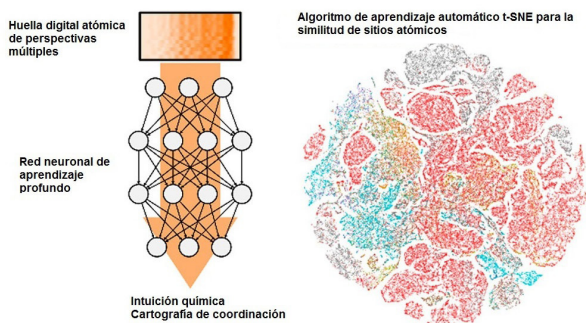


Figura 6. Esquema de la predicción de la estructura cristalina aplicando métodos de aprendizaje profundo. Los datos cristalográficos a resolución atómica de entrada se analizan mediante una red neuronal para predecir la probabilidad de nuevas estructuras. Según Ryan, Lengyel y Shatruk (2018).

la forma de huellas digitales atómicas de perspectivas múltiples, el modelo de redes neuronales puede ser entrenado para aprender a diferenciar elementos químicos, basándose en la diferente topología de sus entornos cristalográficos típicos (Figura 6). Se piensa que esta aproximación podría guiar de modo efectivo la preparación de nuevos materiales, donde abundan los sistemas que contienen tres o más elementos químicos diferentes.

NUEVAS TENDENCIAS DE LA ELECTROQUÍMICA

Dentro de las baterías recargables, las que utilizan ánodos metálicos de Li o Na en lugar del más habitual grafito se están promocionando como muy versátiles para el almacenamiento energético, debido entre otros factores a su favorable relación energía / peso, que las hace muy adecuadas para dispositivos portátiles. Desgraciadamente, durante los procesos de recarga se va produciendo la deposición del metal sobre el ánodo en forma de dendritas, con lo que se pueden producir cortocircuitos internos que generan graves riesgos de calentamiento y acortan la vida útil del dispositivo. Se ha encontrado que dicha electrodeposición se puede estabilizar adecuadamente si el transporte de iones se confina a longitudes del orden de 10² nm. Por otra parte, el crecimiento de las dendritas se minimiza recurriendo a electrolitos en estado sólido cuyos módulos elásticos sean inferiores al del metal de que se trate, frente a opiniones anteriores que apoyaban la opción contraria (Archer y col., *PNAS*, 115, 6620-6625).

Otro paso adelante en favor de la mejora de las populares baterías de Li - ion es un nuevo diseño basado en el óxido metálico Bi₂MoO₆ como material para el ánodo, en lugar del grafito. Se ha encontrado que la disposición en forma de nanoláminas presenta excelentes propiedades electroquímicas, tales como una capacidad de descarga muy notable y una prolongada estabilidad cíclica, que extiende su vida útil (Yuan y col., *NANO: Brief Reports and Reviews*, 13, 1850066).

En relación con la aplicación de las baterías de Li - ion en la industria del automóvil, existía una gran preocupación por el continuo aumento de precio del cobalto, que se debe en gran parte a la demanda de este metal como elemento de fabricación de las baterías de unos automóviles eléctricos cada vez más extendidos, sin que se sepa con exactitud cuál es la magnitud de las reservas disponibles (U.S. Geological Survey, Mineral Commodity Summaries, enero de 2018, pág. 51). Por otra

parte, existe el problema ético de que el principal productor mundial de cobalto, en una proporción cercana al 54%, es la República Democrática del Congo, donde aún se utilizan niños como mineros en la extracción del metal. En este sentido, la firma Panasonic, que es la mayor fabricante del mundo de baterías de Li - ion para automóviles, ha anunciado que está desarrollando la producción de baterías para vehículos eléctricos totalmente libres de cobalto. Esta decisión puede afectar positivamente al futuro económico de marcas de automóviles tales como Tesla, que produce varios modelos exclusivamente eléctricos para los que Panasonic es el único proveedor, por lo que su tecnología dependía críticamente hasta ahora de la disponibilidad del cobalto y de su cotización (Fortuna, Clean Technica, 17 de junio de 2018).

Por lo que respecta a otro capítulo importante de la Electroquímica, que es el relativo a la corrosión de los metales, se sabe desde hace tiempo que la protección efectiva contra la degradación ambiental de este tipo de materiales está condicionada por la integridad de la capa del óxido que los recubre y que actúa como barrera ante la difusión de sus propios átomos. Un ejemplo típico es el aluminio, en cuya superficie se forma una película protectora o pasivante de óxido que lo protege eficazmente de la corrosión en condiciones ordinarias. En este sentido, tiene mucho interés conocer con detalle el mecanismo de auto - reparación que posibilita que la capa protectora de óxido se regenere rápidamente por sí misma frente a los daños producidos por deformaciones. Con este objetivo se ha acometido un estudio directo de la formación inicial del óxido de aluminio y su propagación posterior (Xin, Li y col., *Nano Lett.*, 18, 2492-2497). En experimentos realizados sobre nanopuntas del óxido mediante microscopía electrónica de transmisión en pre-

sencia de oxígeno, se ha podido ver que este material, en la forma de capas muy finas, es capaz de adaptarse a deformaciones moderadas del aluminio metálico, fluyendo de modo similar a un líquido, sin que se produzcan fracturas. A continuación, ante deformaciones más intensas que ya exponen directamente el metal al exterior, se forman rápidamente nuevas islas de óxido, que recomponen la superficie cristalina que protege al metal de la corrosión (Figura 7).

LA QUÍMICA EN RELACIÓN CON LA ENERGÍA SOLAR

Las células fotoeléctricas que se comercializan actualmente se basan en la tecnología del silicio, que tiene sus limitaciones en cuanto al aprovechamiento óptimo de la luz solar, ya que la fracción de energía incidente que logran convertir en electricidad es como mucho del orden del 20%. Por ello se están intensificando los estudios de una próxima generación de células solares basadas en las perovskitas, ya citadas en esta misma sección en anteriores ediciones. Aunque son materiales prometedores, que pueden alcanzar una eficiencia de cerca del 30%, presentan problemas de histéresis, que se manifiestan en que su rendimiento depende de la dirección en que se mida la conversión de energía luminosa en eléctrica, por lo que su utilización es inestable en la práctica. Una posible explicación a esta anomalía es que se trata de sistemas muy dinámicos, en los que la absorción de energía produce unos movimientos de núcleos, electrones y defectos de la estructura cristalina interna que alteran de un modo muy complejo el funcionamiento global de la célula. Para desentrañar este misterio, se ha elaborado un mapa del comportamiento de este tipo de células en los dominios de espacio y de tiempo, utilizando miles de datos puntuales procedentes de experimentos con microscopía de fuerza de sonda Kelvin (KPFM) o microscopía de potencial de superficie (Weber y col., *Energy Environ. Sci.*, 11, 2404-2413). Las discrepancias que se observan en las curvas de histéresis intensidad - potencial se pueden atribuir al mayor o menor retraso con el que la célula retorna a un estado de reposo, que a su vez se explica por la formación y liberación de cargas iónicas en la interfaz de los electrodos (Figura 8).

Otra aproximación muy diferente para mejorar la eficiencia de las células solares se basa en el concepto de fisión de singletes. Se trata de incorporar materiales moleculares que sean capaces de producir 2 estados tripletes por cada fotón que absorban, superando así la tasa ha-

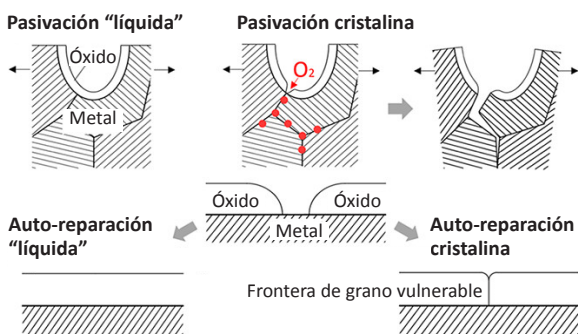


Figura 7. Una capa protectora de óxido metálico, aplicada en capas suficientemente finas, puede deformarse como si fuese un líquido, rellenando los huecos y grietas del metal subyacente a medida que se produce la formación de dicho óxido. Según Xin, Li y col. (2018).

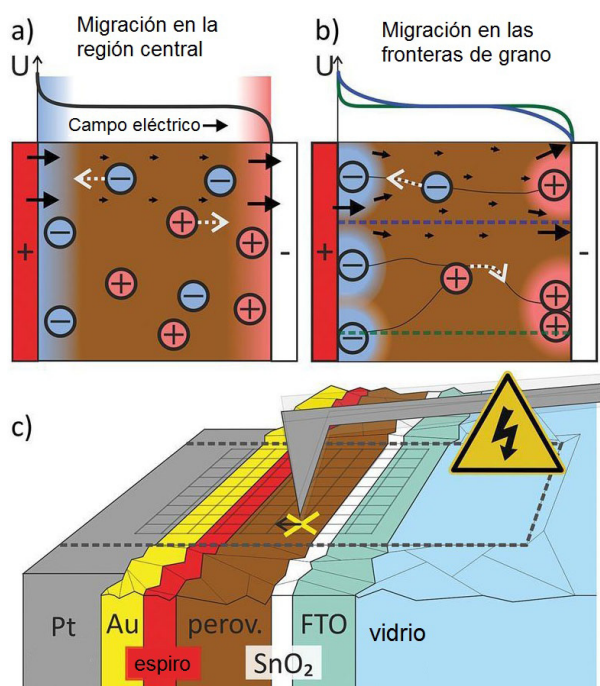


Figura 8. Esquema del potencial (U), campo eléctrico (flechas negras) y distribución iónica para diferentes recorridos de los iones móviles: (a) migración de iones en la región central de la capa de perovskita; (b) migración de iones preferente en las fronteras de grano; (c) en un experimento de KPFM resuelto en el tiempo, la respuesta a pulsos de voltaje o de luz se va registrando punto a punto para diferentes posiciones de la muestra. Abreviaturas: espiro = capa para transporte de huecos espiro - OMeTAD; FTO = electrodo de óxido de estaño dopado con flúor. Según Weber y col. (2018).

bitual de un electrón resultante de cada fotón. Muchos investigadores están estudiando los procesos fundamentales de este fenómeno con objeto de comprender los complejos mecanismos implicados. Los compuestos que se consideran más adecuados son típicamente moléculas orgánicas con tendencia a formar dímeros, por ejemplo de dos unidades de pentaceno. Este tipo de complejos puede sufrir una doble excitación electrónica para dar un único estado de más energía, que en definitiva es el responsable de la producción de energía eléctrica, mejorando así el rendimiento de los sistemas fotovoltaicos convencionales. Recientemente se ha encontrado que el proceso está favorecido por las interacciones de transferencia de carga dentro del dímero, y también resulta tanto más eficiente cuanto más fuerte sea la unión intramolecular que lo estabiliza (Guldi y col., *Chem*, 4, 935-936).

MOLÉCULAS EN EL ESPACIO EXTERIOR

Para finalizar esta breve reseña, parece obligado aludir a las investigaciones que pueden ayudar a conocer mejor

la composición química del exterior de nuestro planeta. En el momento actual se buscan activamente huellas digitales que delaten la presencia de moléculas familiares en el espacio. Una de las favoritas es el nitrógeno molecular, componente principal de nuestra atmósfera junto con el oxígeno y precursor de numerosas sustancias prebióticas. Para ello se requiere disponer de un catálogo de señales adecuadas que guíen las exploraciones que se realicen. En relación con este objetivo, se ha conseguido medir directamente, por primera vez en un laboratorio, dos líneas espectrales de esta sustancia en la forma de ion amida NH_2^- , una especie triatómica no lineal que es similar a la molécula de agua salvo por la presencia del nitrógeno en lugar del oxígeno. La técnica utilizada ha sido la espectroscopía de terahercios, que estudia las rotaciones de las moléculas en la frontera entre la región del infrarrojo lejano y la de microondas. Las líneas obtenidas, cuya frecuencia se ha podido determinar con gran precisión, pueden servir como referencia para detectar otras sustancias similares en el espacio, así como para descartar posibles asignaciones incorrectas. (Wester y col., *Physical Review Letters*, 120, 253003, 5 págs.).

Por otra parte, la misión espacial no tripulada Cassini-Huygens ha conseguido aportar pruebas por espectrometría de masas de la existencia de moléculas orgánicas en la superficie de una de las lunas de Saturno, en concreto la que recibe el nombre de Encélado. Los compuestos encontrados son relativamente complejos, con una masa molecular superior a 200 daltons, y por tanto unas 10 veces más pesados que el metano. Se han encontrado en las grietas que pueblan la superficie helada del satélite, y se cree que proceden de reacciones químicas entre la masa rocosa del interior del satélite y el agua caliente de un océano que está sumergido bajo su superficie (Postberg y col., *Nature*, 558, 564-568).

No sería extraño que estas investigaciones u otras similares pudiesen demostrar que la síntesis de compuestos orgánicos con un cierto grado de complejidad, capaces de satisfacer todos los requisitos básicos para el origen de la vida tal como la conocemos, es realmente posible en otros mundos exteriores a nuestro planeta.

Fernando Peral Fernández

Dpto. de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas