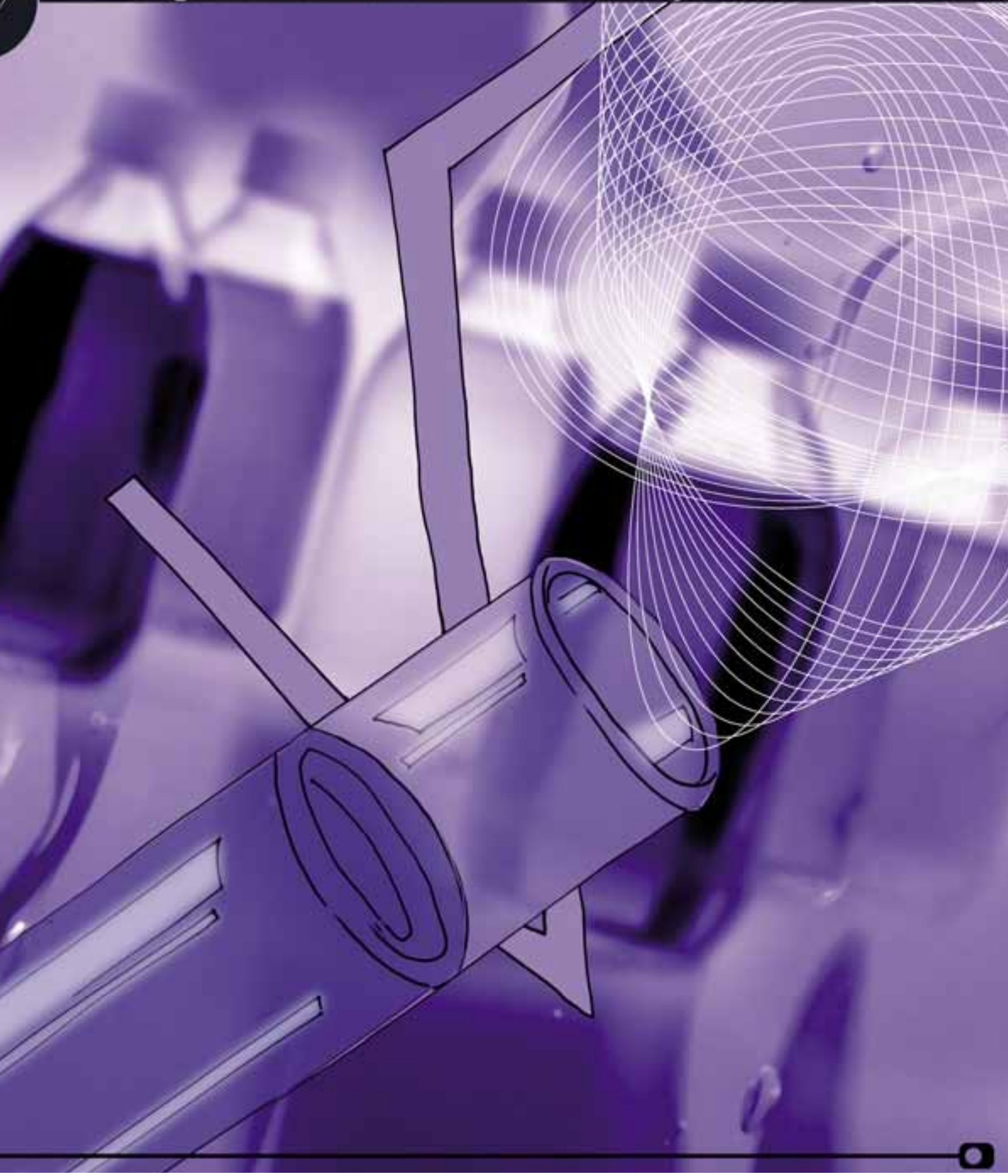




FÍSICA, QUÍMICA y MATEMÁTICAS

Investigación Científico - Técnica • Proyectos de Excelencia





EDITA
Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa.

COORDINA
Secretaría General de Universidades, Investigación y Tecnología.
Programa de Divulgación Científica de Andalucía.



ÍNDICE

• ADN, algo más que genes _____	4
• Ecuaciones contra la movilidad tumoral _____	6
• Hacia la búsqueda de contaminantes costeros _____	8
• Las partículas coloidales y sus interacciones _____	10
• Descubriendo un repertorio de materiales _____	12
• Aproximación al último eslabón de la materia _____	14
• Del quirófano a la producción industrial _____	16
• Repertorio de utilidades por un nano-tubo _____	18
• Colaboración matemática en el Mediterráneo andaluz _____	20
• Nuevos catalizadores basados en la asimetría _____	22
• Formulaciones aplicadas a terapias antitumorales _____	24
• Asesinato selectivo de células letales _____	26
• El milagro de la catálisis _____	28
• Tras las claves de la neurodegeneración _____	30
• Química de calidad en los laboratorios _____	32
• Hacia un análisis de alimentos más sostenible _____	34
• Soluciones químicas contra la contaminación _____	36
• Antioxidantes para comida procedentes de hongos _____	38
• Transversalidad del análisis matemático _____	40
• Hacia nuevos derivados de la alianza carbono-metal _____	42
• De aceituna de mesa a combatir el temible sida _____	44
• El lenguaje químico de nuestras plantas _____	46
• A propósito de los fluidos nanocompuestos _____	48
• El extraordinario poder de las fuerzas eléctricas _____	50
• Una teoría informativa para átomos y moléculas _____	52
• Biodiesel, motor de futuro _____	54
• Matemáticas teóricas hacia el caos _____	56
• Carbolinas: un universo de propiedades _____	58
• ¿Hasta dónde puede resistir la cerámica? _____	60
• Fórmulas matemáticas para prevenir riesgos _____	62



ADN, algo más que genes

“Casi todos los aspectos de la vida se organizan en el nivel molecular, y si no entendemos las moléculas nuestra comprensión de la vida misma será muy incompleta”. Estas son palabras de Francis Crick, uno de los descubridores de la estructura del ADN. Ahora, científicos de la Universidad de Sevilla estudiarán las interacciones entre ADN y distintos compuestos con vistas a numerosas aplicaciones químicas y biológicas. La Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa ha financiado la investigación con 152.200 euros.

El ADN no es sólo el vehículo transmisor de la herencia biológica. Constituye el material genético de los organismos. Es el componente químico primario de los cromosomas y el material del que los genes están formados. En las bacterias, el ADN se encuentra en el citoplasma mientras que en organismos más complejos, tales como plantas, animales y otros organismos multicelulares, la mayoría del ADN reside en el núcleo celular. Se conoce desde hace más de cien años. El ADN fue identificado inicialmente en 1868 por Friedrich Miescher, biólogo suizo, en los núcleos de las células del pus obtenidas de los vendajes quirúrgicos desechados y en el esperma del salmón. Él llamó a la sustancia nucleína, aunque no fue reconocida hasta 1943 gracias al experimento realizado por Oswald Avery.

Su función es dictar las instrucciones para fabricar un ser vivo idéntico a aquel del que proviene (o casi similar, en el caso de mezclarse con otra cadena como es el caso de la reproducción sexual). Es, desde el punto de vista fisicoquímico, un polímero cargado negativamente y flexible. Carga y flexibilidad confieren al ADN una serie de propiedades fascinantes de cuyo estudio se ocupan centenares de grupos de investigación, entre

los que se encuentra el equipo de científicos de la Universidad de Sevilla coordinado por Francisco Sánchez.

La carga negativa del ADN proviene de los grupos fosfato que contiene. Esa carga, en disolución, se compensa por la presencia de iones pequeños y positivos “pero no se neutraliza”. Debido a su carga, el ADN es capaz de concentrar en su entorno iones positivos y de repeler de él iones negativos. Ese efecto de concentración se debe, al fuerte campo eléctrico existente en su entorno. Eso le permite actuar como catalizador en reacciones entre cationes. Así, los investigadores sevillanos han conseguido acelerar cien mil veces la cinética de una reacción entre dos complejos, respecto de su valor en agua, con sólo añadir al medio trazas de ADN.

Pero el ADN no sólo interacciona con iones positivos. Como explica Francisco Sánchez, su estructura flexible y abierta le permite otros modos de interacción: puede incluir moléculas en el paso de rosca de la doble hélice o formar complejos de intercalación. Por otra parte la presencia de nitrógenos coordinantes en sus bases le permite formar compuestos de coordinación. Esto último, según señala el investigador “está



Centro

Universidad de Sevilla



Área

FQM



Código

FQM162



Nombre del proyecto

Estudio de las interacciones no covalentes del ADN con distintos ligandos: aplicaciones a la construcción de sensores de ADN y sistemas de transporte genético.



Contacto

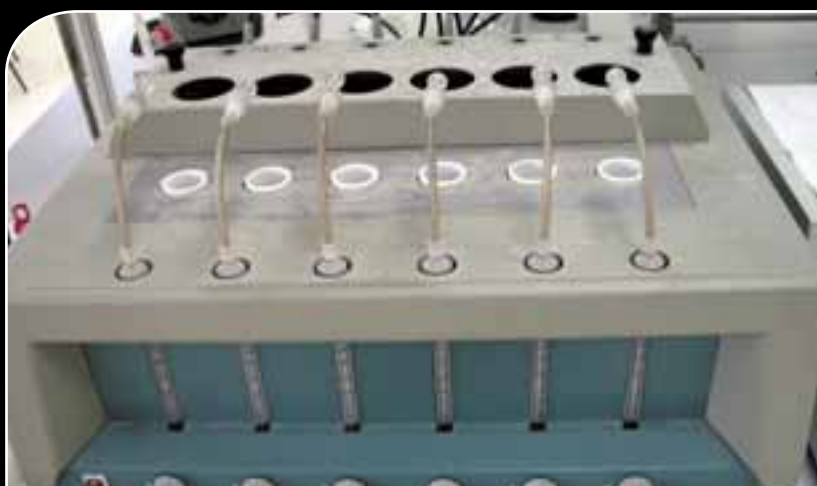
Francisco Sánchez Burgos.
Teléfono: 954 557 175
Mail: gcjrv@us.es



Dotación

152.200 euros

Una multitud de aplicaciones



Las investigaciones realizadas hasta la fecha en el campo de la genética sugieren que la complejidad del genoma humano no radica ya en el número de genes, sino en cómo parte de estos genes son usados para construir diferentes productos en un proceso que es llamado *alternative splicing*. Otra

importante razón de esta complejidad radica en el hecho de que existan miles de modificaciones químicas para fabricar proteínas así como del repertorio de mecanismos que regulan este proceso. Así, la genómica ayuda en la actualidad al diagnóstico y prevención de enfermedades, a través de pruebas

de ADN. Estos ensayos se pueden usar para el diagnóstico de enfermedades, la confirmación diagnóstica, la información del pronóstico así como del curso de la enfermedad, para confirmar la presencia de enfermedad en pacientes asintomáticos y, con variados grados de certeza, para predecir el riesgo de enfermedades futuras en personas sanas y en su descendencia. Asimismo, a través de nuestros genes podemos realizar una Intervención sobre la enfermedad. En este campo se abre una multitud de posibilidades de desarrollo de técnicas o para tratar enfermedades hereditarias. El procedimiento implica reemplazar, manipular o suplementar los genes no funcionales con genes funcionales. En esencia, la terapia génica es la introducción de genes en el ADN de una persona para tratar enfermedades.

en la raíz del efecto terapéutico del cisplatino, un potente anticancerígeno". El apilamiento de bases nitrogenadas confiere al ADN propiedades conductoras. Esto ha despertado el interés de algunos grupos que ven en él un posible conductor molecular.

En este proyecto, el grupo de investigación está interesado en el estudio de las interacciones del ADN con otras especies de pequeño tamaño. Este tipo de

estudios tiene interés en relación con la fabricación de detectores de ADN, o de otras sustancias que se basan en las modificaciones de las propiedades ópticas de esas sustancias cuando interaccionan.

Mención especial merece el estudio de las interacciones de tensioactivos con carga positiva y ADN. Estas interacciones son cooperativas, es decir, la unión de una primera molécula de tensioactivo facilita la unión de una segunda y ésta, a su vez, la de una tercera y etc. Este proceso puede provocar una inversión de carga, de forma que el supercomplejo ADN/tensioactivo puede adquirir carga positiva. El supercomplejo, así, interacciona favorablemente con las membranas celulares, negativamente cargadas, y eso las hace permeables. Eso convierte a los supercomplejos en vehículos para hacer que el ADN traspase

las membranas celulares, lo que es de interés en relación con la transfección de genes. Es de destacar que los supercomplejos son transportadores mucho más seguros que los habituales (virus). Por ello, los científicos se esfuerzan en conocer la estructura fina de las interacciones ADN/tensioactivo.

Los científicos pretenden estudiar las interacciones entre ADN y distintos ligandos orgánicos e inorgánicos. La metodología experimental supone el estudio por diversas técnicas de las interacciones ADN/ligando. Una parte esencial del proyecto tiene que ver con la síntesis de esos ligandos. Dicha síntesis es importante porque determina el tipo de interacción principal ADN/ligando. Para realizar esta parte del proyecto los investigadores cuentan con la colaboración de grupos de las Universidades de Montpellier, Pisa y Sevilla.

¿sabías que...

Un ión es un átomo o una molécula cargados eléctricamente. Los iones cargados negativamente se conocen como aniones, y los cargados positivamente, cationes. Un complejo –también llamado compuesto de coordinación– es una estructura molecular en la que un átomo o ión metálico, generalmente un catión, está rodeado por un cierto número de aniones o moléculas. Los iones o moléculas que rodean al metal se llaman ligandos.

Ecuaciones contra la movilidad tumoral

La Biomatemática, área prioritaria dentro de la Biotecnología, es el terreno de interacción entre la Biología, la Física, las Matemáticas y la Medicina. Siendo así, Juan Soler, de la Universidad de Granada, lidera un proyecto financiado con 105.900 euros que no podía dejar de plantearse en el marco de la multidisciplinariedad. Su título: "Biomat: estudio de modelos de desarrollo y movilidad celular y tumoral".



Un grupo de investigación de la Universidad de Granada lidera un proyecto de excelencia financiado por la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa con 105.900 euros dirigido a aplicar las matemáticas al estudio de los tumores y de la movilidad celular. Bajo el título 'Biomat: estudio de modelos de desarrollo y movilidad celular y tumoral', científicos granadinos, dirigidos por Juan Soler Vizcaíno, analizarán el movimiento celular y el cre-

cimiento tumoral a partir de la interacción entre la experimentación y modelos matemáticos. Esta investigación se inscribe en el campo de la Biomatemática, un área prioritaria de la Biotecnología en donde confluyen la Biología, la Física, las Matemáticas y la Medicina.

Los científicos consideran que hay un nexo común en los problemas que se plantean en el proyecto: la teoría cinética. En

Centro

Universidad de Granada

Área

Física, Química y Matemáticas

Código

FQM 1268

Nombre del proyecto

Biomat: estudio de modelos de desarrollo y movilidad celular y tumoral

Contacto

Juan Soler Vizcaino

Teléfono: 958 24 32 87

Email: jsoler@ugr.es

Dotación:

105.900 euros

¿sabías que...

En este proyecto se aúnan diversos esfuerzos de investigación refrendados en proyectos del Ministerio de Educación y Ciencia. Éstos han sido objeto de multitud de ponencias relativas a disciplinas como la Biología, la Física, las Matemáticas o la Medicina). Este amplio abanico temático tiene que ver también con tres proyectos de la Unión Europea y distintos grupos del

Plan Andaluz de Investigación. Estos equipos pertenecen a las áreas de Física, Química y Matemáticas; Recursos Naturales y Medio ambiente y Ciencia y Técnica de la Salud. En el proyecto subyace la estructura común matemática de las ecuaciones que modelan los procesos a estudiar: las ecuaciones cinéticas. Su área general es la Biomatemática, uno de los actuales 'centros de gravedad' de la Biotecnología.

un gran número de partículas biológicas que interactúan entre sí al moverse hay una estructura matemática subyacente que se sostiene por ecuaciones en derivadas parciales de transporte no lineal. Estos sistemas están interrelacionados y constituyen, en ciertos casos, la descripción de un mismo fenómeno dependiendo de la escala de observación que se emplee.

A partir de esta teoría, los científicos realizarán un estudio y modelado mediante ecuaciones cinéticas del movimiento celular, que incorporen diferentes fenomenologías, tales como concentración de sustancias químicas o interacción intercelular, entre otras. Asimismo, realizarán un análisis comparativo de modelos tumorales basados en la difusión superficial en el borde que conduce a las nuevas células tumorales hacia posiciones de mayor

espacio libre para su crecimiento.

La relevancia social del proyecto “es indudable, como pone de manifiesto el impacto social que posee cualquier tema relativo al cáncer”, subraya Soler a Andalucía Investiga. “También es un proyecto competitivo que brinda una gran oportunidad para compartir desde Andalucía la iniciativa, o incluso el liderazgo, en este innovador campo de enorme futuro”.

Asimismo, el grupo granadino se ocupará del estudio de fragmentación y coagulación de partículas biológicas, relacionados con ecología global y formación de nutrientes. Según los expertos, el primer objetivo de Biomat es crear un marco de trabajo en Biomatemáticas que constituya un referente científico internacional. Para ello, se encargará de la

formación de grupos multidisciplinares (médicos, biólogos, matemáticos y físicos) y estudiantes pre y posdoctorales. La segunda meta es establecer en paralelo un programa docente máster, doctorado o escuelas de verano, en las que ya cuentan con experiencia (como es la Escuela BIO-MAT) para formar investigadores de primer nivel.

En el campo de la Biomatemática, las líneas de trabajo requieren un criterio de máxima calidad en todas las áreas implicadas. Sólo así, los resultados podrán valorarse por las correspondientes comunidades científicas. Impulsar la investigación de excelencia desde una óptica multidisciplinar es, declara Juan Soler, “un reto posible, fascinante, rentable intelectualmente, importante para los currícula de los jóvenes, a la vez que de actualidad internacional”.

Simulador virtual de crecimiento



Cuatro son los objetivos concretos de Biomat. En primer lugar, el estudio y modelado del

movimiento celular (dinámica inducida por quimiotaxis y dinámica tumoral). Segundo, analizar

los modelos de crecimiento tumoral, con especial atención a la dinámica de la interfase tumor-tejido huésped, así como la dinámica del crecimiento de esferoides multicelulares. El tercer objetivo es obtener un simulador virtual de crecimiento de tumores sólidos. Éste incorporaría procesos como mitosis, necrosis, interacción con el sistema inmunológico o angiogénesis. Además, permitirá caracterizar la influencia de factores externos (como nutrientes o ataques químicos) sobre la dinámica del crecimiento tumoral. Por último, se modelizan los procesos de sedimentación, fragmentación o coagulación de partículas biológicas. Esto comprende aplicaciones a la dinámica celular, a aerosoles y a la teoría de polímeros gelificantes.



Hacia la búsqueda de contaminantes costeros

Los recursos pesqueros constituyen uno de los sectores económicos más importantes para Andalucía, en general, y para Huelva, en particular. En este contexto, el grupo de investigación "Análisis Medioambiental y Bioanálisis" de la Universidad de Huelva, está desarrollando un proyecto, incentivado por la Consejería de Innovación con 182.000 euros, para la búsqueda de métodos para la especiación de metales y el análisis de medicamentos en sistemas costeros de la comunidad andaluza.



Centro

Universidad de Huelva



Área

Física, Química y Matemáticas



Código

FQM 348



Nombre del proyecto



Contacto



Dotación

145.000 euros

Este proyecto de excelencia, liderado por José Luis Gómez Ariza, tiene dos partes, una de diagnóstico de la presencia de contaminantes en las áreas de producción pesquera y acuícola de Andalucía y otra de desarrollo metodológico con objeto de disponer de métodos analíticos de rutina para el seguimiento analítico posterior de la calidad de estas zonas de gran importancia económica.

Los dos grandes grupos de contaminantes que se van a estudiar son: sustancias organometálicas y productos de degradación de las mismas, que se encuentran en los sistemas marinos; y medicamentos, considerados como contaminantes emergentes, que

alcanzan los sistemas ambientales acuáticos como consecuencia de su eliminación incompleta por las depuradoras. Esto supone, como explica Gómez Ariza, "desarrollar metodologías analíticas de última generación para ver la composición química de los elementos y metales, pues su toxicidad depen-

¿sabías que...

El 80% de las sustancias que contaminan el mar tienen su origen en tierra. De las fuentes terrestres la contaminación difusa es la más importante. Incluye pequeños focos como tanques sépticos, coches, camiones, etc. y otros mayores como granjas, tierras de cultivo, bosques, etc. Los accidentes marítimos son responsables de alrededor de un 5% de los hidrocarburos vertidos en el mar.

Experiencia previa

En el trabajo de búsqueda de métodos analíticos para diferenciar entre las formas tóxicas y no tóxicas de elementos como el mercurio, selenio, estaño o arsénico, el grupo de la Universidad de Huelva 'Análisis medioambiental y Bioanálisis' cuenta con una gran experiencia previa. Como explica el responsable de trabajo del centro onubense, "llevamos años en ello pero ahora queremos adaptarlos y perfeccionarlos para aplicarlos al problema de los recursos pesqueros y la ingesta". El objetivo del proyecto es también confeccionar una base de datos al respecto, que proporcione a los responsables la información que precisan en el desarrollo de normativas futuras, así como herramientas analíticas para su control y ejecución.

www.sciencepics.org



de de la forma química en la que se encuentran". Estas nuevas metodologías analíticas van a permitir distinguir entre formas tóxicas y no tóxicas de elementos como estaño, arsénico, selenio o mercurio. Pero sobre todo nos van a dar a conocer su presencia en los recursos pesqueros de nuestra región, y en última instancia evaluar la ingesta que el consumidor medio puede recibir, ya que el estudio pretende también abordar los productos de consumo de origen marino que finalmente llegan a nuestros mercados.

Hasta ahora, las metodologías empleadas permiten analizar la presencia de elementos, es decir, te dicen si hay mercurio o arsénico pero, en palabras de Ariza, "desde hace ya muchos años la información que proporcionan estos análisis ya no es suficiente, ahora necesitamos métodos de especiación que nos den una información más detallada, ya que

elementos tóxicos como el arsénico se vuelven inocuos cuando el metabolismo de los bivalvos o los peces lo convierten en un arsenoaminoácido. En definitiva, esta metodología pretende ver qué metales y elementos químicos pueden ser esenciales o tóxicos en su forma química.

La otra parte de este proyecto se orienta al estudio de los medicamentos o compuestos emergentes. Un tema de mucha actualidad debido a la prioridad marcada por la Comunidad Europea, que pretende analizar los medicamentos que, generados a través de nuestro uso, llegan al Medio Ambiente y pueden resultar perjudiciales.

A este respecto, ya que se trata de compuestos cuya presencia no se había previsto, las depuradoras no suelen estar preparadas para su eliminación, por lo que pueden encontrarse en nuestros ríos y en el litoral. Además, algu-

nas industrias relacionadas con la pesca, principalmente piscifactorías, usan principios activos que garantizan la calidad sanitaria de su producción, que representa un aporte de antibióticos, antiparasitarios y otros medicamentos que puede estar en el alimento o alcanzar los medios acuáticos y finalmente a los consumidores.

Además se trata de estudiar ciertos contaminantes emergentes, no incluidos ni reconocidos aún por normativas, "pero que están ahí", afirma el investigador y hay que identificarlos y proporcionar metodología que sirva al legislador. El problema se complica porque el desarrollo y aplicación de estas nuevas metodologías analíticas se hace en un medio complejo como es nuestro entorno litoral, y éste es el reto que se ha marcado este grupo de investigación del Departamento de Química y Ciencias de los Materiales de la Onubense.



Las partículas coloidales y sus interacciones

Las interacciones que se dan entre partículas de naturaleza coloidal y las estructuras que éstas forman en 2 y 3 dimensiones determinan sus propiedades físicas. Científicos de la Universidad de Granada pretenden conocer mejor estas interacciones para la optimización tecnológica de los liposomas, proteínas

y coloides poliméricos. Los resultados obtenidos se podrán aplicar en agroalimentación, por ejemplo, para estabilizar la composición de los alimentos funcionales. Otros ámbitos de aplicación pueden ser las industrias farmacéuticas y cosméticas. La investigación ha recibido una subvención de 154.800 euros de la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa.

Investigadores del Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Granada estudiarán los sistemas coloidales, es decir, aquellos formados por partículas con tendencia espontánea a agregar o formar coágulos. Los expertos analizarán diferentes modelos donde se dan este tipo de reacciones como los lípidos, las proteínas o los coloides poliméricos, es decir, aquellos comprendidos entre unos pocos nanómetros y una micra, que se utilizan para hacer pinturas, adhesivos o pruebas de diagnóstico. El interés del estudio estriba en que las interacciones propias de estas partículas definen sus características físicas y pueden aplicarse en distintos ámbitos, desde la estabilización de alimentos funcionales, hasta la espuma de la cerveza.

Los investigadores esperan obtener una correcta cuantificación de las interacciones directas e indirectas, así como de la distribución iónica que rodea a las interfaces cargadas, para poder establecer los mecanismos de estabilidad y adsorción de este tipo de partículas. En el caso de los liposomas, las vesículas lipídicas,

es decir, estructuras cerradas y huecas formadas por los lípidos, pueden considerarse como sistemas coloidales modelo porque en su síntesis pueden controlarse el tamaño de partícula, la carga superficial y la rigidez de las bicapas lipídicas.

Los liposomas tienen un índice de refracción y una densidad similar a la del agua, lo que hace posible el estudio óptico de dispersiones más concentradas que en el caso de otros sistemas coloidales sin sedimentación. Sin embargo, el proceso mediante el cual las vesículas fusionan presenta aún numerosas incógnitas e interrogantes que intentarán desvelar los investigadores granadinos.

También las emulsiones y espumas representan sistemas coloidales cuya estabilidad depende del comportamiento de las dos fases (agua-aceite o aire-agua) de los diferentes agentes tensioactivos o emulsionantes que las constituyen. Por esta razón, un conocimiento profundo de cómo se comportan estos emulsionantes en las interfaces fluidas, aire-agua y aceite-agua, es fundamental



	Centro
	Universidad de Granada
	Área
	Física, Química y Matemáticas
	Código
	01001 10011 FQM 392
	Nombre del proyecto
	Estructura y propiedades de sistemas coloidales en 2- y 3-D
	Contacto
	Roque Hidalgo Álvarez Teléfono: 958 24 32 13 e-mail: rhidalgo@ugr.es
	Dotación
	154.800 euros

Efectos específicos de los iones



Otro de los apartados de la investigación que realiza el grupo andaluz está relacionado con los iones. Los efectos específicos que producen los iones sobre numerosas interfaces sólido/líquido suelen conocerse como fenómenos Hofmeister. Éstos surgen de la interacción específica de ciertos iones con el agua. Como consecuencia, la estructura molecular del agua

cambia dependiendo de la naturaleza del electrolito utilizado. Los expertos intentarán dilucidar el origen de estos efectos específicos. Recientemente se ha puesto de manifiesto que los efectos Hofmeister también afectan a diversas propiedades típicas de los sistemas coloidales como son su estabilidad o su comportamiento electrocinético. La investigación realizada hasta ahora sugiere que

la modificación de la estructura del agua debido a la interacción de los diversos iones y el tipo de superficie empleada, son la clave para resolver el problema. El objetivo de la investigación de los expertos granadinos es estudiar cómo la naturaleza de diversos iones localizados en diferentes posiciones de la serie de Hofmeister afectan de forma específica a los sistemas coloidales. La espuma es una capa de líquido globular enclaustrando vapor o gas. Las espumas son como las emulsiones en que capas se adsorben rodeando la fase dispersa en ambos sistemas. Las espumas difieren de las emulsiones en dos aspectos: la fase dispersa es un gas en las espumas y un líquido en las emulsiones; las burbujas de gas de las espumas son mucho más grandes que los glóbulos en las emulsiones. Las espumas son sistemas coloidales por la delgadez de las capas que rodean las burbujas de gas son de dimensiones coloidales o las capas tienen propiedades coloidales.

para entender los mecanismos de estabilización y desestabilización de espumas y emulsiones, respectivamente. Estas emulsiones son, por ejemplo, los alimentos funcionales, precocinados e infantiles, además de salsas, productos lácteos y mahonesas, entre otros. Se caracterizan por una naturaleza coloidal muy inestable, al estar formadas por dos fases inmiscibles, es decir, el agua y el aceite que los componen no se mezclan.

En el caso de los alimentos funcionales, cuando se incluye una sustancia beneficiosa para la salud en el preparado alimentario como por ejemplo, ácidos omega-3,

éstos pueden interaccionar con otros componentes estropeando el producto final. Este hecho hace necesario diseñar estrategias que eviten ciertas interacciones entre las distintas sustancias de los alimentos funcionales, para que, al enriquecer un alimento, no se produzcan resultados indeseados. Por ejemplo, añadir calcio a la leche puede provocar interacciones adversas que provoquen la coagulación del líquido. De ahí, el gran interés tecnológico de la utilización de proteínas como emulsionantes en agroalimentación, además de las aplicaciones para las industrias farmacéuticas y cosméticas, así como en diversas aplicaciones biomédicas.

¿sabías que...

La dispersión coloidal es un sistema físico compuesto por dos fases: una continua, normalmente fluida, y otra dispersa en forma de partículas, por lo general sólidas, de tamaño mesoscópico (es decir, a medio camino entre los mundos macroscópico y microscópico). Así, se trata de partículas que no son apreciables a simple vista, pero mucho más grandes que cualquier molécula. En particular, la comunidad científica define la escala mesoscópica como la situada entre unos 10 nanómetros y 1 micrómetro.

El nombre coloide fue introducido por el físico escocés Thomas Graham en 1861 y proviene de la raíz griega kolas que significa "que puede pegarse". Este nombre hace referencia a una de las principales propiedades de los coloides: su tendencia espontánea a agregar o formar coágulos.



Descubriendo un repertorio de materiales

En el ámbito de los materiales, no todo está inventado. Científicos de la Universidad de Granada pretenden obtener nuevos compuestos a escala macroscópica y nanoscópica con propiedades de interés para aplicaciones prácticas. Estos materiales servirían para almacenar de forma segura cantidades importantes de gases combustibles de bajo impacto ambiental o como nanoreactores donde construir materiales metálicos. Además, los expertos buscan materiales con propiedades magnéticas más versátiles que los imanes clásicos. Todas estas facetas se abordarán en un proyecto subvencionado con 155.380 euros por la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa.

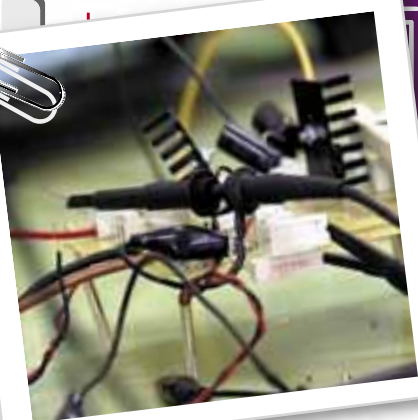


Investigadores del Departamento Química Inorgánica de la Universidad de Granada buscan materiales que se puedan aplicar a multitud de ámbitos, desde contenedores de gases a nuevos imanes con propiedades más versátiles que los tradicionales. Los expertos centrarán una de sus líneas de investigación en la obtención de macromoléculas de coordinación para el almacenamiento de gases de bajo impacto ambiental.

El poder disponer de materiales capaces de almacenar de forma segura cantidades importantes de gases de bajo impacto ambiental (hidrógeno y gas natural)

contribuiría a facilitar el uso de estos combustibles de forma extensiva. Este proceso supondría una disminución de la emisión de gases con efecto invernadero y partículas.

El almacenaje de estos gases combustibles contribuiría a una importante mejora de la calidad de vida, sobre todo en núcleos urbanos densamente poblados. En este sentido, los investigadores cuentan ya con algunos avances, que han sido publicados en revistas científicas de reconocido prestigio internacional como *Journal of American Chemical Society* e *Inorganic Chemistry*, donde describen la sín-



Centro

Universidad de Granada



Área

Física, Química y Matemáticas



Código

FQM 425



Nombre del proyecto

Nuevos materiales metalorgánicos multidisciplinares y nanoscópicos con funcionalidad magnética y receptora. Efecto de la agregación en sus propiedades



Contacto

Juan M. Salas Peregrín
Teléfono: 958 24 85 25
e-mail: jsalas@ugr.es



Dotación:

155.380 euros

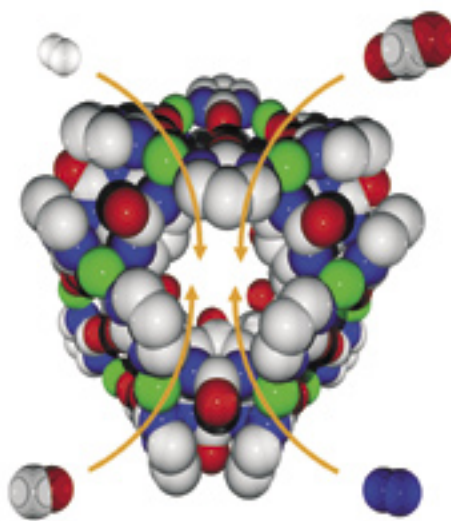
tesis y caracterización mediante técnicas de rayos X. Han desarrollado una serie de polímeros –macromoléculas- microporosos capaces de retener importantes cantidades de diferentes gases. Estos nuevos materiales presentan estructuras tipo zeolita, en cuyos canales quedan atrapados los gases, que se pueden liberar posteriormente para su uso en motores eléctricos de pilas de combustible o de combustión, disminuyendo la presión.

Otra aplicación que pueden encontrar estos nuevos materiales, debido a su estructura porosa, es la de actuar como tamices moleculares, separando gases en función de su volumen molecular.

Los expertos centran también sus esfuerzos en la preparación de nanopartículas metálicas, es decir, aquellas con tamaño inferior a la millonésima parte de un milímetro. Las propiedades de los materiales son tremendamente dependientes de su tamaño, de tal forma que modificando únicamente las dimensiones de la partícula se puede hacer que el material posea propiedades drásticamente diferentes. Así, se puede modificar un material de diamagnético a ferromagnético, de conductor a semiconductor, o cambiar su coloración de blanco a negro.

Los científicos granadinos desarrollan un método de preparación de nanopartículas metálicas en el que usan la cavidad de una proteína como nanoreactor donde construir materiales metálicos. Se trata de la apoferritina, la principal proteína almacenadora de hierro en los vertebrados, que es capaz de absorber grandes cantidades de hierro

Nuevos materiales magnéticos



Otra de las líneas de investigación que los expertos de la Universidad de Granada desarrollan en el proyecto consiste en aprovechar las posibilidades que ofrece la Química Molecular, tanto orgánica como inorgánica, para diseñar, preparar y caracterizar nuevos materiales moleculares funcionales. Estos se basan en compuestos de coordinación polinucleares ensamblados en estructuras organizadas y con propiedades físicas y químicas predeterminadas. Es el caso de los materiales magnéticos moleculares (imanes moleculares), materiales híbridos, en los que coexis-

tan propiedades magnéticas y eléctricas, así como materiales porosos que puedan presentar propiedades magnéticas. Los expertos no pretenden sustituir a los imanes clásicos o a las zeolitas, sino obtener materiales más versátiles que puedan presentar nuevas propiedades físicas. Los imanes monomoleculares son sistemas en los que se puede obtener magnetización permanente e histeresis magnética (normalmente, a temperaturas extremadamente bajas), no a través de un ordenamiento magnético tridimensional, sino por un fenómeno puramente monomolecular.

¿sabías que...

Las zeolitas están constituidas por aluminio, silicio, hidrógeno, oxígeno, y un número variable de moléculas de agua. Tienen varios usos. En agricultura, se utilizan como fertilizante; en acuicultura, se utilizan como un ablandador de aguas (intercambiador iónico); en alimentación de ganados, se utiliza como suplemento alimenticio, pues los hace aprovechar más la comida. Su estructura cristalina está formada por tetraedros que se unen dando lugar a una red tridimensional, en la que cada oxígeno es compartido por dos átomos de silicio, formando así parte de los minerales tectosilicatos. Tiene poros de dimensiones moleculares, por las cuales pasa agua.

biodisponible, transformándose en Ferritina, una nanopartícula metálica natural.

El tamaño de partícula de estos materiales está por tanto limitado al de la propia cavidad proteica, de alrededor de ocho nanómetros. La preparación de estos materiales inferiores a la millonésima parte de un milímetro permitiría llevar a cabo un estudio comparativo de sus propiedades a escala clásica y nanométrica. Según los investigadores, estos estudios arrojarían más luz sobre “el intrigante mundo nano”.



Aproximación al último eslabón de la materia

Uno de los mayores hitos científicos del siglo pasado fue el establecimiento del modelo estándar de Física de Partículas, que describe la naturaleza a las escalas más pequeñas hasta ahora exploradas. De estas partículas está todavía por descubrir el bosón de Higgs, debido a su masa relativamente grande. Por ello, un grupo de la Universidad de Granada desarrolla un proyecto de excelencia dotado con 195.000 euros que estudia el modelo estándar a las energías accesibles, y en la medida de los parámetros que determinan la física de las partículas que se acoplan débilmente.



Centro

Universidad de Granada



Nombre del proyecto

Física de partículas elementales: teoría y experimento



Área

Física, Química y Matemáticas



Contacto

Francisco del Águila Jiménez

Teléfono: 958 24 32 05

e-mail: faguila@goliat.ugr.es



Código

FQM 437



Dotación

195.000 euros

El bosón de Higgs es una partícula elemental hipotética cuya existencia está predicha por el Modelo Estándar de Física de Partículas. Se cree que este bosón juega un rol fundamental: según este modelo es un componente del campo Higgs, el cual se cree permea el Universo y da masa a las demás partículas, incluyéndose a sí misma.

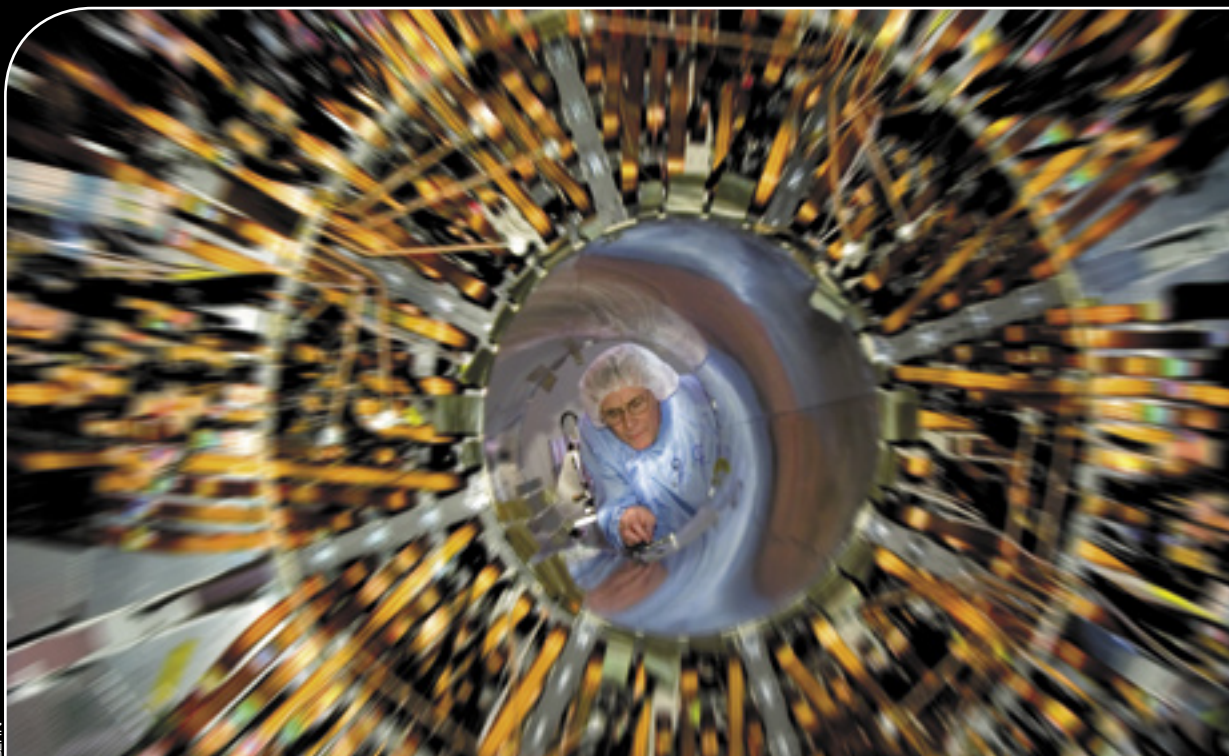
Hasta el año 2005, ningún experimento ha detectado la existencia del bosón de Higgs (el último intento fue en noviembre de 2005 en el CERN), pero a poco más de un año para que se inicen los trabajos, más de 7.000 científicos internacionales

preparan este experimento en el Gran Acelerador de Hadrones (LHC) en el CERN. El objetivo, descubrir el mecanismo alternativo que explique la rotura de simetría observada en el bosón de Higgs. Por ello, se han calculado gran parte de las predicciones de ese modelo "con la precisión experimental esperada y se han propuesto alternativas para el caso en que se observen efectos inesperados". El mecanismo de Higgs, ideado por Peter Higgs, es uno de los mecanismos posibles para producir la ruptura espontánea de simetría electrodébil sin destruir la invariancia gauge de la teoría. La extensión más popular del Modelo Están-

dar es el Modelo Supersimétrico Estándar Mínimo, que explica la estabilidad de la escala electrodébil y predice un sector de Higgs con más escalares. En cualquier caso, supersimétrico o no, el modelo mínimo debe extenderse para describir las oscilaciones de neutrinos medidas. Este campo de investigación es muy activo actualmente, tanto teórica como experimentalmente.

El Modelo Estándar también describe las interacciones fuertes, siendo posible realizar cálculos perturbativos a alta energía. Este área, que es en particular fundamental para entender

Una inauguración más que esperada



CERN

Fundado en 1954 por 12 países europeos, el CERN es hoy en día un modelo de colaboración científica internacional y uno de los centros de investigación más importantes en el mundo. Actualmente cuenta con 20 estados miembros, los cuales comparten el financiamiento y toma de decisiones en la organización. Aparte de éstos, otros

28 países no miembros participan con científicos de 220 institutos y universidades en proyectos en el CERN utilizando las instalaciones. De estos países no miembros, ocho estados y organizaciones tienen calidad de observadoras, participando en las reuniones del consejo. El primer gran éxito científico del CERN se produjo en 1984 cuando Carlo Rubbia y

Simón Van der Meer obtuvieron el Premio Nobel de Física por el descubrimiento de los bosones W y Z. En 1992 le tocó el turno a Georges Charpak "por la invención y el desarrollo de detectores de partículas, en particular la cámara proporcional multihilo", un tipo muy importante de detector de partículas.

las reacciones de dispersión en grandes aceleradores, es a su vez un campo muy activo de investigación, tanto en los aspectos perturbativos como en los no perturbativos. Por ello, dispone de líneas de investigación abiertas en todos estos campos.

El proyecto se enmarca dentro de las colaboraciones internacionales, y en particular europeas, a que han dado lugar estos estudios. Así, el grupo de la Universidad de Granada participa activamente en las redes europeas de 'Física en grandes colisionadores' compuesta por casi

200 físicos de más de 10 países, 'Teorías efectivas de colores y sabores' con unos 160 investigadores, y en la colaboración internacional ICARUS para el estudio de la física de neutrinos. Este nuevo proyecto se añade a la actividad de numerosos grupos españoles de más de 20 instituciones financiados por el Plan Nacional de Física de Partículas. Este esfuerzo nacional también aprovecha y se visualiza a través de la participación española en grandes instalaciones como el CERN, DESY, GSI, GANIL, Gran Sasso o el Laboratorio Subterráneo de Canfranc, entre otras.

¿sabías que...

EL bosón de Higgs fue predicho por primera vez en la década de 1960 por el físico británico Peter Higgs, e independientemente por otros. En el Modelo Estándar, el campo Higgs consiste en dos sub-campos neutros y uno cargado. Un sub-campo neutro y el cargado son bosones de Goldstone, que carecen de masa. El otro componente neutro tiene un cuanto que es el bosón de Higgs, el cual tiene masa no-nula. El bosón de Higgs mismo tiene una masa característica. Hasta el año 2005, la mejor aproximación para esta masa es 91 GeV, con un límite superior teórico de 186 GeV.



Del quirófano a la producción industrial

La 'deposición estructurada asistida por luz' es una reciente técnica desarrollada en la Universidad de Cádiz (UCA). El equipo de científicos comandado por Juan María González Leal pone otro lazo en el futurista edificio de los láser de alta energía. La holografía, la óptica cuántica, el registro óptico, la producción industrial o las tecnologías de la medicina pueden beneficiarse de estos avances. El proyecto, "Elementos ópticos esféricos para uso en el infrarrojo", se financiará con 205.840 euros.



Centro

Universidad de Cádiz



Área

Física, Química y Matemáticas



01001
10011

Código

FQM 645



Nombre del proyecto

Elementos ópticos esféricos para uso en el infrarrojo



Contacto

Juan María González Leal

Teléfono:

e-mail:



Dotación

205.840 euros

La producción de fuentes láser de altas energías ha experimentado en los últimos años un fuerte desarrollo tecnológico. Tanto continuas como pulsadas, el impulso de dichas energías ha dado lugar a la observación de fenómenos físicos intrigantes relacionados con la interacción luz-materia. En regímenes de alta densidad de energía, esta interacción produce múltiples fenómenos que aparecen como bases potenciales para el desarrollo de tecnologías futuras.

La exploración de estos hechos está tan sólo en sus comienzos más tempranos. Algunos de ellos remiten a términos tan variados como ablación, confinamiento y guía de partículas, enfriamiento atómico o generación de condensados Bose-Einstein, o la producción de electrones y pro-

tones relativistas. Otro campo tan sugerente para los científicos es el control del orden estructural de la materia, por su enorme atractivo científico y tecnológico. Aquí entra en juego una conocida disciplina que ha emergido hace poco con el nombre de 'Nanotecnología'. La generación de estructuras a escala nanométrica guarda dos buenos ejemplos, bien en forma de elementos individuales (nanopartículas, nanohilos, nanotubos), o en forma de patrones registrados en un medio material (dispositivos fotónicos).

Fenómenos como la auto-organización observada en la estructura de ciertos materiales, y la identificación de diferentes regímenes en el orden estructural de los sólidos amorfos, resultan cuestiones científicas muy intrigantes. Pero además, sugieren la posibilidad

¿sabías que...

El Proyecto es relevante múltiples áreas de investigación: Espacio y Aeronáutica, Biotecnología, Tecnología de la Información y las Comunicaciones, Construcción, Nuevos Materiales y Domótica, Nanotecnología, Maquinaria y Procesos de Producción y Diseño Industrial. "Elementos ópticos esféricos para uso en el infrarrojo" sigue el plan diseñado por el Grupo en los últimos años. La directriz principal ha sido

orientar gradualmente parte de los esfuerzos investigadores hacia intereses tecnológicos. Esto permite complementar la tradición en investigación básica que lo ha caracterizado desde sus comienzos. Uno de los objetivos prioritarios que se persiguen durante su desarrollo será la transferencia de los resultados tecnológicos a la Industria, preferentemente a PYMES locales de base tecnológica relacionadas con el mecanizado de precisión.

de controlar la matriz de un material para fabricar dispositivos con funcionalidades a diferentes escalas de longitudes de onda.

Todas estas ideas constituyen los pilares que cimentarán la línea de investigación multidisciplinar que el equipo de la UCA se propone acometer. El proyecto de investigación propone una nueva vía para la fabricación de elementos ópticos innovadores. Sus características refractivas y difractivas podrían servir de soporte a tecnologías emergentes de gran actualidad.

Este camino se basa en una técnica original de deposición estructurada asistida por luz, desarrollada recientemente por el equipo. Ésta proporciona, además, un marco experimental adecuado para estudiar el control del orden estructural de los materiales amorfos, asistido por luz. Se prevé que el Proyecto arroje resultados científicos de impacto que atraigan a la comunidad científica. Asimismo, se prevé obtener

resultados comercialmente sensibles que puedan ser transferidos a la Industria.

No estamos hablando de profesías, sino de hechos constatados. Los investigadores de la Universidad gaditana ya han demostrado en sus laboratorios cómo se pueden fabricar con bajo coste elementos ópticos esféricos. Éstos pueden resultar muy interesantes para aplicarlos a tecnologías como el corte láser (industrial o quirúrgico), sistemas de manipulación óptica de partículas, sistemas metrológicos, microscopía confocal y sistemas ópticos de reproducción de objetos en 3D.

El proyecto participa de intereses científicos de rabiosa actualidad en varios campos de investigación. Las disciplinas más relevantes tienen que ver con láseres de alta energía, holografía, óptica difractiva, óptica cuántica, plasmas, ondas de materia, semiconductores amorfos, orden estructural, medios de registro óptico, siste-

mas de producción industrial, tecnologías médicas y confinamiento óptico.

El Grupo Propiedades Físicas de Sólidos Amorfos (PAI FQM154) ha aportado más de 200 artículos en revistas científicas de gran prestigio. En este tiempo, el equipamiento científico del Grupo se ha ido completando a través de fondos nacionales y europeos, a la vista de los resultados conseguidos. Recientemente, el Grupo ha participado como socio en la creación del Instituto de Microscopía Electrónica y Materiales, vinculado a la Universidad de Cádiz. Financiado inicialmente con Fondos Europeos de Desarrollo Regional (FEDER), los investigadores han conseguido fondos por valor de unos 120.000 euros para dotar al Instituto de un laboratorio de holografía e interferometría, del que el grupo es responsable. Este equipo investiga sobre todo las propiedades estructurales, ópticas, mecánicas y calorimétricas de los vidrios calcogenuros.

Un invento de múltiples aplicaciones

Un láser (del inglés laser, acrónimo de Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation ('Amplificación de Luz por Emisión Estimulada de Radiación'), es un dispositivo que utiliza un efecto de la mecánica cuántica, la emisión inducida o estimulada, para generar un haz de luz coherente de un medio adecuado y con el tamaño, la forma y la pureza controlados. Cuando se inventó en 1960, se denominaron como "una solución buscando un problema a resolver". Desde entonces se han vuelto omnipresentes, se pueden encontrar en miles de aplicaciones muy variadas en cualquier sector de la sociedad moderna. Esto incluye campos como la electrónica de consumo, las tecnologías de la información (informática), ciencia,



www.eurobsc.org

medicina, el sector industrial y militar. En varias aplicaciones, los beneficios de los láseres se deben a sus propiedades físicas como la coherencia, la alta monocromaticidad y la capacidad de alcanzar potencias extremadamente altas. A modo de ejemplo, un haz láser altamente coherente puede ser enfocado por debajo de su límite de difracción que, a longitudes de onda visibles, corresponde solamente a unos pocos nanómetros. Esta propiedad permite al láser grabar gigabytes de información en las microscópicas cavidades de un DVD o CD. También permite a un láser de media o baja potencia alcanzar intensidades muy altas y usarlo para cortar, quemar o incluso vaporizar materiales.



Repertorio de utilidades por un nano-tubo

Uno de los proyectos de excelencia concedidos a la Universidad granadina se centra en el estudio teórico de los nanotubos con defectos, que pueden ser de tipo geométrico o químico. En concreto, se pretende estudiar los cambios en la estructura electrónica que pueden afectar a la conductividad eléctrica a través de ellos. José Antonio Dobado es el responsable de "Fenómenos de transporte en uniones de múltiples nanotubos gráficos", dotado con 195.000 euros.



Los nanotubos gráficos son estructuras tubulares de carbono de diámetro nanométrico. Esta dimensión significa cien mil veces más finos que un cabello, pero pueden tener una longitud de más de mil veces su diámetro. Debido al reducido tamaño, sus estados electrónicos se agrupan en bandas, de tal manera que pueden comportarse como cables conductores o semiconductores, según su geometría.

Generalmente, los nanotubos no contienen defectos, por lo que los electrones tienen una gran facilidad para desplazarse y por ello muestran una conductividad muy alta. Sin embargo, las ano-

malías aparecen esporádicamente, lo que altera el modo en que los electrones se mueven. Esto, aparte de hacer que los electrones colisionen, hace que el nanotubo sea diferente a ambos lados del defecto.

Así, los defectos constituyen una interfase entre dos nanotubos distintos, por lo que este tipo de estructuras recibe el nombre de heterouniones. Existen muchas heterouniones diferentes, que se caracterizan por la posición relativa de los anillos no hexagonales. La presencia de estos anillos hace que la conductividad de toda la estructura sea asimétrica, y que puedan tener una utilidad prac-



Centro

Universidad de Granada



Área

Física, Química y
Matemáticas



Código

01001
10011
FQM 425



Nombre del proyecto

Fenómenos de transporte
en uniones de múltiples
nanotubos gráficos



Contacto

José Antonio Dobado
Jiménez
Teléfono:
e-mail:



Dotación:

195.000 euros

tica en Nanoelectrónica. Tanto la teoría como los experimentos llevados a cabo han demostrado que, para algunos de los nanotubos con defectos geométricos, la conductividad eléctrica es similar a la de los diodos convencionales. Pueden, por tanto, usarse en dispositivos electrónicos de tamaño mucho mas reducido que los actuales, y con menor consumo energético.

Debido al gran número de posibles conexiones diferentes, existen estudios puntuales sobre varias uniones específicas. Sin embargo, no se puede afirmar que se conozca el comportamiento de todos los tipos de heterouniones. De hecho, en los estudios experimentales es imposible saber con precisión qué nanotubos están conectados entre sí. Por otra parte, los estudios teóricos son escasos, y la mayoría se centran en estructuras con geometría sencilla.

Esto último ha podido deberse a que la construcción teórica de heterouniones no triviales ha sido hasta hace poco una tarea compleja y artesanal. Sin embargo, la aparición del programa informático CoNTub, ha hecho de este paso un proceso simple y automatizable. CoNTub se ha desarrollado en el Grupo de Modelización y Diseño Molecular de la UGR.

Teniendo en cuenta todo lo anterior, el principal objetivo consiste en la caracterización físico-química de nanotubos con defectos geométricos y químicos. Los defectos geométricos generan un cambio perceptible en la forma macroscópica del nanotubo, visible en un doblez de la estructura. Los defectos químicos consisten en inserciones de grupos funcio-

nales en la estructura, o incluso vacantes. Los defectos de tipo químico no alteran substancialmente la geometría global de la estructura, aunque si pueden variar su estructura electrónica.

La investigación consta de dos apartados. El primero consiste en caracterizar los parámetros físico-químicos que afectan a las propiedades de conducción de heterouniones de nanotubos. El segundo supone la determinación estructural teórica de las diferentes familias de estructuras compuestas por nanotubos con defectos.

¿sabías que...

El apartado inicial de la investigación caracterizará los parámetros físico-químicos que afectan a las propiedades de conducción de las heterouniones de nanotubos. Para ello, se identificarán los parámetros ligados a la conductividad electrónica. Esto implica realizar cálculos mecanocuánticos orientados a estudiar el efecto de los defectos geométricos sobre determinadas variables. Éstas son la distribución local de la aromaticidad extendida, la dependencia de la funcionalización química con la posición relativa a los defectos geométricos y el efecto de la funcionalización en la distribución local de la aromaticidad extendida para este tipo de estructuras.

CoNTub, software 'made in Granada'



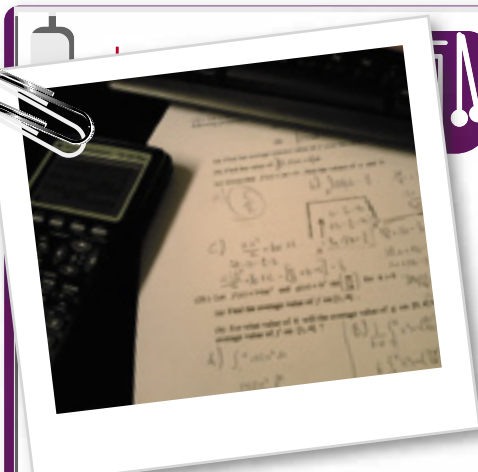
Un segundo momento del proyecto es la determinación estructural teórica de las diferentes familias de estructuras compuestas por nanotubos con defectos. Con esto se pretende desarrollar un conjunto de herramientas de análisis geométrico. Dichas herramientas son necesarias para clasificar las estructuras optimizadas de heterouniones de nanotubos. Esto permitirá la creación de una librería y base de datos de geometrías basa-

das en nanotubos. Además, se persigue ampliar las funcionalidades de CoNTub, el programa informático desarrollado en el Grupo de Modelización y Diseño Molecular de la Universidad de Granada. Esta ampliación de funciones permitirá obtener estructuras a partir de datos generales. Ejemplos de estos parámetros son los índices de los tubos participantes, los ángulos entre tubos, la tensión de los tubos participantes, etc.



Colaboración matemática en el Mediterráneo andaluz

El profesor Ángel Rodríguez, de la Universidad de Granada, supervisará 'Aproximación algebraico-analítica de los sistemas no-asociativos y sus aplicaciones'. Con este proyecto de excelencia se pone en marcha un trabajo conjunto en materia de Álgebra y Análisis que pone a trabajar juntos a investigadores de nuestras cuatro provincias mediterráneas. La iniciativa contará con recursos por valor de 120.400 euros.



	Centro Universidad de Granada
	Área Física, Química y Matemáticas
	Código FQM 1215
	Nombre del proyecto Aproximación algebraico-analítica de los sistemas no-asociativos y sus aplicaciones
	Contacto Ángel Rodríguez Palacios Teléfono: 958 243276 e-mail: apalacio@ugr.es
	Dotación: 120.400 euros



La naturaleza de este proyecto es multidisciplinar puesto que, de partida, involucra dos áreas básicas de la Matemática: el Álgebra y el Análisis. De hecho, los miembros del Equipo se adscriben a cuatro áreas de conocimiento: Análisis, Álgebra, Geometría y Matemática aplicada. Por ende, los métodos de cálculo simbólico propios de la no-asociatividad les hacen permeables al mundo de la Informática.

De otra parte, las álgebras no-asociativas son modelos que aparecen en distintas ramas de la Ciencia, como son la Mecánica Cuántica, la Físico-Matemática, la Biología, o la Teoría de Códigos. Contactar con investigadores de

estos campos para encontrar un espacio común de entendimiento que permita derivar problemas de sus investigaciones a las nuestras, así como resultados de las nuestras a las suyas, será un objetivo primordial y novedoso en este Proyecto.

“En la investigación matemática, es muy difícil proponer una metodología precisa y un plan de trabajo riguroso que aseguren el éxito en la resolución de problemas de cierta envergadura”, advierte Ángel Rodríguez. A su juicio, “la más importante garantía de éxito es el trabajo asiduo, entusiasta y profesional del personal involucrado”. A este respecto, todos los miembros del equipo están com-

prometidos sin reservas en dar el máximo, para conseguir los objetivos de calidad propuestos. Para hacer más eficaz y fructífero el esfuerzo colectivo, hace falta la puesta al día continua, colaboración y contactos continuos con los mejores equipos de investigación del mundo. Para conseguir estas condiciones se pretende instaurar un seminario interuniversitario permanente. Este foro tendrá lugar, alternativamente, en cada una de las universidades que alberguen componentes del equipo (Almería, Cádiz, Granada y Málaga).

En estos encuentros se intercambiará información sobre los avances realizados, las dificultades encontradas y las posibles vías de superarlas, así como el debate sobre las cuestiones planteadas con investigadores de otros centros. Dedicaremos algunas de estas sesiones a familiarizarnos con los medios informáticos necesarios para la solución de problemas

que requieren cálculos complejos.

Otra de las intenciones marcadas es utilizar las relaciones sólidas establecidas entre los investigadores del equipo con diversos centros de investigación del mundo. Esto permitirá mantener contactos, colaboraciones y organizar estancias de investigación en ambas direcciones. Así, se organizarán intercambios con las universidades de San Diego, Wisconsin, Ottawa, Oxford, Paris y Lille, entre otras. En lo que se refiere a la planificación del trabajo relativo a cada problema propuesto, tenemos abundantes ideas, algunas de las cuales han quedado reflejadas en el apartado de la presente memoria que recoge los antecedentes y objetivos del proyecto. Los resultados que se obtengan se enviarán para publicación a revistas especializadas de prestigio internacional, entre otras, las de la Sociedad Matemática Americana, la So-

ciedad Matemática de Londres, el Journal of Functional Analysis o el Journal of Algebra. También se darán a conocer nuestros resultados en todos los congresos y foros científicos nacionales e internacionales de la especialidad. Asimismo, se difundirán los trabajos realizados mediante una web del proyecto.

¿sabías que...

Ángel Rodríguez lleva más de 35 años trabajando con éxito en el tratamiento analítico-algebraico de las estructuras no asociativas. El equipo que se ha consolidado en torno a él disfruta de una gran consideración internacional motivada por la cantidad y calidad de su producción científica: ya son más de 400 publicaciones en revistas de primera línea. Asimismo, el grupo que Rodríguez lidera desde 1988 colabora habitualmente con los expertos del área de mayor prestigio: sirva de ejemplo Efim Zelmanov (Medalla 'Fields' 1994). El Grupo de la UGR suele ser evaluado por la Junta de Andalucía con la calificación de 30 sobre 30. En la actualidad hay seis Proyectos I+D vigentes liderados por componentes de este equipo.

Disciplina de alto nivel



"Nuestro objetivo fundamental es mantener y mejorar en lo posible el nivel de productividad de los miembros del Equipo", afirma Ángel Rodríguez. "Pretendemos abordar problemas difíciles, de reconocido interés". Algunos ejemplos son la conjetura de Banach-Mazur (1930) sobre los espacios de Banach separables con norma transitiva, los problemas clásicos de continuidad automática de los homomorfismos de imagen densa de un álgebra de Banach en otra semisimple, el de la existencia o no de álgebras no asociativas normadas con división de dimensión infinita (Wright 1953), o la más reciente conjetura de Barton-Friedman (1987). También profundizaremos en los estudios recientemente iniciados, total o parcialmente, por miembros del equipo, como las álgebras unitarias y otras variedades.



Nuevos catalizadores basados en la asimetría

Las manos del ser humano son quirales, es decir, son asimétricas y constituyen imágenes especulares la una de la otra, pero no pueden hacerse coincidir. La quiralidad resulta también una característica propia de la mayoría de las moléculas orgánicas en los organismos vivos. Científicos de la Universidad de Sevilla pretenden diseñar nuevos compuestos que favorezcan reacciones químicas basadas en la quiralidad. Estos catalizadores podrán aplicarse en química orgánica sintética o agroquímica, entre otros ámbitos y, sobre todo, en la industria farmacéutica. La investigación está subvencionada por la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa con 138.600 euros.

En general, la vida es quiral. Es decir: ha rechazado la imagen especular de los objetos y organismos vivos. Esta asimetría tiene implicaciones biológicas y genéticas, de ahí que Jacobus Henricus van't Hoff postulara que una molécula es quiral cuando existen cuatro grupos diferentes colocados en disposición tetraédrica alrededor de uno de sus átomos de carbono.

Científicos de la Universidad de Sevilla pretenden diseñar catalizadores, es decir, compuestos que favorezcan reacciones químicas, basados en la quiralidad. Esta investigación permitirá detectar aquella parte "simétrica" de los compuestos que sea beneficiosa en medicamentos o productos químicos. En un símil con las extremidades superiores, sería como elegir aquella mano beneficiosa en un determinado proceso.

Las posibles interacciones diferenciales de los distintos estereoisómeros de productos quirales es un fenómeno de gran repercusión en muy diferentes campos de la química que incluyen la química orgánica sintética, la química médi-

ca, la agroquímica, la química de productos naturales, la química de las fragancias o aromas, la industria agroquímica y, sobre todo, la industria farmacéutica. Una elevada proporción de los compuestos activos que las industrias farmacológicas ofertan son quirales.

Hasta hace muy poco, estas sustancias, se preparaban, vendían y administraban, con muy pocas excepciones, como mezclas racémicas, incluso aunque la actividad terapéutica residiera en solo uno de los enantiómeros. Hoy en día está claramente aceptado que incluso cuando los otros estereoisómeros sean inertes todavía es deseable sintetizar y usar el isómero activo en forma pura. La primera razón para ello es económica. La formación de isómeros no activos representa un gasto de materias de partida y de recursos.

La segunda razón, que adquiere cada día más importancia, es de tipo medioambiental. Aunque los estereoisómeros inactivos pueden aparecer como inertes a corto plazo, a menos que sean biodegradados de manera rápida y segura, existe el riesgo de efectos secun-

	Centro Universidad de Sevilla
	Área Física, Química y Matemáticas
	Código 01001 10011 FQM 658
	Nombre del proyecto Diseño y aplicaciones de nuevos catalizadores basados en hidrazonas y carbenos n-dialquilamino heterocíclicos quirales
	Contacto Rosario Fernández Fernández Teléfono: 95 455 97 27 e-mail: rfernandez@us.es
	Dotación 138.600 euros



Una aplicación, la industria farmacéutica

Durante mucho tiempo, fármacos como el ibuprofeno se han suministrado con los dos enantiómeros. Sólo uno de ellos era beneficioso y erradicaba el dolor, pero se suministraba también el que no tenía ninguna actividad. El hecho de suministrar sustancia inactivas para el orga-

nismo puede tener consecuencias a largo plazo, además del coste de producir ese enantiómero. De ahí la investigación de los científicos sevillanos. "Queremos mejorar la producción de fármacos, para que éstos no produzcan efectos tóxicos", explica la responsable del proyecto, Rosario Fernández.

Un ejemplo de los avances que pretenden conseguir los investigadores sevillanos es el dexibuprofeno, es decir, el enantiómero puro que ya se comercializa y que presenta un efecto al cabo de los 12 minutos. Por su parte, la mezcla de los dos enantiómeros actúa a los 30 minutos.

darios a largo plazo. Por todo ello resulta de especial interés el desarrollo de procesos que permitan la síntesis estereocontrolada de enantiómeros puros de distintos productos de interés. En este sentido la catálisis enantioselectiva juega un papel primordial por su potencial en procesos encaminados a la preparación de compuestos enantioméricamente puros o enriquecidos con aplicaciones comerciales, ya que permite obtener un alto número de moléculas quirales a partir de cada una de las usadas como catalizador. Es por tanto, un procedimiento químico que permite la multiplicación de la quiralidad.

Las enormes repercusiones económicas de los procesos catalíticos y su relevancia en el desarrollo de procesos respetuosos con el medio ambiente son el fundamento básico de este proyecto de la Universidad de Sevilla dirigido al diseño y síntesis de nuevos catalizadores quirales que contribuyan a mejorar algunas de las propiedades de los ya existentes y permitan el desarrollo de procesos más efectivos y rentables a gran escala.

Como objetivo concreto se plantea desarrollo de nuevas estrategias de introducción de quiralidad en ligandos o catalizadores basados en hidrazonas y carbenos N-heterocíclicos sustituidos por grupos N,N-dialquilamino que se acer-

quen a la situación ideal: diseño modular (control de factores estéricos y electrónicos), funcionalización, síntesis a partir de materias primas económicas, disponibilidad de ambas formas enantioméricas, y fundamentalmente, creación de un entorno quiral 'a medida'.

Los investigadores sevillanos estudiarán los procesos que involucran a los compuestos quirales, bien como ligandos quirales para la preparación de nuevos catalizadores metálicos, o bien como catalizadores orgánicos quirales, centrándose concretamente en los siguientes aspectos. Por otra parte, sintetizarán nuevos ligandos quirales basados en bis-hidrazonas y carbenos N-heterocíclicos dialquilamino sustituidos además de estudiar su estructura y estabilidad. También sintetizarán complejos de los ligandos sintetizados y los estudiarán de manera estructural.

Además, los expertos analizarán la actividad catalítica y enantioselectividad inducida por estos complejos como catalizadores quirales y la utilidad de los carbenos quirales en organocatálisis. Este último aspecto es de especial interés ya que la organocatálisis enantioselectiva se ha erigido recientemente como alternativa complementaria a los procedimientos más clásicos de catálisis mediada por especies metálicas. Esta técnica, que se basa

en el empleo de sustancias orgánicas sencillas quirales para la activación de diferentes sustratos. Esta alternativa presenta ventajas con respecto a la catálisis mediada por metales derivadas del bajo coste del catalizador, debido a su facilidad de reciclado y el bajo impacto medioambiental que se deriva de la ausencia de metales pesados en el proceso.

Asimismo, los científicos analizarán los resultados obtenidos mediante métodos computacionales, como refuerzo de la síntesis de una manera interactiva. Por último, optimizarán los catalizadores y desarrollarán aplicaciones encaminadas a la preparación enantiopura de compuestos de interés biológico, farmacológico o tecnológico.

¿sabías que...

Los cimientos para el entendimiento de la asimetría y la quiralidad a nivel molecular fueron establecidos por Jacobus van't Hoff y Charles Le Bel en 1874. Ambos independientemente propusieron que los cuatro enlaces de un átomo de carbono se dirigían hacia los vértices de un tetraedro. Como consecuencia de ello dos compuestos pueden ser diferentes porque la disposición de sus átomos en el espacio sea diferente. Por ejemplo en el aminoácido alanina, sus dos imágenes especulares tienen lo que se denomina igual constitución, los átomos están conectados unos a otros en el mismo orden, pero difieren en su disposición en el espacio, es decir, son estereoisómeros. En el caso de que sean imágenes especulares no superponibles son enantiómeros.



Formulaciones aplicadas a terapias antitumorales

La Matemática, esa ciencia que tantos quebraderos de cabeza da a muchos estudiantes no es, como algunos se empeñan en afirmar, algo incomprensible, ni mucho menos inaplicable. Nada más lejos de la realidad. Los resultados matemáticos están presentes en la práctica en todos los campos científicos. Incluso el

ámbito de la Medicina se beneficia de los avances de esta disciplina. Así lo vemos en el proyecto de excelencia de la Universidad de Sevilla 'Matemáticas para el crecimiento de tumores', dirigido por el profesor Enrique Fernández Cara y dotado con 136.220 euros por la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía.

El grupo de investigación que dirige el profesor Enrique Fernández Cara, 'ECUADIF' (Ecuaciones Diferenciales, Simulación Numérica y Desarrollo de Software) desarrolla varias líneas de estudio: análisis teórico de algunos problemas con origen en Física, Ingeniería, Biología, etc., formulados en términos de ecuaciones en derivadas parciales (EDPs); análisis numérico de estos problemas; control y controlabilidad de sistemas gobernados por estas EDP.

Su experiencia en este campo les ha valido el reconocimiento de la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía, que les ha concedido 136.220 euros para el desarrollo de un proyecto de excelencia.

'Matemáticas para el crecimiento de Tumores' es el nombre de este estudio, con el cual quieren desarrollar y perfeccionar, en colaboración con dos profesoras de la Universidad de Córdoba y varios especialistas médicos de prestigio, técnicas matemáticas de ayuda a la detección, descripción y tratamiento médico de tumores en competición con el sistema inmune.

El plan de trabajo previsto para el desarrollo del proyecto incluye la elección de modelos basados en ecuaciones en derivadas parciales (EDPs); su análisis teórico; el estudio de su control orientado a la terapia; la formulación y análisis de problemas inversos orientados a la diagnosis y el análisis numérico subyacente.

Centro

Universidad de Sevilla

Área

Física, Química y Matemáticas

01001
10011

Código

FQM 520

Nombre del proyecto

Matemáticas para el crecimiento de tumores

Contacto

Enrique Fernández Cara
Teléfono: 954 55 79 92
e-mail: cara@us.es

Dotación:

136.220 euros

¿sabías que...

-El proyecto 'Matemáticas para el crecimiento de Tumores' pretende desarrollar y perfeccionar técnicas matemáticas de ayuda a la detección, descripción y tratamiento médico de tumores en competición con el sistema inmune.
-El estudio se realizará en colaboración con especialistas médicos de prestigio.
-Los investigadores han establecido contactos con el Servicio de Oncología Médica de Hospita-

les Universitarios Virgen del Rocío.

-El estudio ayudará a una mejor comprobación de hipótesis y la simulación de terapias virtuales, eliminando parcialmente experiencias costosas y permitiendo avances rápidos de la investigación médica.

-La orientación del estudio no es exclusivamente académica, y se hace un esfuerzo por comprender la problemática médica y ayudar a encontrar soluciones realistas.

Los investigadores quieren hacer especial énfasis en los siguientes aspectos, relacionados con determinadas fases del crecimiento tumoral: la angiogénesis; la metástasis; el análisis de índices proliferativos; y la acción mecánica de fármacos. Para estudiar estos problemas, el equipo ha establecido contactos con el Servicio de Oncología Médica de Hospitales Universitarios Virgen del Rocío.

La angiogénesis es un proceso fisiológico que conduce a la formación de vasos sanguíneos a partir de los vasos preexistentes. Es un fenómeno normal durante el desarrollo embrionario, el crecimiento del organismo y en la cicatrización de las heridas. Sin embargo, también es un proceso fundamental en la transformación maligna del crecimiento tumoral. Por otra parte, la metástasis es la diseminación a órganos distantes del

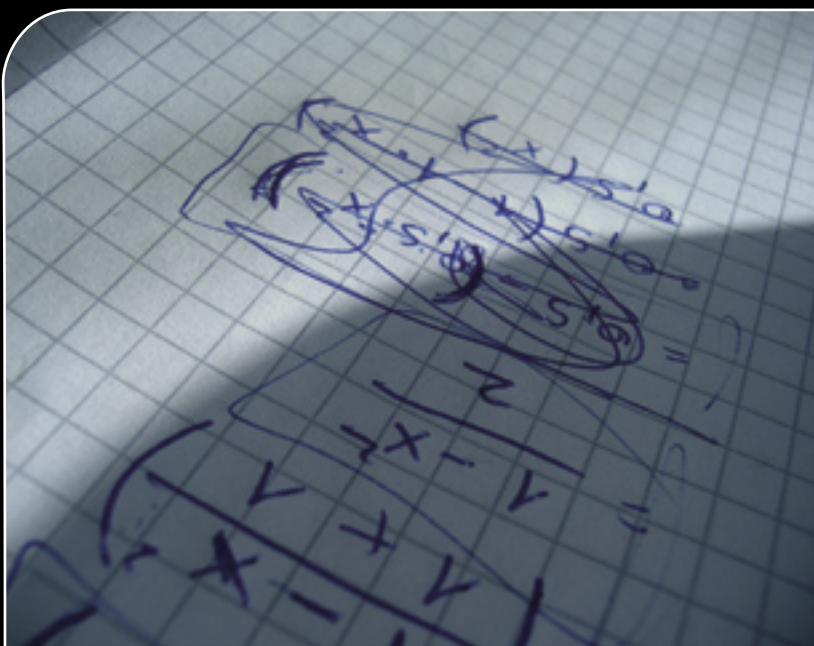
tumor primario maligno o cáncer, que ocurre generalmente por vía sanguínea o linfática. El índice proliferativo de un tumor (número de células cancerígenas proliferantes dividido por el número total de células cancerígenas) es un factor clásico que aporta información sobre el grado de malignidad del mismo. Finalmente, el análisis de la acción mecánica de los fármacos es uno de los principales objetivos del proyecto, ya que está íntimamente relacionado con la determinación de terapias.

Como puede observarse, este proyecto es un claro ejemplo de cómo la Matemática puede ayudar al avance de la Medicina, ya que, como afirma el profesor Fernández Cara, “combinadas con resultados experimentales, las técnicas pueden servir de ayuda a la diagnosis, comprensión, descripción cuantitativa, y elección y combinación de

terapias. En general, el proyecto puede ayudar a una mejor comprobación de hipótesis y la simulación de terapias virtuales, eliminando parcialmente experiencias costosas y permitiendo avances rápidos de la investigación médica.

Para ilustrar el modo de trabajo del equipo, el responsable de la investigación acude a un ejemplo: “El tumor cerebral clásico (glioblastoma) puede ser modelado mediante una EDP parabólica lineal relativamente sencilla (de coeficientes discontinuos). La formulación de problemas inversos y problemas de control asociados, respectivamente orientados hacia la diagnosis y hacia la terapia tienen aquí perfecto sentido. Su resolución teórica y numérica conduce a problemas matemáticos interesantes sobre los cuales este proyecto puede aportar avances”, explica.

Unión de técnicas con vocación de pluralidad



El grupo 'ECUADIF' tiene una larga experiencia previa con problemas similares, pero de ori-

gen distinto, a los que se tratarán en este proyecto. Podemos citar como ejemplo los estudios desa-

rollados en las áreas de dinámica de poblaciones; mecánica de fluidos; modelos acoplados en termoelasticidad; interacción fluido-estructura; fluidos reactivo-difusivos, etc. Además, un aspecto característico de este grupo de investigadores de la Hispalense es el empleo de técnicas y objetivos propios del Análisis Matemático y la Matemática Aplicada en combinación con otras áreas, con una decidida orientación multidisciplinar que busca un avance rápido del conocimiento. Como explica el profesor Fernández Cara, su orientación no es exclusivamente académica, ya que “se hace un esfuerzo por comprender la problemática médica y ayudar a encontrar soluciones realistas; esto complica la naturaleza de los problemas matemáticos estudiados, pero deja todavía un margen de posibilidades”.



‘Asesinato selectivo’ de células letales

La Universidad de Granada abanderará un proyecto de excelencia que puede impulsar nuevos desarrollos en las terapias contra tumores como el de colon y recto. “Anillos benzofusionados O,N-acetálicos de siete y ocho miembros, obtenidos mediante síntesis en fase sólida, con actividad anticancerosa” es el nombre de este proyecto dirigido por Joaquín María Campos. Será financiado por la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa con 102.400 euros.

El cáncer es un conjunto muy amplio y heterogéneo de enfermedades malignas, cada una de ellas con una distribución diferente según la edad y el sexo. Uno de cada tres hombres y una de cada cinco mujeres españolas padecerán cáncer en algún momento de su vida. El cáncer de colon-recto es el tumor más frecuente en el país, con 25.600 de los 162.000 nuevos casos que se diagnostican cada año, seguido del de pulmón, sobre todo en varones, y el de mama, más habitual entre las mujeres.

Los avances paliativos y curativos realizados con la utilización de diferentes agentes quimioterapéuticos en la lucha contra el cáncer han sido muy significativos. Sin embargo, el mecanismo de acción de estos fármacos depende de la citodestrucción de las células neoplásicas (las multiplicadas de manera anormal). Así, los efectos beneficiosos de los medicamentos, como contrapartida, van usualmente acompañados de una importante morbilidad.

Esto sugiere la búsqueda de vías alternativas de terapia tumoral que no impliquen la muerte celular. Una de estas vías es la conversión de células malignas hacia formas benignas con potencial no

proliferativo. Esto se consigue a través de la inducción a la diferenciación. Así, en los últimos años se ha desarrollado el concepto de la terapia de diferenciación. Esto se basa en demostrar que el cáncer es reversible. Por ello, el fenotipo transformado puede ser suprimido por agentes citostáticos y por inducción a la diferenciación mediante agentes farmacológicos.

El mantenimiento de los tejidos celulares en organismos multicelulares es un equilibrio dinámico. Uno de los fieles de la balanza es el proceso de proliferación/diferenciación celular. El otro, la elimina-

¿sabías que...

El trabajo contenido en este proyecto de excelencia se engloba en el contexto de investigación y desarrollo de nuevos prototipos antitumorales con capacidad para reducir la concentración intracelular de ciclina D1. Los compuestos diseñados son O,N-acetales cíclicos fusionados a un anillo de benceno, y unidos a bases pirimidínicas o purícas naturales o sintéticas. Su obtención proviene de la síntesis en fase sólida. La estrategia de disminución de los niveles de ciclinas y, más concretamente de la ciclina D1, es un enfoque novedoso y muy atractivo sin antecedentes en la bibliografía científica. Los nuevos compuestos serán evaluados como antiproliferativos, apoptóticos, modificadores del ciclo celular, y diferenciadores celulares in vitro, frente a cánceres de mama y de colon.

Centro

Universidad de Granada

Área

Física, Química y
Matemáticas

Código

636

Nombre del proyecto

Anillos benzofusionados
O,N-acetálicos de siete y
ocho miembros, obtenidos
mediante síntesis en fase sólida,
con actividad anticancerosa

Responsable

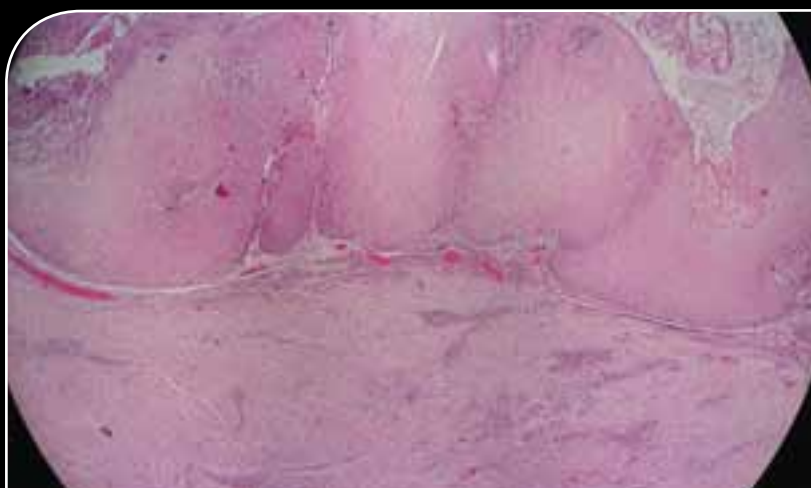
Joaquín María Campos Rosa

Dotación

102.400,00 euros

Muerte celular programada, una respuesta

La apoptosis es uno de los principales tipos de muerte celular programada (PCD). Como tal es un conjunto de reacciones bioquímicas que ocurre en las células de un organismo pluricelular, encaminadas a producir la muerte de la célula de manera controlada, a diferencia de la necrosis. La apoptosis puede tener dos motivos fundamentales, como parte del desarrollo de estructuras corporales o bien para eliminar células que supongan una amenaza para la integridad del organismo. Se caracteriza por hipereosinofilia y retracción citoplasmática con fragmentación nuclear (cariorexísis), desencadenada por señales celulares controladas genéticamente. Estas señales pueden originarse en la célula misma o de la interacción con otras células. La apoptosis es un fenómeno biológico fundamental, permanente, dinámico



e interactivo. Existen mecanismos pro- o anti-apoptóticos, regulados genéticamente, que actúan de forma activa (pues consumen energía) y equilibrada. Como función necesaria para evitar la sobreproducción celular se sospechaba de su existencia, pero es un proceso ordenado y “silencioso” que no

produce reacción tisular y por ello difícil de captar. A diferencia de la apoptosis, la necrosis es una forma de muerte celular que resulta de un proceso pasivo, accidental y que es consecuencia de la destrucción progresiva de la estructura con alteración definitiva de la función normal en un daño irreversible.

ción de células por apoptosis. Esta modalidad específica de muerte celular, implicada en el control del desarrollo y el crecimiento, es el principal mecanismo utilizado por el sistema inmunológico y los fármacos para erradicar las células tumorales. Sin embargo, las células tumorales resistentes evitan la acción de los agentes antitumorales aumentando su umbral apoptótico.

Este hecho ha estimulado el desarrollo de nuevos compuestos químicos capaces de inducir apoptosis en células tumorales. La apoptosis ha recibido una gran atención en los últimos años. La muerte celular programada ocurre en todos los organismos multicelulares, incluyendo embriones, insectos y organismos adultos. Si una célula no está realizando su función usual, otras pueden inducir apoptosis que se traduce en una autodestrucción de la primera célula. El trabajo contenido en este

proyecto de excelencia se inscribe dentro del contexto de investigación y desarrollo de nuevos prototipos antitumorales. Los compuestos diseñados son anillos de siete miembros fusionados a un anillo de benceno, y unidos a bases pirimidínicas o púricas naturales o sintéticas. Se obtienen mediante síntesis en fase sólida.

En la última década, el paradigma del descubrimiento de fármacos ha experimentado un gran número de cambios. Con la rápida investigación de candidatos potenciales a fármacos vía tamizado de alto rendimiento, el desafío actual es satisfacer y mantener la demanda cada vez mayor de compuestos nuevos de bajo peso molecular que puedan ser sometidos a una gran batería de ensayos farmacológicos. Como consecuencia de ello, los enfoques de química combinatoria innovadores conducen a nuevos fármacos. Se han convertido en herramientas claves

de programas de descubrimiento de fármacos exitosos.

El desarrollo de la síntesis en fase sólida es vital para el éxito de la aplicación de la química combinatoria en el descubrimiento de fármacos. Así se consigue generar librerías o ‘quimiotecas’ con la consiguiente diversidad estructural, necesaria para dichos hallazgos. Además, ofrece la posibilidad de sintetizar rápidamente fármacos sin las tediosas y largas purificaciones, normalmente asociadas a la química tradicional, en solución. El proyecto evaluará los nuevos compuestos como anti-proliferativos, apoptóticos, y diferenciadores celulares in vitro, frente a cánceres de mama y de colon. La actividad anticancerosa de los compuestos más potentes y menos tóxicos será ensayada in vivo. Esta nueva aproximación permite ser optimistas en la posibilidad de obtener una terapia antitumoral específica y menos tóxica.



El 'milagro' de la catálisis

Aunque pocos conocen en qué consiste exactamente el proceso de catálisis existen infinidad de productos cotidianos como perfumes, cosméticos o fármacos que nos resultan indispensables y cuya producción depende muchas veces de la utilización de un catalizador que permita su obtención de una forma más sencilla, más rápida y/o más selectiva, eliminando subproductos indeseados. En la actualidad, un grupo de científicos de la Universidad de Cádiz, incentivados por la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa, se han lanzado a la búsqueda de nuevas sustancias catalizadoras, basadas en el rutenio o el níquel, a partir de las cuales puedan obtenerse productos con un alto valor añadido.



Los procesos catalíticos han permitido algunos de los avances más espectaculares de la industria química y juegan un papel fundamental en los efectos beneficiosos que la química proporciona a la sociedad. La catálisis es un fenómeno a través del cual se acelera una reacción química y en el que, generalmente, aparece involucrada una sustancia conocida como catalizador que permanece, en principio, inalterable hasta el final del proceso.

El catalizador contribuye a que durante la reacción se consuma menos energía, si bien el resultado final no cambia, es decir, la reacción química sería la misma aún en ausencia de dicha sustancia. Por otro lado, a través de la

catálisis y si se eligen y modulan de forma adecuada las propiedades del catalizador, pueden obtenerse de forma más rápida, menos costosa y más limpia sustancias químicas de gran interés que pueden ir destinadas a la fabricación de productos con un alto valor añadido como fármacos, cosméticos, plásticos, perfumes, etc.

En este sentido, un grupo de químicos de la Universidad de Cádiz, liderados por Pedro Sixto Valerga e incentivados con más de 120.000 euros por la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa, se ha lanzado a la búsqueda de nuevos catalizadores eficientes en reacciones de síntesis de productos con un alto valor aña-



	Centro
	Universidad de Cádiz
	Área
	Física, Química y Matemáticas
	Código
	01001 10011 FQM 94
	Nombre del proyecto
	Preparación y estudio de la reactividad de nuevos catalizadores de metales de transición para la obtención de productos de alto valor añadido
	Contacto
	Pedro Sixto Valerga Jiménez Teléfono: 956 01 63 40 e-mail: pedro.valerga@uca.es
	Dotación
	120.600 euros

Procesos de índole diversa

Los procesos catalíticos que estos científicos pretenden estudiar utilizando complejos de rutenio son de varios tipos. Así, el estudio de los procesos de transferencia de hidrógeno serviría para mejorar el conocimiento de algunas funciones bioenzimáticas y biológicas en relación con procesos industriales como, por ejemplo, el craqueo de petróleo para la mejora de la proporción de octano sin la necesidad de aditivos de indeseables efectos para el medio ambiente. También se busca profundizar en los procesos de activación de enlaces C-C (carbono-carbono), C-H (carbono-hidrógeno), N-H (nitrógeno-hidrógeno), etc., en sustancias orgánicas como alquinos y alquenos, funcionalizados o no. Ello es de gran interés para la síntesis orgánica en la preparación de sustancias de alto valor añadido para su uso como fármacos, cosméticos, etc. En relación a la investigación de la reactividad química de com-



plejos de níquel, los ligandos que contienen difosfinas y fosfinoaminas son eventualmente hemilábiles y pueden generar la formación de especies coordinativamente insaturadas que, con probabilidad, podrían ser excelentes catalizadores en procesos de oligomerización y polimerización de olefinas, procesos estos últimos que permiten la producción de los

materiales que conocemos habitualmente como “plásticos”, por ejemplo polietileno, poliestireno, etc. Por otro lado, en procesos de hidrosilación de compuestos orgánicos insaturados las reacciones a estudiar son de interés en síntesis orgánica, en el conocimiento de funciones biológicas, procesos industriales, formación de enlaces C-Si, etc.

dido. El objetivo es encontrar procesos más baratos, más eficaces y menos contaminantes. Para ello, este grupo de investigadores se centrará principalmente en el estudio de la actividad catalítica de complejos organometálicos de dos metales de transición: el rutenio y el níquel.

“No todas las sustancias tienen las propiedades necesarias para convertirse en catalizadores”, explica Valerga. “El hecho de elegir el níquel y el rutenio para nuestra investigación tiene su lógica. Ambos son metales de transición, con lo que tienen capacidad para formar más variedad de sustancias químicas y para variar sus estados de oxidación, algo que los convierte en candidatos idóneos para ser usados como catalizadores. La facilidad para intercambiar electrones y su capacidad

para variar su coordinación, contando con más posibilidades de valencia, son otras de las ventajas de estos dos metales. En definitiva, podría decirse que ambos tienen un carácter muy versátil”, comenta este investigador.

El níquel, a diferencia del rutenio, es un elemento abundante en la naturaleza y muchas industrias lo utilizan como materia prima, por lo que tiene un importante interés económico. El rutenio, por el contrario, es menos abundante y por tanto más caro. Sin embargo, permite estudiar en profundidad algunos procesos y, eventualmente, las industrias podrían sustituir al final el catalizador basado en rutenio por otro similar basado en hierro, que es un metal del mismo grupo, mucho más abundante y más barato. “Una de las ventajas que

hemos encontrado estudiando el rutenio ha sido el aislamiento de sustancias intermedias en la reacción, moléculas muy reactivas. Se trata de un aspecto importante porque gracias a esto podemos aumentar el conocimiento de cómo transcurren algunas reacciones. Ello permitiría estudiar posibles aplicaciones químicas futuras”, comenta el investigador de la UCA.

¿sabías que...

En biología los catalizadores más importantes son las enzimas, biomoléculas responsables de regular la velocidad de un gran número de reacciones en los seres vivos incluyendo todo el metabolismo. En los procesos industriales la catálisis también juega un papel relevante, ya que permite llevar a cabo las reacciones en tiempos mucho más cortos, con el consiguiente beneficio económico.



Tras las claves de la neurodegeneración

El aumento de las expectativas de vida, especialmente en los países desarrollados, ha venido acompañado de la aparición en los últimos tiempos de enfermedades de tipo neurodegenerativo que están afectado a porcentajes cada vez más altos de población en determinados tramos de edad. En la actualidad se sabe que dichas enfermedades son causadas por anomalías que se producen en el comportamiento de ciertas proteínas que intervienen en el ciclo celular. Este funcionamiento anormal provoca que las proteínas se acumulen en las neuronas o en zonas cercanas a ellas formando fibras amiloides que dan lugar a la disminución o supresión de las funciones neuronales. El estudio de estas fibras puede contribuir a desvelar algunos de los procesos causantes de enfermedades como el Alzheimer o el Parkinson.



Centro

Universidad de Granada



Nombre del proyecto

Estructura, termodinámica, dinámica y citotoxicidad de los precursores de la formación de fibras amiloides del dominio SH3



Área

Física, Química y Matemáticas



Contacto

Francisco Conejero Lara
Teléfono: 958 24 23 71
e-mail: conejero@ugr.es



Código

FQM 123



Dotación

190.000 euros

El plegamiento de las proteínas es una etapa esencial en la conversión de la información genética de los organismos vivos en actividad biológica. Por esta razón la célula posee sofisticados mecanismos de control del plegamiento. No obstante, bajo ciertas circunstancias metabólicas (estrés, envejecimiento celular o presencia de agentes exógenos o infecciosos) las proteínas pueden plegarse incorrectamente y formar agregados intra o extracelulares en forma de fibras de forma alargada llamadas "amiloides". Estos agregados se depositan en los tejidos provocando una

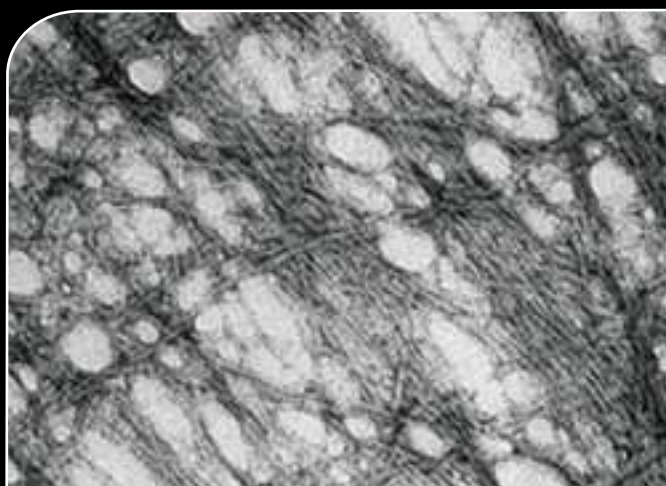
alteración funcional e incluso la muerte celular.

La agregación y formación de fibras amiloides de proteínas es responsable de un grupo de enfermedades de tremendo impacto socioeconómico como el Alzheimer, el Parkinson, la diabetes tipo II o diversas encefalopatías. Para estas enfermedades -conocidas genéricamente como amiloidosis- no existen aún terapias ni métodos de prevención efectivos, debido en gran parte al profundo desconocimiento de los mecanismos moleculares que intervienen en dichos

procesos y de los factores que los desencadenan.

En condiciones normales, cada proteína adopta una estructura única y bien definida que es esencial para la función que desarrolla. Sin embargo, debido a diferentes factores, muchos aún sin determinar, puede favorecerse el plegamiento anormal de la proteína, dando lugar a la formación de fibras amiloides. En las etapas intermedias del proceso la proteína adquiere estructuras oligoméricas y agregados prefibrilares que son las verdaderas "semillas" de la formación de los

Los fármacos del futuro



Los resultados de la investigación llevada a cabo por este grupo granadino repercutirán favorablemente en el diseño de futuras estrategias de prevención y tratamiento de enfermedades relacionadas con los amiloides a través de fármacos que impidan o retrasen el depósito de estas fibras, evitando o disminuyendo el daño que provocan en los órganos afectados. Este proyecto de excelencia

se enmarca además en una Red Europea de Formación "Protein folding, misfolding, aggregation and disease" a través de la cual se potencia la colaboración entre grupos de investigación dedicados a una misma temática, favoreciendo el intercambio de métodos y técnicas, diferentes pero complementarias, entre los investigadores. Así, los científicos granadinos colaboran con siete laboratorios europeos, entre los que destacan

el del profesor Chris Dobson, de la Universidad de Cambridge, o el dirigido por el investigador Luis Serrano, del Laboratorio Europeo de Biología Molecular en Heidelberg. Los trabajos coordinados están encaminados a la búsqueda de características comunes en los procesos de agregación de diversas proteínas que permitan establecer un mecanismo general para la formación de las fibras amiloides.

amiloides. Se han encontrado sólidas evidencias de que los mayores efectos citotóxicos y de disfunción celular parecen residir precisamente en estos precursores, por lo que su estudio es especialmente interesante. Por otra parte, se ha observado que, independientemente de las proteínas responsables de cada amiloidosis, e incluso en proteínas sin relación con enfermedades, todas ellas se depositan formando el mismo tipo de fibras con el mismo aspecto al microscopio y la misma estructura. Esto hace suponer un mecanismo común para el origen de todas estas enfermedades.

En la actualidad un grupo de científicos de la Universidad de Granada investiga las etapas iniciales de la formación de fibras amiloides in vitro por una proteína modelo, un pequeño dominio SH3. Con tal

fin, la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa ha financiado con 190.000 euros un proyecto de excelencia dirigido por el investigador Francisco Conejero Lara. Los objetivos de este proyecto consisten en establecer las bases moleculares que determinan el plegamiento irregular de la proteína, las características estructurales de los precursores de la formación de amiloides y los mecanismos de su formación, interconversión y disolución. Asimismo, tratarán de establecer una relación entre las propiedades de los amiloides y su citotoxicidad.

Para lograr los objetivos propuestos el grupo granadino aglutina un conjunto de investigadores con experiencias en metodologías muy diversas que combinan la resonancia magnética nuclear (RMN) de

alta resolución junto con diversas espectroscopias y técnicas biofísicas, la microscopía electrónica y la calorimetría. Además emplearán la ingeniería de proteínas para apoyar los estudios químico-físicos y se realizarán ensayos de toxicidad de los agregados proteicos en cultivos celulares modelo.

¿sabías que...

Científicos de la Universidad de Washington en Saint Louis han observado que la bacteria *Escherichia coli*, muy común y que causa enfermedades como infecciones en el tracto urinario, puede producir también fibras amiloides. Estos investigadores han comprobado que ciertas cepas de la *E. coli* producen fibras amiloides similares a las que se acumulan en el cerebro para formar placas seniles, una característica de la enfermedad de Alzheimer.

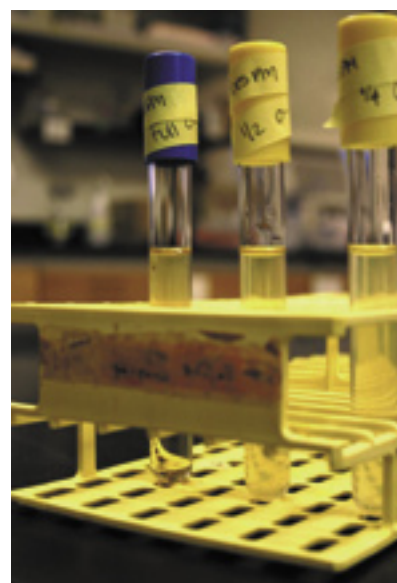


Química de calidad en los laboratorios

A través de un estudio sistemático de nanoestructuras, los investigadores de la Universidad de Córdoba, dirigidos por Miguel Valcárcel, tratarán de perfeccionar un sistema analítico de vanguardia para generar información química de calidad. Para ello, la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa ha dotado este proyecto con 230.000 euros

El carbono es el elemento alrededor de el cual ha evolucionado la química de la vida. Tiene cuatro electrones de valencia en su capa mas externa, cada uno de los cuales puede emparejarse con los de otros átomos que puedan completar sus capas electrónicas compartiendo electrones para formar enlaces covalentes. Algunos de estos elementos son el nitrógeno, el hidrógeno y el oxígeno. sin embargo, la característica mas admirable del átomo de carbono, que lo diferencia de los demás elementos y que confirma su papel fundamental en el origen y evolución de la vida, es su capacidad de compartir pares de electrones con otros átomos de carbono para formar enlaces covalentes carbono-carbono.

Las nanoestructuras de carbono han tenido una gran importancia en casi todas las áreas científicas desde su descubrimiento, primero los fullerenos (1985) y después los nanotubos de carbono (1991). Estas nuevas formas alotrópicas del carbono presentan unas excepcionales propiedades eléctricas, mecánicas y químicas que han permitido su aplicación como materiales semiconductores, componentes de sensores, chips y dispositivos ópticos. Este proyecto trata de consolidar una línea de investigación en el ámbito de la Química



Analítica que tiene escasos antecedentes bibliográficos. Un grupo de la Universidad de Córdoba, dirigido por Miguel Valcárcel, trabajará con las ya nombradas estructuras de carbono para generar información química de calidad.

Según el proyecto, al que la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa ha asignado 230.000 euros, los objetivos principales son el desarrollo de sistemas eficaces y fiables para la caracterización y el análisis de nanoestructuras de carbono tanto para el control de calidad como de la contaminación en industrias nanotecnológicas y establecer la utilidad de nanotubos y fullerenos como herramientas (materiales sorbentes, componentes de sensores ópticos fases estacionarias en cromatografía,



Centro

Universidad de Córdoba



Área

Física, Química y
Matemáticas



Código

FQM 147



Nombre del proyecto

Las nanoestructuras de
carbono como objetos y
herramientas para generar
información química de
calidad



Contacto

Miguel Valcárcel Cases
Teléfono: 957 21 86 16
e-mail: qa1meogj@uco.es



Dotación:

230.000 euros

pseudoestacionarias en electroforesis capilar, etc.) en procesos (bio)químicos de medida para la obtención de información química de calidad y su aplicación industrial.

Para ello, este grupo de investigación llevará a cabo una serie de líneas de investigación que consisten en el estudio sistemático de las características de las diferentes nanoestructuras de carbono, en la consideración de las nanoestructuras de carbono como analitos y como herramientas, respectivamente y a la transferencia tanto del conocimiento adquirido como de la tecnología desarrollada al sector industrial. El plan de trabajo del proyecto se divide en una serie de áreas entre las cuales se destaca el desarrollo de nuevas técnicas de purificación, caracterización y cuantificación de las nanoestructuras de carbono, la síntesis de nuevos derivados de fullerenos y nanotubos, la monitorización de la contaminación medioambiental en industrias nanotecnológicas, así como el empleo de las nanoestructuras como material sorbente, el diseño de sensores, el empleo de las nanoestructuras como fases estacionarias y pseudoestacionarias en cromatografía y electroforesis capilar, el desarrollo de micro y nanosensores, etc.

¿sabías que...

El 'buckminsterfullerene' o simplemente 'fullereno', en honor del ingeniero americano R. Buckminster Fuller. Fuller había diseñado, ya en 1967, para la Expo en Montreal, una cúpula geodésica en la que usaba elementos hexagonales junto con alguno pentagonal para curvar la superficie. La molécula de fullereno es verdaderamente un asombroso conjunto de 60 átomos de carbono, todos ellos equivalentes, indistinguibles, cada uno enlazado a otros tres carbonos.

Nanotecnología, una disciplina puntera



Un nanómetro es la millonésima parte de un milímetro. Para comprender el potencial de esta tecnología es clave saber que las propiedades físicas y químicas de la materia cambian a escala nanométrica, lo cual se denomina efecto cuántico. La conductividad eléctrica, el color, la resistencia, la elasticidad, la reactividad, entre otras propiedades, se comportan de manera diferente que en los mismos elementos a mayor escala. Aunque en las investigaciones actuales con frecuencia se hace referencia a la nanotecnología (en forma de motores moleculares, computación cuántica, etcetera), es discutible que la nanotecnología sea una realidad hoy en día. Los progresos actuales pueden calificarse más bien de nanociencia, cuerpo de conocimiento que sienta las bases para el futuro desarrollo de una tecnología basada en la

manipulación detallada de estructuras moleculares. El premio Nobel de Física Richard Feynman fue el primero en hacer referencia a las posibilidades de la nanociencia y la nanotecnología en el célebre discurso que dio en el Caltech (Instituto Tecnológico de California) el 29 de diciembre de 1959 titulado 'Al fondo hay espacio de sobra' ('There's Plenty Room at the Bottom'). Otro visionario de esta área fue Eric Drexler quien predijo que la nanotecnología podría usarse para solucionar muchos de los problemas de la humanidad, pero también podría generar armas poderosísimas. Creador del Foresight Institute y autor de libros como Máquinas de la creación 'Engines of creation' muchas de sus predicciones iniciales no se cumplieron, y sus ideas parecen exageradas en la opinión de otros expertos, como Richard Smalley.



Hacia un análisis de alimentos más sostenible

El control de los contaminantes químicos y de los nutrientes en los alimentos experimenta en la actualidad desarrollos emergentes que permitirán ahorrar costes y actuar de acuerdo con parámetros ambientalmente más respetuosos. En esta línea trabaja el equipo de la Universidad de Córdoba

(UCO) dirigido por la catedrática María Dolores Pérez Bendito. Un presupuesto de 205.000 euros avala el proyecto de excelencia 'Tecnologías emergentes en análisis agroalimentario basadas en la química sostenible'.

La globalización del mercado de alimentos ha conducido al desarrollo de estrictas regulaciones para asegurar tanto su calidad como el hecho de que resulten inocuos para la salud humana. Siguiendo este propósito, no obstante, los laboratorios de análisis de alimentos afrontan una serie de retos. Uno de ellos es la complejidad del tratamiento de las muestras necesarias para hacerlos compatibles con el sistema de medida. El otro desafío es disminuir la lentitud de los procesos analíticos para poder determinar los índices globales, dado el gran número de muestras que generalmente es necesario procesar. En este proyecto, por ello, se apuesta por la minimización de ambos problemas mediante el desarrollo de tecnologías punta. En palabras de Dolores Pérez Bendito, "se pretende que estos nuevos métodos permitan a los laboratorios de control alimentario proporcionar respuestas rápidas y fiables, reducir costes y disponer de procesos que se adapten a los principios de la química sostenible". La doble connotación, económica y ambiental, ha motivado que la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa respalde esta línea científica con la concesión

del correspondiente proyecto de excelencia. Todo esto se quiere lograr con el uso de nuevos sistemas de agregación molecular. Éstos se constituyen por biotensioactivos que se proponen por vez primera. Así, la investigación propuesta desde la UCO aborda dos apartados diferenciados. El primero de ellos consiste en extraer trazas y nanotrazas de contaminantes en alimentos de forma rápida y eficaz. Esta vía simplifica el tratamiento de la muestra y evita el uso de disolventes orgánicos. Estos objetivos se realizarán mediante la formación de agregados de moléculas que se engloban dentro de los coacervados, hemimicelas y admicelas de biotensioactivos.

La versatilidad de estas moléculas se une a la selectividad que se logra a la hora de extraer estructuras definidas. Además destaca su compatibilidad con los sistemas de separación y detección usados en la determinación de contaminantes. Otra ventaja es la eliminación de los riesgos derivados de manipular disolventes orgánicos. Todo ello los convierte en sistemas idóneos para sustituir los procesos de extracción clásicos utilizados en los laboratorios de análisis de alimentos.



Centro

Universidad de Córdoba



Área

Física, Química y Matemáticas



Código

FQM 166



Nombre del proyecto

Tecnologías emergentes
en análisis agroalimentario
basadas en la química
sostenible



Contacto

María Dolores Pérez Bendito
Teléfono: 957 218644
Email: qa1pebem@uco.es



Dotación

205.000 euros

De tensioactivos a biotensioactivo

En el proyecto que acomete el grupo de investigación de la Universidad de Córdoba se introduce un aspecto sumamente novedoso: la sustitución de tensioactivos convencionales por biotensioactivos. El uso de los biotensioactivos como componentes de sistemas supramoleculares constituye una tendencia reciente para reducir el impacto ambiental y aprovechar una serie de nuevas funciones resultantes. Entre ellas, destacan la combinación de actividad superficial y polimerizabilidad en una molécula. Los biotensioactivos presentan diversas ventajas frente a los tensioactivos convencionales. Las principales son su menor toxicidad, su carácter biodegradable y una alta efectividad en un amplio intervalo de parámetros, como la temperatura, el pH y el nivel de salinidad. Además, de cara a aplicaciones específicas, se pueden modificar mediante ingeniería genética o técnicas químicas y biológicas.



Presentan además el beneficio de reducir drásticamente los tiempos de extracción, así como la simplificación, en su conjunto, del proceso de tratamiento de muestra.

El segundo punto de este programa científico se basa en los parámetros de agregación molecular de los biotensioactivos seleccionados. Su meta es determinar de modo simple y directo los índices globales de los nutrientes contenidos en los alimentos. El desarrollo de nuevos principios de medida en Química Analítica permite abordar problemáticas no resueltas por el uso de los parámetros de medida convencionales. El grupo de investigación de la Universidad cordobesa ha propuesto nuevas metodologías idóneas para la medida de índices globales. Las metodologías desarrolladas en el control

de la contaminación ambiental son simples, rápidas y requieren instrumentación asequible para cualquier laboratorio. La catedrática de Química Analítica de la UCO Dolores Pérez Bendito atesora una trayectoria investigadora plagada de contribuciones en el ámbito del análisis químico. Sus publicaciones dentro de este campo abarcan las técnicas de fotometría y métodos cinéticos.

Entre otros méritos académicos y científicas, Pérez Bendito fue jurado del premio Príncipe de Asturias de la Ciencia y Técnica en 2002. Igualmente, obtuvo el Premio Solvay para la Investigación en Ciencias Químicas en el año 2000, que concede anualmente la CEOE, por su contribución a la química analítica, recogida "en numerosas publicaciones de gran prestigio inter-

nacional". El galardón reconoció además sus aportaciones a los nuevos métodos de análisis, su gestión científica y su "relevante contribución a la formación de investigadores".

¿sabías que...

Según la definición de la FAO: "Existe seguridad alimentaria cuando todas las personas tienen en todo momento acceso físico y económico a suficientes alimentos inocuos y nutritivos para satisfacer sus necesidades alimentarias". En este sentido, la seguridad alimentaria implica el cumplimiento de las siguientes condiciones: una oferta y disponibilidad de alimentos adecuados; la estabilidad de la oferta sin fluctuaciones ni escasez en función de la estación del año; el acceso a los alimentos o la capacidad para adquirirlos y una buena calidad e inocuidad de los alimentos. En los países de la UE, las tres primeras premisas se alcanzan de forma generalizada, salvo excepciones ocasionales. Por lo que es el último punto, el que se refiere a la inocuidad de los alimentos, el que cobra relevancia y protagonismo.



Soluciones químicas contra la contaminación

La Universidad de Córdoba (UCO) impulsa una investigación orientada a la producción de reacciones químicas que no perjudiquen el ambiente. Pero más allá, pretende también destruir sustancias que contaminan el aire o el agua. Se financiará con 197.000 euros el proyecto 'Síntesis y caracterización de materiales sólidos utilizables como catalizadores y fotocatalizadores en procesos de Química Benigna con el Medio Ambiente (Química Sostenible)'.



Centro

Universidad de Córdoba



Área

Física, Química y Matemáticas



Código

FQM 191



Nombre del proyecto

Síntesis y caracterización de materiales sólidos utilizables como catalizadores y fotocatalizadores en procesos de Química Benigna con el Medio Ambiente (Química Sostenible)



Contacto

José María Marinas Rubio
Teléfono: 957 218638
email: qo1maruj@uco.es



Dotación

197.000 euros

El proyecto de excelencia lo lidera el profesor José María Marinas Rubio, para quien "la Química debe afrontar, en la actualidad, el reto de la Contaminación Ambiental", es, precisamente, como consecuencia de este reto. Y sobre por lo que en los últimos años, ha surgido la denominación de 'Química Verde', o 'Química Sostenible'. La Química Verde es, según la definición que recoge el profesor Marinas, "el diseño de productos y procesos químicos con el fin de reducir o eliminar el uso y generación de sustancias peligrosas". Se trata de un concepto estrictamente químico y postula el desarrollo de una Química que prescinda de todo riesgo de contaminación ambiental. En todo caso, se intenta que dicha amenaza quede reducida al mínimo.

El concepto de Química Sostenible, por el contrario, se relaciona con la eco-eficiencia, el crecimiento económico y la calidad de vida en términos de un análisis de costes y beneficios. Así lo explica el investigador de la UCO: "para comprender mejor esta posible diferencia hemos de definir a la sostenibilidad como la capacidad para mantener el desarrollo de la calidad de vida, sin comprometer la de nuestros descendientes".

En este contexto entra en juego la catálisis, el proceso a través del que se acelera una reacción química. El primer gran objetivo del proyecto es lograr sintetizar materiales sólidos, benévolos con el Medio Ambiente, que sean utilizables como catalizadores y fotocatalizadores (aquellos que inducen la reacción por medio de la radiación lumínica). A partir de esta premisa, y de acuerdo con las consideraciones de la 'química verde', el siguiente paso consiste en aplicar estos materiales a reacciones químicas de interés industrial que, a su vez, no contaminen el medio ambiente.

"Para ello será preciso intentar modificar procesos químicos que, en la actualidad, son contaminantes". Sin embargo, y parafraseando el refrán, el proyecto va más allá del 'poco ensuciar', y se aventura a 'limpiar'. Otro de sus objetivos generales es intentar descontaminar lo ya con-

¿sabías que...

Cuando se habla de fotocatalisis se hace referencia a una reacción catalítica que involucra la absorción de luz por parte de un catalizador o sustrato. Una de las aplicaciones de la fotocatalisis se encuentra en la depuración de agua o de aire.



taminado. Esto significa destruir determinados materiales que ya están polucionando la atmósfera, las aguas y el entorno natural en general.

El remedio para ello puede estar en los procesos de catálisis y fotocatalisis denominadas como 'heterogéneas'. Dicha tipología de reacciones hace referencia a que se encuentran en contacto dos o más fases o estados de la materia. En este caso, cabe concretar esta noción con el empleo de sólidos, tal como especifica el propio título del proyecto de investigación. Por último, la fotocatalisis heterogénea se aplicará especialmente a destruir plaguicidas en aguas. Los más problemáticos en Andalucía derivan del cultivo del olivar.

Con las vías de descontaminación exploradas por su equipo, José María Marinas afirma que "de esta forma, nuestros descendientes no se verán condicionados

por acciones que, momentáneamente, parece que han mejorado nuestra existencia, pero que han comprometido, gravemente, su futuro".

Los estudios de la Universidad cordobesa se centrarán en procesos de gran interés industrial benévolos con el medio ambiente. Se pueden citar ejemplos como los de oxidación mediante agentes oxidantes 'limpios', como el agua oxigenada y el oxígeno. Destaca, asimismo, la destrucción fotocatalizada de plaguicidas en aguas. Esta última cobra especial relevancia en nuestra Comunidad, como consecuencia del uso de dichos tóxicos en el cultivo del olivo (se está creando una base de datos sobre la trazabilidad del aceite). En general, "los resultados obtenidos con nuestros catalizadores se compararán, en algunos casos, con los logrados con otros convencionales", según el profesor Marinas. "Por otra par-

te, se estudiará la resistencia a la desactivación y la facilidad de regeneración de algunos de los catalizadores". El proyecto de la UCO quiere sintetizar y caracterizar materiales sólidos utilizables como catalizadores y fotocatalizadores. Dentro de este capítulo, un importante apartado se refiere a la síntesis de los denominados 'catalizadores quirales sólidos'. Esta variedad de materiales se utiliza en procesos de reducción, a través del empleo de diferentes moléculas inmovilizadas y modificadores quirales.

"Hemos de tener en cuenta que la industria farmacéutica los utiliza profusamente, y este tipo de catalizadores evita, en gran medida, la contaminación ambiental", explica José María Marinas Rubio. Asimismo, se sintetizarán catalizadores heterogéneos con centros básicos y ácido-básicos, "aún no muy utilizados en el campo de la Química Medioambiental".

Procesos ambientalmente benévolos



La química medioambiental es la aplicación de la química al estudio de los problemas y la conservación del medio ambiente. En la química de la atmósfera, a medida que la comunidad internacional presta más atención a las tesis del ecologismo (con acuerdos internacionales como el protocolo de Kioto para reducir las emisiones de dióxido de carbono para limitar el efecto invernadero), esta disciplina cobra más y más importancia. El insuficiente desarrollo de esta disciplina hizo posible el uso generalizado de los clorofluorocarbonos, con las graves consecuencias que esto tuvo para el agujero en la capa de ozono. Tras las experiencias con la lluvia ácida, la combinación de química medioambiental y ingeniería química resultó en el desarrollo de los tratamientos para limitar las emisiones de las fábricas. También la química medioambiental se ocupa de los procesos y reacciones que tienen lugar en

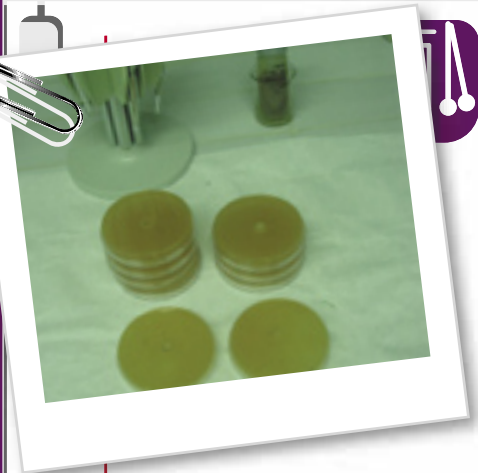
las masas de agua continentales y marinas, como la evolución e interacción de los contaminantes vertidos a dichas masas por parte de las actividades humanas. Asimismo, estudia los tratamientos de dichos vertidos para reducir su carga dañina. También hay interacción entre la llamada Química

Verde (o Química Sostenible) y la preservación del medio ambiente, pues aquella estudia optimizar los procesos productivos químicos, eliminando productos secundarios, empleando condiciones menos agresivas (de presión y temperatura, de tipo de disolvente)

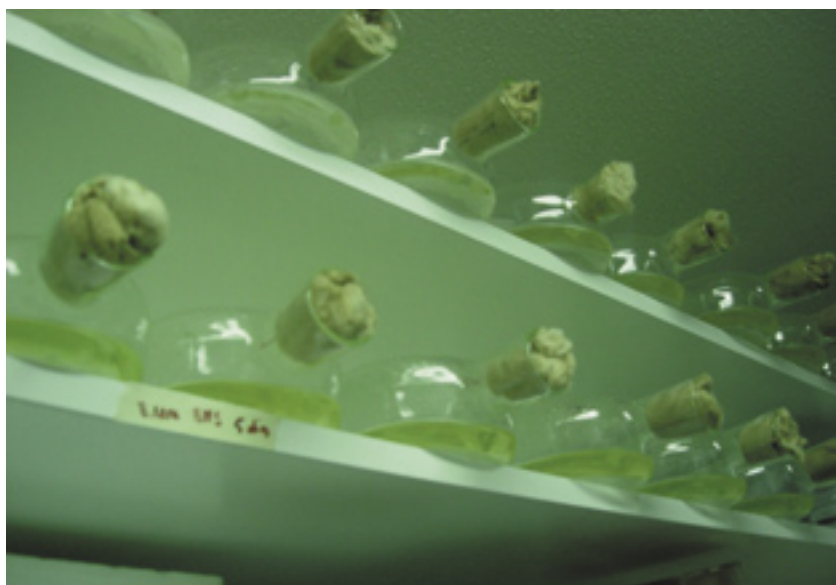


Antioxidantes para comida procedentes de hongos

La necesidad de contar con alimentos más seguros desde el punto de vista sanitario y medioambiental, es uno de los mayores retos a los que se enfrenta en este momento la industria agroquímica-alimentaria. Para contribuir a ello, varios grupos de investigación andaluces han obtenido una dotación de 60.000 euros por parte de la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa.



	Centro
	Universidad de Cádiz
	Área
	Física, Química y Matemáticas
	Código
	FQM 489
	Nombre del proyecto
	Diseño y síntesis de moléculas bioactivas de alto valor añadido en la industria agroalimentaria
	Contacto
	Isidro González Collado
	Teléfono: 956 01 63 68
	e-mail: isidro.gonzalez@uca.es
	Dotación
	60.000 euros



Para conseguir alimentos más seguros desde el punto de vista sanitario y medioambiental, es necesaria la utilización de aditivos alimentarios naturales y de baja toxicidad (antioxidantes, colorantes, etc.) y, por otro lado, de agroquímicos fácilmente degradables, no persistentes y que no se incorporen a la cadena alimentaria. Así, dentro del campo de los antioxidantes, se plantea el estudio de sustancias biosintetizadas por determinados hongos fitopatógenos, y la preparación de moléculas derivadas de antioxidantes naturales aislados de los residuos agrícolas procedentes de la poda del olivar. Además, se abordarán estrategias sintéticas novedosas orientadas a la síntesis de compuestos con mayor poder antioxidante.

Un grupo de la Universidad de Cádiz, dirigido por Isidro González Collado, y junto con otros grupos de investigación de otras universidades andaluzas, trabajará en el diseño y síntesis de compuestos, de alto valor añadido, para la industria agroalimentaria. Según el proyecto de excelencia, al que la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa ha dotado con 60.000 euros, todos los compuestos que se obtendrán provienen de productos naturales, y se tratarán según una perspectiva racional y respetuosa con el medioambiente. Concretamente se abordarán la síntesis de insecticidas, fungicidas y herbicidas contra algunas de las enfermedades más comunes en algunos de los principales cultivos de nuestra comunidad como son: el control de insectos en el

Una íntima relación empresarial

En este proyecto, la colaboración activa de empresas especializadas en el campo de la agroquímica, de la conservación y tratamiento de alimentos, así como de las empresas dedicadas a la síntesis de moléculas bioactivas en general, es necesaria y constante, además, la consecución de los objetivos del proyecto requiere la co-

laboración activa de estas empresas especializadas. Para ello, se cuenta con el interés de las empresas Newbiotechnic (NTB), Domca S.A., Isagro y Deretil, entre otras. Todas ellas del campo de la agroquímica, conservación y tratamiento de alimentos y de la síntesis de moléculas bioactivas. La transferencia de todos los resultados de este grupo de

investigación de la Universidad de Cádiz ha estado íntimamente relacionada con la empresa NBT, con la que ya ha licenciado dos patentes. Según fuentes del proyecto de investigación, uno de los principales objetivos que se esperan, es poder transferir a la industria todos los resultados susceptibles de ser patentados.



olivo o el control de enfermedades fúngicas en cultivos tan importantes, como son la fresa y la vid. Por último, se abordará la síntesis de la crocetina, colorante natural del azafrán, mediante una novedosa ruta sintética. El empleo de antioxidantes se utiliza para preservar el sabor, aroma y color de los alimentos manufacturados. Para buscar antioxidantes naturales que reemplacen a los sintéticos, es necesario acudir a microorganismos y subproductos y residuos agrícolas. El estudio plantea para ello la obtención de sustancias

antioxidantes biosintetizadas por determinados hongos fitopatógenos, así como de los residuos agrícolas procedentes de la poda del olivar. Para buscar nuevos colorantes naturales atóxicos, se utilizará la crocetina, un colorante natural más conocido como azafrán y que investigadores de este proyecto intentarán obtener mediante síntesis química. Los productos agroquímicos más seguros con el medioambiente, se obtendrán a partir del uso de feromonas, caracterizadas de fuente natural y posteriormente sintetizadas.

¿sabías que...

hay una serie de hongos que atacan a cultivos como el llamado 'Botrytis cinerea', que afecta regularmente a la fresa y la vid, o el 'Colletotrichum gloeosporioides', que ataca a la fresa, principalmente. Son hongos patógenos microscópicos que generan una gran cantidad de sustancias, y estos científicos de la Universidad de Cádiz han estudiado el metabolismo secundario de éstos en profundidad, han visto las sustancias que producen, y buscan así nuevas moléculas con actividad biológica.



Transversalidad del análisis matemático

El análisis matemático es un ámbito de estudio que puede resultar uno de los grandes desconocidos para la opinión pública. Un grupo de investigadores de la Universidad de Sevilla, va a desarrollar un proyecto de excelencia, dotado con 103.000 euros por la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa, en el que tendrán cabida múltiples líneas de estudio en esta área de conocimiento, entre las que destacan la resolución de problemas de reconstrucción de imágenes o la Dinámica Poblacional.



Centro

Universidad de Sevilla



Área

Física, Química y Matemáticas



Código

FQM 627



Nombre del proyecto

Análisis Matemático



Contacto

Tomás Domínguez Benavides

Teléfono: 954 55 79 82

e-mail: tomasd@us.es



Dotación:

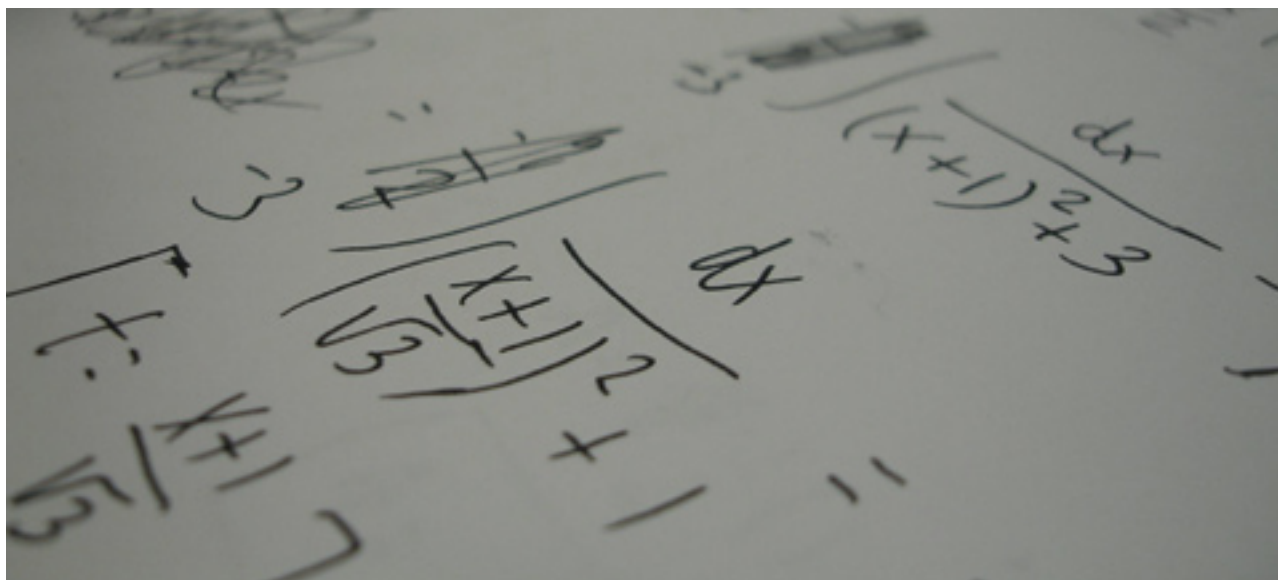
103.000 euros

Se trata de un Proyecto en Matemáticas Fundamentales en el que se pretenden obtener resultados teóricos con posibles aplicaciones en áreas muy diversas como Reconstrucción de Imágenes, Tomografía, Teoría de Juegos, Teoría Económica Social, Teoría del Caos, etc. El Proyecto aborda de forma transversal objetivos que se pueden enmarcar en diferentes campos del Análisis Matemático: Geometría de Espacios de Banach, Teoría Métrica del Punto Fijo, Hiperciclicidad y Universalidad de Operadores, Integración Vectorial, Análisis de Fourier, etc. Para ello cuenta con una dotación de 103.000 euros por parte de la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de

la Junta de Andalucía. El equipo investigador está integrado por 15 Doctores del Departamento de Análisis Matemático de la Universidad de Sevilla, que forman parte de los Proyectos D.G.E.S. REF. PBMF2003-03893-C02-01 y D.G.E.S. REF. PBMF2003-01297; y de los grupos FQM 127 y FQM 104 del PAI incluyendo los investigadores principales de estos

¿sabías que...

En matemáticas, los Espacios de Banach, llamados así en honor Stefan Banach, son unos de los objetos más importantes en el estudio del análisis funcional. Los espacios de Banach típicamente son espacios infinitamente dimensionales que contienen funciones.



proyectos o grupos. Así mismo algunos miembros del grupo forman parte de la red europea Phenomena in High Dimension. Además estas aplicaciones pueden ser obtenidas desde campos diferentes del Análisis Matemático. Por ejemplo, los problemas de reconstrucción de imágenes pueden ser abordados tanto desde el Análisis de Fourier como desde la Teoría de Aproximación de Puntos Fijos mediante procesos de iteración, a través del problema de Viabilidad Convexa. Este es uno de los objetivos que se plantean en el proyecto.

Otra rama del Análisis Matemático con importantes aplicaciones en disciplinas tan diversas como Dinámica Poblacional, Economía, Biología, Medicina y Física Cuántica es la teoría de la hipercicli-

dad. Incluso los operadores lineales, que en principio debieran presentar un comportamiento más ordenado, pueden generar caos y valer como modelo matemático de múltiples procesos físicos de la Naturaleza. El estudio de hiperciclicidad y universalidad de operadores será otro de los objetivos del Proyecto. La Aritmética tiene hoy un gran impacto en las aplicaciones a través de la criptografía que permite transmisiones y comercio seguros. Desde un punto de vista teórico es por tanto muy importante el estudio de los números primos. Su distribución está relacionada con los más importantes problemas teóricos de la matemática. Esto tiene que ver con el análisis ya que la distribución de los primos está gobernada por la distribución de los ceros de las funciones L . El estudio

de esta distribución es otro de los objetivos que se aborda en el proyecto. Por otra parte, el problema de extender los resultados clásicos fundamentales de la integración y del análisis armónico al contexto de los espacios de Banach ha sido considerado por numerosos autores y ha dado lugar, en ocasiones, a la introducción de propiedades geométricas que caracterizan los espacios de Banach para los que el resultado escalar permanece válido. Algunas de estas propiedades trascienden el campo donde se originaron y tienen aplicaciones en otras áreas de la matemática. Determinar condiciones que debe cumplir un espacio de Banach para que sea válida la existencia de desarrollo en serie de las funciones vectoriales será otro de los temas en que se trabajará.

Apuntes de la 'Reina de las Ciencias'

La Matemática es el estudio de patrones en las estructuras de entes abstractos y en las relaciones entre ellas. Algunos matemáticos se refieren a ella como la 'Reina de las Ciencias'. Sin embargo, algunos matemáticos no la consideran una ciencia natural. Principalmente, los matemáticos definen e investigan estructuras y conceptos abstractos por razones puramente internas

a la matemática, debido a que tales estructuras pueden proveer, por ejemplo, una generalización elegante, o una útil herramienta para cálculos frecuentes. Además, muchos matemáticos estudian sus áreas de preferencia simplemente por razones estéticas, viendo así la matemática como una forma del arte en vez de una ciencia práctica o aplicada. Sin embargo, las es-

tructuras que los matemáticos investigan frecuentemente sí tienen su origen en las ciencias naturales, y muchas veces encuentran sus aplicaciones en ellas, particularmente en la Física. La matemática es un arte, pero también una ciencia de estudio. Informalmente, se puede decir que la matemática es el estudio de los "números y símbolos".



Hacia nuevos derivados de la alianza carbono-metal

Los avances en la historia reciente de la Química Organometálica sirven de telón de fondo al proyecto de excelencia denominado 'Compuestos de los elementos de los grupos 9, 10 y 12 que contienen enlaces M-C. Aspectos fundamentales y aplicaciones prácticas'. Desde una gran variedad de productos orgánicos hasta los nuevos materiales logrados en Nanotecnología, las derivaciones de esta línea científica llevan a financiar a la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa una investigación de excelencia con 216.200 euros.

La Química organometálica abarca los compuestos químicos con enlaces entre un átomo de carbono y un átomo metálico. Tal como señala el catedrático Ernesto Carmona, de la Universidad de Sevilla (US), "durante las últimas tres décadas ha tenido lugar un extraordinario desarrollo" de esta disciplina. El avance ha permitido un conocimiento profundo de la reactividad de las especies que contienen enlaces metal-carbono. Dichas especies organometálicas han revelado, así, tener innumerables aplicaciones.

El principal de estos desarrollos es el uso como catalizadores en procesos homogéneos "que operan con niveles extraordinarios de eficiencia, en la preparación de una inmensa variedad de productos orgánicos". Pero los compuestos organometálicos tienen también gran utilidad en otros campos, como por ejemplo "la preparación de nuevos materiales a partir de estos complejos, que tiene una importante repercusión en el área de la Nanotecnología".

Existen actualmente retos de enorme importancia para la Química en los que los complejos organometálicos pueden jugar un papel protagonista. Este proyecto

de excelencia propone realizar investigaciones sobre tres áreas. La primera abordará la activación y funcionalización de los enlaces C-H (carbono-hidrógeno) de los hidrocarburos, tanto saturados como insaturados. La segunda se centrará en la catálisis de polimerización y la catálisis asimétrica, tanto en medios convencionales como en fluidos supercríticos y en líquidos iónicos. Dicha línea forma parte de lo que se conoce como 'química sostenible' o 'química verde'. Por último, se quiere investigar la síntesis de materiales nanoestructurados, especialmente calcogenuros de cinc y cadmio.

De manera más específica, el primero de los apartados constituye un "difícil reto" de la química actual, en palabras de Ernesto Carmona. Se pretende profundizar en los aspectos fundamentales de la activación C-H en complejos de Rodio, Iridio, Paladio y Platino; así como conseguir la funcionalización catalítica de los alcanos mediante boranos y alanos.

Respecto a las transformaciones catalíticas de polimerización y asimétrica, "se encuentran entre las de mayor importancia en la actualidad". Para las primeras



Centro

Universidad de Sevilla



Área

Física, Química y
Matemáticas



Código

FQM 672



Nombre del proyecto

Compuestos de los
elementos de los grupos
9, 10 y 12 que contienen
enlaces M-C. Aspectos
fundamentales y aplicaciones
prácticas



Contacto

Ernesto Carmona Guzmán
Telefono: 95 4557155
e-mail: guzman@us.es



Dotación

216.200 euros



Confluencia científica



La química es la ciencia que estudia la estructura de la materia, sus propiedades, la composición, la reactividad y las transformaciones que experimenta. Debido a la diversidad de la materia (que tiene el átomo como partícula fundamental), los químicos a menudo se han ocupado en el estudio de como interactúan los átomos unos con otros para formar moléculas. Por lo tanto, la química

involucra el estudio de fenómenos microscópicos, tales como grupos de átomos y sus características en la escala nanométrica, y los fenómenos macroscópicos, tales como la interacción de las proteínas y el ADN en soluciones complejas y las propiedades de nuevos materiales. La química organometálica es el estudio de los compuestos químicos con enlaces entre un átomo de carbono y un átomo metálico, de su síntesis y

reactividad. En este contexto, el término "metal" se define de forma muy laxa, e incluye elementos como el silicio o el boro, que no son metálicos sino metaloides. La química organometálica combina aspectos de la química orgánica y de la química inorgánica. Tiene importancia en catálisis, en el refinamiento del petróleo y en la producción de polímeros orgánicos.

se usarán nuevos catalizadores de Níquel y de Paladio, así como el desarrollo de cocatalizadores basados en compuestos de tipo AIR(OR')₂. Para las segundas, se efectuará el anclaje de complejos metálicos quirales sobre un soporte sólido. Con ello se crearán sistemas heterogéneos de menor coste económico y ambiental que los actuales. Se quiere adaptar los procesos catalíticos anteriores a los medios no convencionales de la denominada química verde: fluidos supercríticos y líquidos iónicos.

El tercer punto supone estudiar la síntesis y las características de nanoestructuras basadas en óxidos simples y mixtos de cinc, y en calcogenuros de Cinc y Cadmio (MS, MSe y MTe). Para ello, se hará uso de una metodología original, basada en el empleo de compuestos de Zn(II) y Cd(II)

como precursores. El equipo investigador comprende tres grupos independientes procedentes de áreas complementarias. De hecho, el proyecto tiene un marcado carácter transversal que requerirá contribuciones esenciales de las respectivas áreas de trabajo. Un proyecto transversal como éste se alimenta de áreas de trabajo diversas.

Estos ingredientes provienen de los tres grupos que toman parte en él. Las contribuciones esenciales se refieren, en primer lugar a la síntesis orgánica, así como los materiales polímeros. También se encuentra presente la síntesis de nuevos materiales con propiedades semiconductoras, como sensores de gases, o diodos emisores de luz. Dicho aspecto exige un profundo conocimiento de la química orgánica e inorgánica de los elementos de los grupos principa-

les: cinc, cadmio, boro, aluminio, selenio, telurio, etc. Por otro lado, el empleo de fluidos supercríticos requiere tecnología química específica para preparar reacciones a alta presión. Finalmente, la química teórica y computacional es omnipresente en los objetivos.

¿sabías que...

El Grupo de Química Organometálica y Catálisis Homogénea pertenece al Instituto de Investigaciones Químicas (IIQ), centro mixto del CSIC y la US. Su génesis se remonta a 1977, año en que Ernesto Carmona estableció una línea de investigación para la Hispalense en esta disciplina. El hoy catedrático se había iniciado en ella durante una estancia postdoctoral en el Imperial College of Science and Technology de Londres, con el Premio Nobel de Química Sir G. Wilkinson. Los demás miembros se incorporaron al grupo durante los años siguientes. A mediados de los noventa, el equipo del profesor Carmona constituyó uno de los pilares de la creación del IIQ, englobado en el CICIC.



De aceituna de mesa a combatir el temible sida

El Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Granada (UGR) afronta el reto de explorar las aplicaciones terapéuticas de una sustancia de origen agrícola: el ácido maslínico. Esta molécula se distingue, entre otras características, por inhibir enzimas que utilizan microorganismos causantes de graves patologías, como el sida. 'Diseño, síntesis y evaluación de inhibidores de serín proteasas a partir de ácido maslínico y sus derivados' se financiará con 115.000 euros.



Centro

Universidad de Granada



Área

Física, Química y Matemáticas



Código

FQM 1228



Nombre del proyecto

Diseño, síntesis y evaluación de inhibidores de serín proteasas a partir de ácido maslínico y sus derivados



Contacto

Andrés García-Granados López de Hierro

Teléfono: 958 2 43174

e-mail:



Dotación:

115.000 euros



sciencepics.org

El ácido maslínico se aísla de los orujos de aceituna. Se trata de "un triterpeno pentacíclico que posee una actividad perfectamente demostrada como inhibidor de los serín proteasas", según el director del proyecto, el catedrático Andrés García-Granados. Estas enzimas están "implicadas en mecanismos reguladores del balance proteico y otros procesos de gran interés en biología molecular".

Pero además, diversos microorganismos, como determinadas variedades de virus y protozoos, usan las serín proteasas. Entre los primeros se encuentra el VIH, causante del virus de inmunodeficiencia humana (sida). Respec-

to a los protozoos, los parásitos del grupo Apicomplexa están detrás de infecciones como la malaria o la toxoplasmosis.

"Afortunadamente, el ácido maslínico es un inhibidor de las enzimas proteasas, es decir, enzimas que rompen proteínas", explica el profesor de la UGR. "¿Para qué inhibir la acción de esas proteasas? Las proteasas son herramientas que utilizan muchos sistemas biológicos", como el sida, a la hora de expandirse por el organismo. De ahí que la acción potencial más espectacular del ácido maslínico sea inhibir su proliferación. No en vano, "este virus utiliza una serín proteasa para abrirse cami-



no desde dentro de una célula infectada hacia el medio extracelular. De esa manera sigue su camino hacia la infección extensiva" del paciente afectado por dicho síndrome.

Por otra parte, el ácido maslínico sirve para luchar contra el parásito *Cryptosporidium*, que todos portamos, pero que por su carácter oportunista sólo invade organismos inmunodeprimidos. Esto le convierte en el causante de las enormes diarreas que sufren las personas portadoras de sida. Aunque el número de especies y cepas de este protozoo no se conoce con exactitud se consideran, basándose en el tamaño de los ooquistes, dos especies que afectan a los mamíferos: *C. parvum* y *C. muris*; el primero se cree que es el que causa enfermedad diarreica en los humanos. Como característica tintorial sus ooquistes tienen propiedades de ácido-alcohol resistencia. La importancia de dedicar los recursos necesarios para un proyecto como éste deriva de la trascendencia de estas implicaciones, junto con la relativa facilidad para obtener al ácido maslínico. Otros fármacos inhibidores de proteasas requieren un proceso de síntesis muy costoso, debido a la complejidad estructural que presentan. Por

el contrario, el ácido maslínico puede extraerse de los residuos de la industria oleícola. Este hecho constituye una importante ventaja en un territorio como Andalucía. La sustancia se halla presente, en gran cantidad, en la cera que contiene la piel de la aceituna. "Parte de estos ácidos se los lleva el aceite cuando se prensa la aceituna (si no se 'refina'), pero la gran mayoría queda en el orujo que se produce en ese prensado", aclaran los investigadores.

El proyecto de la UGR se estructura en tres partes: estudio de química computacional, síntesis de los derivados calculados previamente y pruebas biológicas de las actividades de los derivados así sintetizados. Se pretende estudiar minuciosa y rigurosamente, desde la perspectiva de la química computacional, los efectos inhibidores del ácido maslínico sobre las serín proteasas. Una vez realizadas las modificaciones estructurales calculadas, el grupo comprobará la actividad de estos derivados en balance proteico, frente a los enzimas del grupo de las caspasas y frente a parásitos del grupo *Apicomplexa*. Se trata de un gran grupo de protozoos parásitos, caracterizados por la presencia de un complicado complejo api-

¿sabías que...

La Universidad de Granada patentó internacionalmente un procedimiento industrial para la obtención de los ácidos oleanólico y maslínico con pureza considerable y con rendimientos del 0,4 y 0,8%, respectivamente, a partir del orujo seco. Esto significa que a partir de una tonelada de orujo se pueden aislar 4 kilos de oleanólico y 8 de maslínico. Esto representa una considerable magnitud, pues una orujera media puede procesar en un día del orden de 500 toneladas de orujo. El orujo de ese día contiene unas 2 toneladas de oleanólico y 4 de maslínico. "Nadie diría que de una montaña negra de orujo se pueden aislar tantos kilos de un producto blanco con aspecto de polvo de tiza", ilustra Andrés García-Granados.

cal. Los apicomplexos tienen una membrana compuesta de alveolos, hecho que, junto con otras características, los ubica en el grupo de los llamados alveolados. Entre las enfermedades parasitarias que producen se encuentran la malaria (*Plasmodium spp.*), la toxoplasmosis (*Toxoplasma gondii*), la criptosporidiosis (*Cryptosporidium parvum*), la ciclosporiasis (*Cyclospora cayentanensis*), la isosporosis (*Isospora belli*), etc. El *Pneumocystis carinii* previamente se clasificó dentro de los Apicomplexa, pero hoy se sabe que está más relacionado a los hongos.

Suplemento ideal

Una tesis doctoral de Mónica María Fernández Navarro, dirigida por el también profesor de la UGR José Antonio Lupiáñez Cara, incluyó el ácido maslínico en la dieta de las truchas arco iris. Los resultados fueron claros: los peces cuyas dietas se completan con ácido maslínico crecen más y en menos tiempo, y mueren menos. Viven mejor, sus escamas y aletas presentan un mejor aspecto y el

índice de mortalidad habitual en las piscifactorías, entre el 5 y el 10%, disminuye prácticamente hasta cero. Esta investigación nació tras conocerse los trabajos del profesor Andrés García-Granados sobre la inhibición del SIDA. El ácido maslínico se investiga también incluso como tratamiento complementario contra el cáncer de colon o el envejecimiento prematuro.





El lenguaje químico de nuestras plantas

El Grupo de Aleopatía de la Universidad de Cádiz (UCA) lleva casi dos décadas aislando, caracterizando, sintetizando y evaluando la bioactividad de más de 500 sustancias orgánicas implicadas en las interacciones ecológicas de plantas y microorganismos. Una partida de 146.000 euros se ha destinado a su estudio sobre 'Obtención, identificación y determinación estructural de compuestos con actividad biológica en vegetales: pimiento, aloe vera y uva'.



La Aleopatía es una disciplina pujante dentro del área de la Ecología Química. Se dedica a estudiar cualquier proceso que involucre metabolitos preferentemente secundarios, de origen vegetal o microbiano, que influyen en el crecimiento y desarrollo de los sistemas biológicos. Esto puede implicar tanto efectos positivos como negativos. En concreto, según Francisco Antonio Macías Domínguez, catedrático de la UCA, "el proyecto plantea la identificación y cuantificación de los compuestos bioactivos presentes en pimiento, aloe vera y uva; en particular, como antioxidante y como agroquímico".

Esta investigación comenzará por identificar los compuestos con actividad biológica a través de fraccionamiento biodirigido. Para evaluar los niveles de actividad de esas sustancias se realizarán bioensayos de diferentes extrac-

tos, y se identificarán las diversas especies químicas responsables de la actividad en cuestión. Esa herramienta "permite decidir los procedimientos de extracción, las variedades y el momento de recolección, así como la guía de todo el proceso de aislamiento de los principios activos", apunta el profesor Macías.

Determinar los compuestos bioactivos pasa por desarrollar métodos de cuantificación específicos para ellos. Asimismo, determinar las variedades con mayor cantidad de compuestos activos requiere poner a disposición de las empresas productoras métodos de análisis no destructivos. Éstos exigen no alterar las muestras, un bajo coste de mantenimiento y una mínima generación de residuos. Las técnicas de espectroscopia infrarroja, basadas en la distinta radiación de ese tipo que absorben las moléculas, permiten



Centro

Universidad de Cádiz



Área

Física, Química y Matemáticas



Código

FQM 1282



Nombre del proyecto

Obtención, identificación y determinación estructural de compuestos con actividad biológica en vegetales: pimiento, aloe vera y uva



Contacto

Francisco Antonio Macías Domínguez
Teléfono: 956 01 63 02
email: famacias@uca.es.



Dotación

146.400 euros



Aislamiento de productos naturales



El Grupo de Aleopatía de Cádiz (GAC) investiga tres líneas fundamentales: aislamiento de productos naturales con actividad fitotóxica procedentes de cultivos comerciales (trigo, arroz y girasol); síntesis y evaluación de relaciones estructura-actividad de productos naturales

y análogos y diseño de nuevas metodologías de evaluación de la bioactividad aleopática, con nuevos protocolos de bioensayo. Más de 120 artículos en revistas científicas internacionales, y colaboraciones con más de 20 grupos e instituciones científicas de todo el mundo, le han valido

prestigiosos reconocimientos en la Química de Productos Naturales Bioactivos. El Premio Rhone-Poulenc-Rorer, de la Sociedad Fotoquímica Europea; el NIAES Scientific Award, del Ministerio de Agricultura de Japón y la Placa de Plata de la Provincia de Cádiz son buenas muestras.

saber su estructura. En concreto, la espectroscopia infrarroja en el intervalo cercano (NIR) y en el intervalo medio (MIR) se aplican actualmente en otras áreas de análisis de alimentos. Las industrias disponen de estos equipos comerciales y metodologías. "Con las metodologías desarrolladas, las empresas podrán determinar in situ la presencia de los compuestos de interés mediante análisis que podrán ser realizados por personal con una formación mínima", según Macías Domínguez.

Por otra parte, se evaluará la influencia de las variedades de pimientos, aloe vera y uvas en el contenido final de compuestos con actividad biológica, así como diversas variables de producción con respecto a su influencia en el contenido final. Con estos datos, se buscará la fecha más apropiada

para la recolección del cultivo, con la mayor cantidad posible de compuestos activos en el producto.

También se plantea incrementar el valor añadido de los cultivos aprovechando partes de las plantas o frutos actualmente insuficientemente utilizados. Esto implica diseñar sistemas de recuperación a partir del material vegetal o de sus subproductos. Se realizará una caracterización y el estudio de la posibilidad técnica y económica de su recuperación.

Otro momento será el estudio de la relación estructura-actividad de las moléculas identificadas. Una vez determinados los compuestos activos de cada extracto, se deben conocer los requerimientos físico-químicos de sus diferentes actividades biológicas. Finalmente, modificar químicamente los

compuestos para una mayor actividad o menor degradabilidad permite determinar las 'partes activas' de la molécula y modular su actividad, degradabilidad y solubilidad.

¿sabías que...

Los productos naturales son una fuente atractiva de potenciales productos agroquímicos. No sólo por su diversidad en estructuras químicas, sino por su acción biológica específica y su carácter inocuo, a priori, sobre el medio ambiente. En el campo de la agricultura, La Aleopatía ha hecho especial hincapié en el control biológico de malas hierbas por medio de efectos selectivos. Es el método que más se ajusta a los requerimientos energéticos, económicos y ecológicos de una nueva visión en el manejo de ecosistemas agrícolas. Sus posibles aplicaciones permitirán diseñar metodologías y estrategias encaminadas a la protección vegetal, control integrado de plagas, enfermedades y malas hierbas, control biológico, fenómenos de resistencia y evaluación ecológica de productos fitosanitarios.



A propósito de los fluidos nanocompuestos

Hay acuerdo general entre todas las instituciones responsables del desarrollo científico en que una de las vías más prometedoras y de mayor valor añadido entre las que pueden suponer avance científico es la de la ciencia y tecnología a escala nanométrica. Se habla ya de modo rutinario de nanotecnología

o de nanociencia. En este contexto, un grupo de investigación de la Universidad de Granada ha sido dotado con 237.000 euros, por parte de la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa, para estudiar fluidos nanocompuestos con propiedades viscoelásticas controlables por campos eléctricos y magnéticos.

Concretamente, las investigaciones de este equipo de la UGR, liderado por Ángel V. Delgado Mora, se enmarcan en tres campos científicos: en el de los fluidos magnéticos (FMR), el de los fluidos electrorreológicos (FER) y el de los portadores magnéticos de fármacos (PMF).

Los fluidos magnéticos hacen referencia a sistemas constituidos por partículas coloidales magnéticas dispersas en un líquido, para los que es posible controlar el comportamiento hidrodinámico mediante la acción de intensas fuerzas de polarización magnética. De hecho, son capaces de cambiar su viscosidad en varios órdenes de magnitud en tiempos menores de un milisegundo. Los

problemas fundamentales para su transferencia al sector industrial (lubricantes activos) provienen de su espesamiento tras uso prolongado y su consiguiente dificultad de redispersión (en reposo el hierro forma un sedimento muy compacto cada vez más difícil de redispersar, consecuencia de su alta densidad y magnetización remanente), que representan una barrera para el uso a gran escala de estos lubricantes.

Así en este campo, como explica su responsable Ángel V. Delgado, el proyecto pretende desarrollar FMR constituidos por partículas de distintos materiales magnéticos de muy diferente tamaño medio (FMR con bimodalidad extrema) en los que se mejoren la



Centro

Universidad de Granada



Área

Física, Química y Matemáticas



Código

FQM 410



Nombre del proyecto

Fluidos nanocompuestos con propiedades viscoelásticas controlables por campos eléctricos y magnéticos



Contacto

Ángel V. Delgado Mora
Teléfono: 958 24 32 09
e-mail: adelgado@ugr.es



Dotación:

237.000 euros



¿sabías que...

El valor de estas investigaciones estriba en que los materiales y estructuras cuyos componentes tienen tamaños nanométricos pueden mostrar propiedades (físicas, químicas, biológicas,...) diferentes, potencialmente mejores, debido a sus reducidas dimensiones. Así, en el campo científico de los portadores magnéticos de fármacos (PMF), en el que trabajan los investigadores de este proyecto de excelencia, uno de los sistemas de liberación de fármacos actualmente más investigados se basa en nano-sistemas capaces de liberar fármacos en el lugar del organismo en que su efecto es necesario y durante un período de tiempo apropiado.

estabilidad coloidal y la respuesta magnetorreológica; analizar los mecanismos de formación de estructuras en estos sistemas; estudiar la viabilidad técnica de los productos sintetizados; y el desarrollo de nuevos FMR compuestos por partículas magnéticas nanométricas y partículas no magnéticas micrométricas, con propiedades físicas que representen un avance científico-técnico relevante.

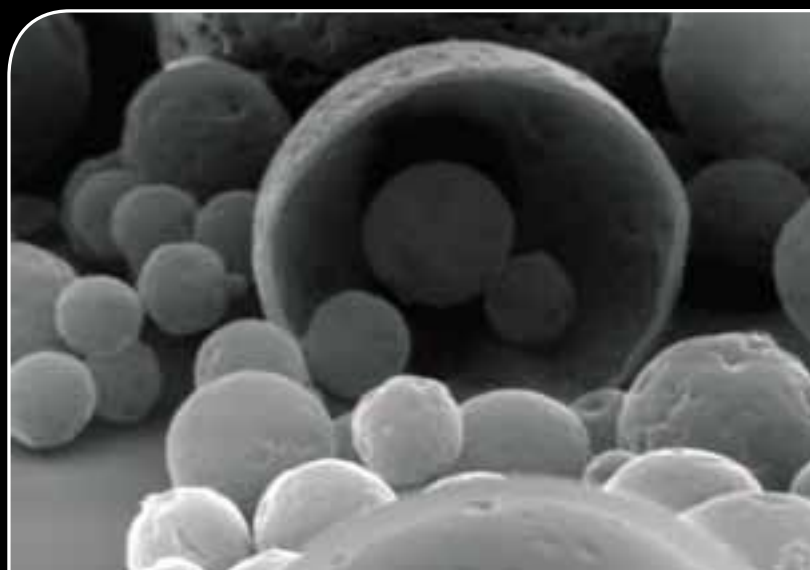
Los fluidos electrorreológicos (FER) constituyen un amplio conjunto de fluidos y suspensiones coloidales que experimentan cambios muy notables en su estructura, propiedades eléctricas, de flujo, ópticas, etc., al aplicarles un campo eléctrico. En este terreno se pretende, entre otras cosas, realizar un tratamiento superficial de las partículas y efecto electrorreológico., un desarrollo sistemático de experimentos con partículas modelo (esféricas y esféricas) de distinta naturaleza; y un estudio de la dispersión dieléctrica en fluidos ER, en particular, del efecto de la frecuencia del campo eléctrico aplicado, investigando por tanto la cinética de los fenómenos responsables del efecto ER.

Finalmente, otro de los objetivos de este proyecto de excelencia es la investigación de los llamados portadores magnéticos de fármacos (PMF), típicamente formados por núcleos de material magnético, recubiertos por polímero. En palabras de Delgado, "los PMF pueden ser especialmente útiles como portadores biocompatibles

en el nuevo campo de la terapia local o regional de tumores".

En este terreno el proyecto pretende: la síntesis de nuevos PMF, en los que se optimice la proporción núcleo magnético/portador polimérico; y un estudio de la capacidad de absorción y la cinética de liberación controlada de fármacos mediante PMF, eligiendo adecuadamente el polímero biocompatible y el fármaco idóneo. Los grupos de investigación implicados tienen amplia experiencia en la preparación y caracterización de partículas coloidales de tamaño submicrométrico, así como en la determinación, explicación y predicción de sus propiedades físicoquímicas y las de sus suspensiones. Pero, además, el equipo de científicos granadinos ha avanzado en la preparación de sistemas de nanopartículas que han demostrado su aplicabilidad en el terreno de la tecnología, especialmente en los campos de diseño de fluidos magnetorreológicos y electrorreológicos, y de nanopartículas compuestas adecuadas para el transporte de fármacos.

Un área de rápido crecimiento



La definición de materiales nanocompuestos se han ampliado significativamente para abarcar una extensa variedad de sistemas tales como uni-dimensional, bi-dimensional, tri-dimensional y materiales amorfos, hechos a partir de distintos componentes y trabajados a escala nanométrica, según la definición de MSU Chemistry Web Site -Nanocomposites. El tipo general de materiales orgánicos / inorgánicos de nanocompuestos es una área de investigación de rápido crecimiento. Esfuerzos significativos se centran en la habilidad de obtener el control de las estructuras a nanoescala vía aproximaciones sintéticas innovadoras.



El extraordinario poder de las fuerzas eléctricas

El campo de la electrohidrodinámica estudia la interacción que existe entre fluidos y campos eléctricos, profundizando tanto en la generación de las cargas eléctricas como en el movimiento que estas cargas inducen en líquidos y gases. Los estudios sobre Electrohidrodinámica son de gran aplicación práctica

en electrotecnia, pintura electrostática e intercambiadores de calor, entre otros. La evacuación de calor en transformadores de potencia o las bombas electrohidrodinámicas (usadas para empujar fluidos) constituyen otros dos ejemplos prácticos de la utilización de campos eléctricos en el movimiento de líquidos. En la actualidad un grupo de 18 investigadores de la Universidad de Sevilla, dirigidos por el Dr. Antonio Castellanos Mata, se ha propuesto profundizar en el conocimiento básico de la electrohidrodinámica de suspensiones y la mecánica y reología (movimiento) de medios granulares cohesivos (arena húmeda, arcillas, toners, etc.). Ahondar en la investigación relacionada con estos campos es el objeto de un proyecto de excelencia incentivado con 235.000 euros por la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa.

Una de las múltiples áreas dentro de la investigación en Electrohidrodinámica desarrollada por estos científicos está relacionada con la rotura de chorros de agua. "Todos estamos familiarizados con los chorros de agua. Si un chorro es lo suficientemente largo éste termina rompiéndose en gotas. Nosotros no sólo somos capaces de controlar esta rotura por medio de campos eléctricos, sino que además hemos medido el inicio de la rotura (inestabilidad Rayleigh-Chandrasekhar)

con la mayor precisión a nivel mundial", explica Antonio Castellanos. Entre las aplicaciones de este tipo de estudios está la relacionada con la impresión industrial (etiquetado, marcación, etc.) por chorro de tinta que, si bien no requiere una calidad demasiado elevada, sí necesita de mucha rapidez y especial flexibilidad en el tamaño y trayectoria de las gotas. En ese sentido, este grupo de científicos ha colaborado a través de sus investigaciones con la empresa francesa IMA-

Centro

Universidad de Sevilla

Área

Física, Química y Matemáticas

Código

FQM 421

Nombre del proyecto

Electrohidrodinámica de suspensiones y reología de medios granulares cohesivos

Contacto

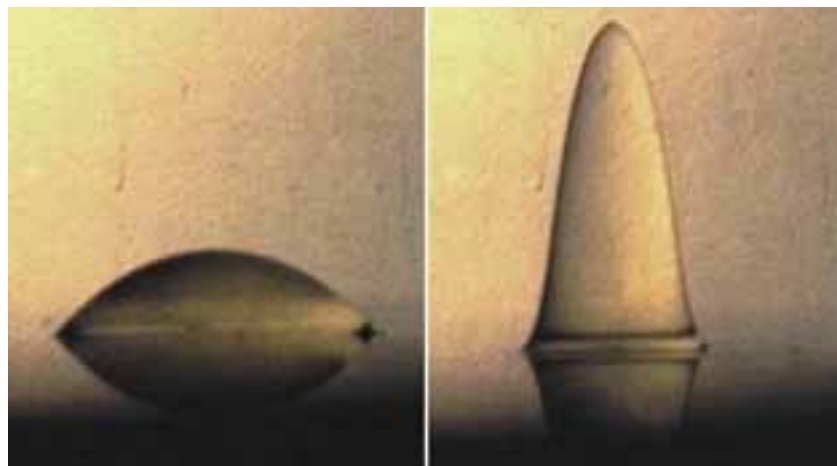
Antonio Castellanos Mata

Teléfono: 954 55 78 53

e-mail: castella@us.es

Dotación

235.000 euros





Reología de medios granulares cohesivos



El movimiento o flujo de medios granulares cohesivos, como la arcilla o la arena húmeda, es otra de las áreas que ocupan el interés de este grupo de científicos sevillanos que tratan de profundizar en la ruptura, el flujo, la propagación del sonido y las descargas eléctricas que se producen en este tipo de medios, dado el riesgo de explosiones que estas descargas pueden

conllevar. Así, el proyecto de excelencia incluirá el estudio de la propagación de los ultrasonidos, y la forma en que fluyen y se fracturan estos medios granulares. Para ello, han desarrollado aparatos para la medida cuantitativa de sus propiedades mecánicas. Uno de ellos, conocido en la comunidad internacional como el Sevilla Powder Tester, está patentado y se usa rutinariamente en la planta de

producción de toners de Xerox en Rochester, USA, empresa con la que estos investigadores han venido colaborando desde el año 1991. Asimismo, el Instituto Max Planck de Alemania y el Institute of Particulate Engineering de New Jersey en USA se han interesado también por su uso. En los estudios de avalanchas de estos granos cohesivos el grupo estudiará un nuevo dispositivo: el Triana Powder Tester (en proceso de patente). Esta investigación es relevante para entender mejor los flujos geotécnicos (avalanchas de rocas o nieve, deslizamientos y hundimientos del suelo), que son causa de enormes pérdidas humanas y materiales. (Más información en <http://www.us.es/ehd-cgm>)

JE, líder en este tipo de procesos. Por otro lado, y también dentro del área de la Electrodinámica, el grupo estudia la elaboración de dispositivos miniaturizados para posicionar células, bacterias, virus, ADN y otras biopartículas que cuentan con sensores capaces de detectar sustancias tóxicas y contaminantes. “Se trata de dispositivos muy útiles que deben ser miniaturizados y portátiles para que puedan usarse in situ. Su cometido sería saber si un líquido está contaminado o no con algún elemento tóxico o nocivo. Nuestro grupo se ocupa de la parte eléctrica de la fabricación de estos dispositivos”, comenta Castellanos.

Asimismo, otro de los estudios relacionados con la electrohidrodinámica se centra en los cables de alta tensión, en los que tienen lugar descargas eléctricas debido, bien a la existencia de partículas contaminantes, bien a la propia rugosidad de los cables. En ocasiones las culpables

de estas descargas son gotas de lluvia que adoptan forma aumentando el campo eléctrico local e ionizando el aire. “En nuestro laboratorio medimos la producción de ozono y varios óxidos nitrosos en aire seco. En condiciones ambientales debido a la contaminación se generarán también óxidos de sulfuro. La toxicidad de estos compuestos puede presentar un riesgo para la salud pública mucho más importante que la existencia de los propios campos eléctricos y magnéticos de la línea”, afirma Castellanos.

Por último, el proyecto incluye el estudio de la física de medios granulares formados por partículas artificiales micrométricas y nanométricas de uso industrial. Estas partículas tienen una estructura compleja, tal como se muestra en una de las imágenes, donde puede observarse una partícula de ferrita de 100 micras recubierta de una capa de polímero sobre la cual están ad-

heridas partículas de 10 micras (toners), que a su vez tienen partículas nanométricas sobre su superficie (no visibles por falta de resolución). El mecanismo para reducir la cohesión es similar al utilizado por ciertas esporas y pólenes, razón por la cual este grupo colabora en un proyecto inglés, Leverhume, para aprender de la naturaleza de estas partículas y estudiar cómo mejorar su diseño.

¿sabías que...

Los granos secos, de tamaño menor a las 100 micras y sometidos a fuerzas de Van der Waals, son materiales granulares cohesivos, en oposición a los granos secos de tamaño superior que se consideran no cohesivos. En régimen cuasi-estático estos materiales cohesivos se comportan como la arena húmeda, es decir, no fluyen grano a grano sino por bloques. Un ejemplo es la harina fina que por esta razón se sirve a cucharadas y no desde el recipiente como el café en grano o el arroz. Por la misma razón existen los relojes de arena para medir el tiempo, y no los de harina.



Una teoría informativa para átomos y moléculas

Bajo el título 'Funciones especiales, entropía cuánticas y aplicaciones bio y nano-tecnológicas', investigadores de la Universidad de Granada han sido incentivados con 85.000 euros por la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa para desarrollar conceptos y técnicas físico-matemáticas que sean capaces de interpretar los fenómenos no lineales de sistemas micro-

y nanotecnológicos (átomos y moléculas), así como de identificar patologías ligadas a procesos biotecnológicos relacionados con la actividad eléctrica cardíaca y cerebral y con las señales del habla. La ortogonalidad polinómica y la entropía de información y sus diversas materializaciones matemáticas, constituyen los dos pilares fundamentales del proyecto.

Un equipo de científicos de las Universidades de Granada, Almería y Sevilla, dirigidos Jesús Sánchez Dehesa, Catedrático de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad de Granada, trabaja en un proyecto de excelencia con el que se pretende, desde el punto de vista de la investigación básica, contribuir al establecimiento de una teoría de la información de los sistemas mecano-cuánticos, que permite obtener una nueva perspectiva del desorden y la complejidad de sistemas atómicos y moleculares (incluyendo el ADN), y que está colaborando de forma determinante a la fundamentación de la moderna información y computación cuánticas.

Desde el punto de vista aplicado, el grupo de Granada quiere contribuir a elucidar los procesos fisiológicos caracterizados por señales altamente oscilatorias y ayudar a establecer protocolos basados en las magnitudes entrópicas de tales señales que posibiliten la identificación de patologías cardíacas, cerebrales y del habla. Para ello, se empleará una metodología basada en la teoría

de las funciones especiales de la matemática aplicada y de la física matemática, y de la teoría de la información clásica y cuántica. Por una parte, se hace necesario desarrollar el conocimiento de las propiedades algebraicas y espectrales de los polinomios con diversos tipos de ortogonalidad no-estándar; a saber, Sobolev, variante y matricial, en los que este equipo está llevando a cabo un trabajo pionero.

Se espera la consecución de resultados que no sólo sean relevantes por sí mismos desde el punto de vista matemático, sino que permitan el diseño de métodos computacionales de resolución de

¿sabías que...

La computación cuántica es un paradigma de computación distinto al de la computación clásica. Se basa en el uso de qubits en lugar de bits, y da lugar a nuevas puertas lógicas que hacen posibles nuevos algoritmos. Una misma tarea puede tener diferente complejidad en computación clásica y en computación cuántica, lo que ha dado lugar a una gran expectación, ya que algunos problemas intratables pasan a ser tratables.

Centro

Universidad de Granada

Área

Física, Química y
Matemáticas

Código

FQM 481

Nombre del proyecto

Funciones especiales,
entropía cuánticas y
aplicaciones bio- y nano-
tecnológicas

Contacto

Jesús Sánchez-Dehesa
de Hierro
Teléfono: 958 24 32 15
e-mail: dehesa@ugr.es

Dotación:

85.000 euros

ecuaciones en derivadas parciales que tan a menudo modelizan el movimiento de numerosos sistemas de carácter micro, nano y biotecnológico; y ello, tanto aisladamente como en presencia de campos electromagnéticos externos. Por otra parte, se pretende extender los conceptos y técnicas actuales de la teoría de información clásica y cuántica y, en particular, identificar las medidas de información más adecuadas para estudiar el desorden interno y la complejidad de los sistemas antes mencionados. La dimensionalidad de estos sistemas varía en muchos órdenes de magnitud, lo que hace que las técnicas de cálculo teórico-computacional han de ser necesariamente de amplio espectro.

El equipo de investigación responsable de este proyecto mantiene colaboraciones científicas con investigadores de más de diez universidades y centros de investigación de prestigio de la Unión Europea, Japón y Estados Unidos de América.

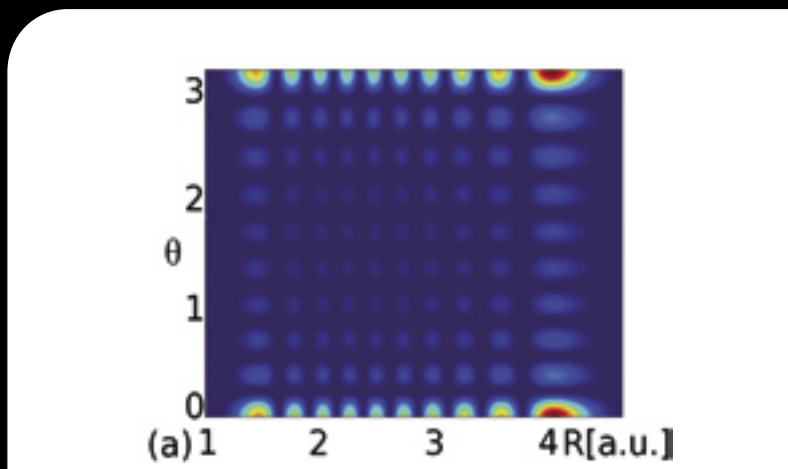
Un apartado particular ejemplifica el doble carácter fundamental y aplicado del proyecto, que consiste en el estudio de señales altamente oscilatorias por medio de métodos e ideas extraídos de la teoría de información y del análisis de Fourier. Este tipo de señales se caracterizan por densidades altamente oscilantes, típicas tanto de sistemas atómicos y moleculares de alta energía (sistemas Rydberg) como de procesos fisiológicos ligados a la actividad cardiaca, cerebral y a la dinámica neuronal y articular del tracto vocal que se manifiestan en los electrocardiogramas, electroencefalogramas y sonogramas.

Tanto los estados Rydberg como las señales fisiológicas son fenó-

menos altamente oscilatorios que se caracterizan por densidades de probabilidad intrincadas. El estudio de tales densidades requiere la utilización de medidas de información complementarias, de carácter global y local. Dado que en este tipo de fenómenos las señales están muy localizadas tanto en tiempo como en frecuencias, se hace necesario la utilización de funciones wavelet y técnicas refinadas de teoría de aproximación. El estudio de los estados Rydberg de los sistemas microscópicos requiere además la consideración de los efectos relativistas y, por tanto, la resolución de las ecuaciones de onda mecano-cuánticas relativistas por medio de algoritmos computacionales de elevada

precisión. En cuanto al habla, el grupo de Granada ha de llevar a cabo primeramente un trabajo experimental (por ejemplo, en el Laboratorio de Voz de la Universidad de Granada) seguido de un proceso teórico-computacional de identificación y búsqueda de regularidades en los correspondientes sonogramas por medio de las magnitudes entrópicas de tales señales, principalmente de tipo wavelet. Este esquema de trabajo se llevará a cabo en primer lugar con personas normales y, más tarde, con personas con problemas. El objetivo último es doble: hacer un análisis entrópico del habla castellana y contribuir a identificar y clasificar patologías del habla por medios entrópicos.

Carga computacional



Este proyecto requiere la utilización de algoritmos numéricos de diversa naturaleza. El equipo de investigadores granadinos posee una experiencia considerable en el uso de métodos numéricos y simbólicos. En este sentido, se pretende por una parte desarrollar algoritmos eficientes para el cálculo de medidas de información de polinomios ortogonales que serán la base para la determinación de las entropías cuánticas de los procesos y sistemas micro y nanotecnológicos de interés. Por otra parte, el grupo de expertos tratará de construir las familias de wavelets poli-

nómicos más pertinentes y su implementación para la caracterización entrópica de las señales fisiológicas, particularmente las señales del habla. Finalmente, se diseñará la estrategia computacional no-perturbativa más adecuada para la resolución de las ecuaciones de movimiento no-integrables de los sistemas moleculares de interés. En este sentido se usarán técnicas de tipo Montecarlo y métodos computacionales híbridos, que combinan técnicas de rejilla, transformaciones de Fourier rápidas y técnicas de propagación precisas para los casos de dependencia temporal.



Biodiesel, motor de futuro

El incremento del precio de los carburantes hace de los biocarburantes una opción de futuro a los combustibles tradicionales en el área de transporte. Investigadores de la Universidad de Cádiz, proponen un cambio tecnológico en el proceso actual de obtención de biodiesel para hacerlo más eficiente y en armonía con el medio ambiente. La Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa ha financiado la investigación 'Desarrollo de un catalizador monolítico de alúmina/aluminio para la producción de biodiesel' con 62.000 euros.



Centro

Universidad de Cádiz



Área

Física, Química y Matemáticas



Código

FQM 262



Nombre del proyecto

Desarrollo de un catalizador monolítico de alúmina/aluminio para la producción de biodiesel



Contacto

Serafín Bernal Márquez

Teléfono: 956 01 63 38

e-mail: serafin.bernal@uca.es



Dotación:

62.000 euros

Los biocarburantes son todos aquellos combustibles líquidos obtenidos a partir de productos agrícolas. Una forma más concreta, el biodiesel, es un grupo que lo constituyen los aceites obtenidos a partir de semillas oleaginosas que son utilizados como sustitutos del gasóleo o que pueden participar en mezclas con este desde un 5% hasta el 100%. En cuanto a las tecnologías de producción de biodiesel, actualmente éstas parten del uso de las variedades comunes de especies convencionales como el girasol y la colza. A partir de estas materias primas se consigue el biodiesel, mediante un proceso que incluye siempre operaciones de extracción y refino seguido de un proceso de esterificación, con el que se consigue un combustible útil en motores convencionales y glicerina como subproducto. Investigadores de la Universidad de Cádiz, a través de un pro-

yecto dirigido por Serafín Bernal Márquez, se proponen la preparación, caracterización y ensayo de una serie de catalizadores monolíticos de alúmina/aluminio especialmente diseñados para su aplicación en el proceso de transformación de aceites vegetales en combustible para automoción de alta calidad, de tipo biodiesel.

Desde el punto de vista de su aplicación, el objetivo fundamental del proyecto es el desarrollo de materiales que permitan la sustitución de la tecnología en uso, basada en catalizadores homogéneos, fuertemente básicos, por otra en la que se utilizaría catálisis heterogénea. Las ventajas de este cambio tecnológico son importantes. Como asegura Serafín Bernal, "se reducirían los costes de producción, especialmente, los inherentes a la separación de reactivos y catalizador. Se eliminarían los problemas

¿sabías que...

Un catalizador es una sustancia (compuesto o elemento) capaz de acelerar (catalizador positivo) o retardar (catalizador negativo o inhibidor) una reacción química, permaneciendo él mismo inalterado, es decir, no se consume durante la reacción.

medioambientales y de corrosión de las instalaciones que se derivan de la gestión de los grandes volúmenes de disoluciones fuertemente básicas que se requieren en el proceso homogéneo. Igualmente, podría reducirse de manera muy significativa el tamaño de las actuales plantas industriales". En la búsqueda de una mayor eficiencia y ahorro de costes,

el proyecto plantea dar un paso más respecto de las investigaciones en curso. Se trata de la utilización de catalizadores de tipo monolítico en lugar de materiales policristalinos en polvo. Los monolitos se construirán a partir de aleaciones de aluminio sobre las que se creará una capa de alúmina, de 20-30 micras de espesor, generada mediante técnicas de anodizado. Este tratamiento multiplicará por 1.000 la superficie original de las láminas metálicas de partida, lo que les confiere, además, la estructura porosa adecuada para su utilización en catálisis. Por último, durante el propio proceso de anodizado, o en una etapa posterior al mismo, se modificarán las propiedades químicas de la capa anódica me-

dante la incorporación de óxidos lantánidos. De este modo, "se potenciará su basicidad, generándose los centros activos en el proceso transesterificación con metanol de los aceites vegetales, la reacción química en la que se basa la producción industrial de biodiesel".

En el proyecto participan un total de ocho investigadores pertenecientes a tres grupos diferentes del área de Física, Química y Matemáticas, con formaciones científicas y equipamiento instrumental netamente complementarios, y una amplia experiencia previa de colaboración. Todos estos datos subrayan el carácter multidisciplinario del proyecto, al tiempo que avalan su viabilidad.

Alternativa energética



El biocombustible es el término con el cual se denomina a cualquier tipo de combustible que derive de la biomasa – organismos recientemente vivos o sus desechos metabólicos. El biodiésel no contabiliza en la producción de anhídrido carbónico porque se supone que las plantas absor-

bieron ese gas en su crecimiento, así que, por ello, ayuda a contener la emisión de gases de efecto invernadero. En realidad la cuenta no es tan sencilla, pues el metanol que se emplea en su fabricación se suele obtener del petróleo, por lo que el balance de CO₂ no es nulo. Se podría obtener metanol de la

madera, pero resulta más costoso. Además, es una fuente de energía renovable, siempre que el metanol se obtenga a partir de la madera. Por otro lado, la glicerina también se puede quemar, por lo tanto tampoco su combustión contabiliza en la producción de CO₂.



Matemáticas teóricas hacia el caos

Una rama de las matemáticas aplicadas que estudia la dinámica no lineal, con un carácter que integra a otras muchas disciplinas y que puede tener aplicaciones diversas en el desarrollo de la técnica, es la línea principal de un proyecto de investigación catalogado de excelencia y financiado por la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa con 126.000 euros

El efecto mariposa es un concepto que incluye la noción de dependencia sensible en condiciones iniciales en la teoría científica: La teoría del caos. La idea es que pequeñas variaciones en las condiciones iniciales de un sistema dinámico pueden producir grandes variaciones en el comportamiento del sistema a largo plazo. Su nombre proviene del antiguo proverbio chino: *"el aleteo de las alas de una mariposa, se puede sentir al otro lado del mundo"*. La interpretación es que la realidad no es mecánica y no es lineal, o dicho de otra forma, la incapacidad del

hombre y la ciencia de predecir y controlar la realidad, y que existe un orden en los acontecimientos aparentemente aleatorios.

El hecho es que, en los últimos cuarenta años, la comunidad científica se ha enfrentado a nuevos paradigmas derivados de la asombrosa complejidad que puede aparecer en sistemas de baja dimensión cuando las leyes involucradas son de carácter no lineal. La ciencia que estudia la dinámica no lineal, es decir, en contra de la hipótesis de siempre de la linealidad, con un marcado acento multidisciplinar,



	Centro
	Universidad de Sevilla
	Área
	Física, Química y Matemáticas
	Código
	FQM 872
	Nombre del proyecto
	Complejidad dinámica y bifurcaciones en sistemas de evolución temporal
	Contacto
	Emilio Freire Macías
	Teléfono: 954 48 11 83
	e-mail: emilio@ma2.us.es
	Dotación
	126.200 euros



Edward Lorenz y el efecto mariposa

Edward Norton Lorenz es un matemático y meteorólogo estadounidense, contribuyó en la teoría del caos e inventor de lo que se conoce como atracciones extrañas. Acuñó el término efecto mariposa en un trabajo de 1963 para la Academia de Ciencias de Nueva York. Lorenz construyó un modelo matemático de la forma en la que el aire se mueve en la atmósfera terrestre. Cuando Lorenz estudiaba los patrones del clima se dio cuenta de que no siempre cambiaban como había sido predicho. Alteraciones mínimas en los valores de las variables iniciales en su primitivo modelo computarizado resultaban en patrones climatológicos ampliamente divergentes. Esta sensible dependencia de las condiciones iniciales fue conocida después como el efecto mariposa. Lorenz se dedicó a explorar las matemáticas subyacentes y publicó sus conclusiones en un trabajo titulado *Flujo Determinístico no Periódico* en cuál describió un sistema relativamente simple de ecuaciones que dieron lugar a un patrón de la complejidad infinita, llamado *atractor de Lorenz*.



es una rama de las matemáticas aplicadas que sigue, hoy en día, en plena ebullición. Los avances en esta teoría, ligada a todos los fenómenos de evolución temporal de magnitudes, son de utilidad en aplicaciones muy diversas, desde la microelectrónica a las misiones espaciales, por citar dos ejemplos.

En Andalucía, el proyecto conjunto de varios grupos de investigación de Sevilla y Huelva que, dirigidos por Emilio Freire Macías e integrados por ingenieros, físicos y matemáticos, llevan más de dos décadas contribuyendo a los avances en esta ciencia, ha obtenido una considerable dotación de 126.200 euros por parte de la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa. Para el conocimiento

del comportamiento dinámico de un sistema, es de vital importancia la descripción de las bifurcaciones asociadas a los elementos críticos (equilibrios y soluciones periódicas). En el proyecto se considerarán dos aspectos, uno de carácter teórico general (analítico y numérico) y otro dirigido a ciertas aplicaciones en ingeniería.

Objetivos concretos en el aspecto teórico son, por ejemplo, el análisis de la dinámica de la iteración de funciones analíticas en variedades complejas; el estudio de bifurcaciones locales de elementos críticos degenerados vía formas normales; los problemas de estabilidad global en sistemas lineales a trozos; la continuación de órbitas periódicas en sistemas hamiltonianos con simetría y en sistemas no holónomos; el desarrollo de métodos numéricos de continuación para los elementos críticos de ecuaciones en derivadas parciales disipativas, buscando su compatibilidad con técnicas actuales de álgebra lineal iterativa.

¿sabías que...

La consecuencia del efecto mariposa es que en sistemas complejos tales como el estado del tiempo o la bolsa de valores es muy difícil predecir con seguridad en un mediano rango de tiempo. Los modelos finitos que tratan de simular estos sistemas necesariamente descartan información acerca del sistema y los eventos asociados a él. Estos errores son magnificados en cada unidad de tiempo simulada hasta que el error resultante llega a exceder el ciento por ciento.



Carbolinas: un universo de propiedades

Hace más de veinte años que el grupo de investigación del departamento de Química Física de la Universidad de Sevilla, liderado por Manuel Balón Almeida, trabaja con carbolinas. Éstas constituyen una familia de los alcaloides con numerosas propiedades bioquímicas y farmacológicas. Ahora, la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa ha incentivado con 125.800 euros a este equipo de científicos sevillanos para la ejecución del proyecto de excelencia 'Carbolinas: Reacciones de transferencia protónica fotoinducidas y fototautomerismo'.

Cuando las moléculas orgánicas absorben luz se excitan y alcanzan un estado transitorio de alta energía. Durante el corto espacio de tiempo en que las moléculas se encuentran en este estado excitado, una mil millonésima parte de un segundo, cambian sus propiedades químicas y se hacen más reactivas. Muchas moléculas se hacen bastante más ácidas o bastante más básicas cuando absorben luz. De esta forma, las moléculas excitadas por la luz pueden dar reacciones que no darían en su estado normal no excitado.

Estas reacciones ácido-base inducidas por la luz se conocen como

reacciones de transferencia protónica fotoinducidas. En dichas reacciones, que son el principal objeto de estudio de este trabajo de excelencia, las moléculas intercambian un protón, es decir, un átomo de hidrógeno cargado positivamente. Las moléculas ácidas lo ceden y las básicas lo ganan.

Como explica Manuel Balón, "las reacciones de transferencia protónica suelen ser especialmente complejas en aquellas moléculas en cuyas estructuras existen centros ácidos y básicos. En estos casos, los centros ácidos y básicos de la molécula pueden intercambiar un protón entre sí y dar lugar a una nueva especie que



Centro

Universidad de Sevilla



Área

Física, Química y Matemáticas



Código

FQM 368



Nombre del proyecto

Carbolinas: Reacciones de transferencia protónica fotoinducidas y fototautomerismo



Contacto

Manuel Balón Almeida
Teléfono: 954 55 67 33
e-mail: balon@us.es



Dotación:

125.800 euros

¿sabías que...

De álcali, con el sufijo -oide, masculino. Cualquiera de las sustancias nitrogenadas de origen vegetal, con carácter básico y acción fisiológica intensa a bajas dosis. Son metabolitos secundarios. Los alcaloides verdaderos proceden siempre de un aminoácido. Generalmente actúan sobre el sistema nervioso central, si bien algunos afectan al parasimpático. Las acciones presentadas por los alcaloides son muy diversas, la más estudiada es la acción euforizante que presentan algunos como la cafeína o la cocaína. Si bien también existen alcaloides con efectos

depresores del sistema nervioso central como la morfina. Los métodos de extracción son muy variados, pero últimamente está adquiriendo fuerza la purificación por medio de fluidos supercríticos, concretamente con dióxido de carbono. En cuanto a su detección, existen multitud de métodos: procedimientos cromatográficos, reacciones coloreadas (Reacción de Mayer, de Dragendorff, de Bouchardat... si bien no son específicas de los alcaloides: puede obtenerse un resultado positivo en presencia, por ejemplo, de péptidos).

sólo se diferencia de la original en la posición de un átomo de hidrógeno. Estas especies, denominadas fototautómeros, sólo existen durante el breve espacio de tiempo en que las moléculas están excitadas, ya que cuando pierden energía y vuelven a su estado normal se reorganizan para dar nuevamente la molécula original". El fototautomerismo es raro en la naturaleza, ya que son muy pocas las moléculas que lo experimentan. No obstante, a pesar de ser poco conocido, el fototautomerismo y las reacciones ácido base que lo originan son temas que interesan a diferentes campos de la química y de la biología.

Las carbolinas pertenecen a la familia de los alcaloides pirido-indólicos y tienen "numerosas e interesantes propiedades bioquímicas y farmacológicas". Estos alcaloides, cuyas propiedades ácidas y básicas se hacen unas diez mil veces mayores cuando se excitan por acción de la luz, "resultan prototipos muy adecuados

para estudiar los distintos factores que influyen en el fenómeno del fototautomerismo", afirma el científico sevillano. Desde hace más de veinte años, el equipo de la Hispalense viene estudiando la fotofísica de las betacarbolinas. En este sentido, "la finalidad principal de nuestro proyecto es profundizar y ampliar el conocimiento sobre los mecanismos de las reacciones ácido-base inducidas por la luz y sobre el fototautomerismo. Aunque los objetivos están orientados principalmente a la promoción general del conocimiento, de sus resultados se podrían derivar interesantes aplicaciones prácticas en diferentes campos científicos. Por ejemplo, podrían servir de base para el diseño de fuentes de radiación láser y de fotosensibilizadores, esto es, sustancias para el tratamiento por la acción de la luz de hongos, bacterias, células cancerosas etc.", aclara Manuel Balón. Las carbolinas constituyen uno de los pocos tipos de moléculas capaces de experimentar fototautomerismo. Estos alcaloides, resultan de

la condensación de un anillo de indol y otro de piridina. Según como se unan estos anillos, resultan diferentes tipos de carbolinas, que se diferencian entre sí por la posición relativa de sus átomos de nitrógeno. El anillo de indol de las carbolinas tiene un carácter ácido muy débil y el de piridina es moderadamente básico.

Cuando las carbolinas absorben luz, las propiedades ácidas y básicas de estos centros se hacen unas diez mil veces mayores, lo que permite que se produzca el proceso de fototautomerismo. En este proceso se transfiere un protón desde el átomo de nitrógeno del anillo pirrólico al átomo de nitrógeno del anillo piridínico. Por tanto, las carbolinas son unos prototipos muy adecuados para estudiar como influyen distintos factores estructurales y geométricos en el fenómeno del fototautomerismo. La transferencia protónica y el fototautomerismo juegan un papel muy importante en la mutagénesis del ADN y en la emisión de radiación láser.

Presentes en el queso, vino o humo del tabaco

Las carbolinas se encuentran en algunos alimentos, como el queso o el vino, en el humo del tabaco y son los componentes fundamentales de la Ayahuasca, un brebaje alucinógeno utilizado desde épocas remotas por ciertas tribus indígenas en sus ceremonias rituales. Este brebaje es considerado como el fundamento de la conexión mágico-espiritual de más de 75 etnias de la Alta y Baja Amazonía. Así, se consume para diagnosticar, curar enfermedades y disfunciones en general, para tomar decisiones importantes, para pedir consejo a las divinidades, para resolver conflictos personales -entre familias y entre tribus-,



para comunicarse con los espíritus de la naturaleza, para ejercer sus capacidades adivinatorias y elucidar misterios, robos, desapa-

riciones, para saber si tenemos enemigos, conocer la infidelidad del cónyuge, reforzar la actividad sexual.



¿Hasta dónde puede resistir la cerámica?

Algunos materiales cerámicos pueden soportar temperaturas extremadamente altas sin perder su solidez. Son los denominados materiales refractarios. Generalmente tienen baja conductividad térmica por lo que son empleados como aislantes. Por ejemplo, partes de los cohetes espaciales son contruidos de

azulejos cerámicos, que protegen la nave de las altas temperaturas causadas durante la entrada a la atmósfera. Otros, pueden usarse en la fabricación de microondas. Un proyecto de la Universidad de Sevilla cuenta con una dotación de 150.000 euros de la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía, para el estudio de las propiedades mecánicas de la cerámica.



www.nasa.gov



Centro

Universidad de Sevilla



Área

Física, Química y Matemáticas



Código

FQM 337



Nombre del proyecto

Superplasticidad de nanocerámicos de SiC y Si_3N_4



Contacto

Arturo Domínguez Rodríguez
Teléfono: 954 55 78 49
e-mail: adorod@us.es



Dotación

150.000 euros

La palabra cerámica deriva del vocablo griego keramos, cuya raíz sánscrita significa quemar. En su sentido estricto, se refiere a la arcilla en todas sus formas. Sin embargo, el uso moderno de este término incluye a todos los materiales inorgánicos no metálicos.

Históricamente, los productos cerámicos han sido duros, porosos y frágiles. El estudio de la cerámica consiste en una gran extensión de métodos para mitigar estos problemas y acentuar las potencialidades del material, así como ofrecer usos no tradicionales a través del desarrollo de las pro-

piedades superplásticas.

Aunque la superplasticidad fue demostrada por primera vez en 1986, es a partir de los 90 cuando se empieza a trabajar en este campo en compuestos como el Nitruro de silicio (Si_3N_4) y el Carburo de silicio (SiC). Estas fórmulas son relevantes, ya que son cerámicos estructurales de gran interés debido a sus excelentes propiedades tales como baja densidad, elevada resistencia a la corrosión, excelentes propiedades mecánicas –tanto a baja como a alta temperatura–, buena conductividad térmica y bajo coeficiente

Cooperación internacional



En la actualidad, este grupo de investigación de la Hispalense, cuenta con una becaria contratada a través del Programa Ramón y Cajal, que está trabajando en el Institute of Material Science de la Universidad de Connecticut de EE.UU., en la fabricación

de nanopulvos de SiC y Si₃N₄. Asimismo, este proyecto incentivado por la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa, desarrollará una colaboración con investigadores del Tokio Institute of Technology, que ayudarán en la fabricación de

los cerámicos necesarios para el desarrollo de este proyecto, mediante técnicas de presión isostática en caliente (HIP en sus siglas inglesas), horno de microondas y horno de chispa de plasma (SPS en sus siglas inglesas).

de dilatación térmica. Esto, los hace de los más competitivos en aplicaciones industriales en condiciones severas frente a los metales tradicionales. De ahí, que por ejemplo el Nitrato de silicio sea utilizado como polvo abrasivo, y el Carburo de silicio en hornos microondas, en abrasivos y como material refractario.

Hoy día, la mejora en la tecnología del procesado de polvos cerámicos, ha llevado a conseguir casi de forma rutinaria, al menos para algunos cerámicos, la fabricación de polvos nanométricos cerámicos de alta pureza. Esta mejora, junto a nuevas técnicas de procesado y sintetización, tales como la presión isostática en caliente (HIP en sus siglas inglesas), horno de microondas y horno de chispa de plasma (SPS en sus siglas inglesas), ha permitido la sintetización

de los polvos cerámicos nanométricos con menor temperatura y en menor tiempo.

El objetivo general de este proyecto, cuyo responsable es Arturo Domínguez Rodríguez, profesor de la Universidad de Sevilla, es el estudio de la superplasticidad de cerámicos no-oxídicos nanoestructurados del tipo SiC y Si₃N₄, a altas velocidades de deformación y bajas temperaturas. Para ello, el trabajo se estructurará en cuatro apartados. En primer lugar se realizará la síntesis y fabricación de nano-cerámicos de SiC y Si₃N₄, para ello se utilizarán las últimas técnicas de fabricación como son la presión isostática en caliente, el horno de chispa de plasma y microondas. En segundo lugar, se realizará la caracterización microestructural de las muestras fabricadas. Para ello se utilizará

tanto microscopía electrónica de transmisión y difracción de rayos X. En tercer, se realizarán ensayos de deformación superplástica controlando temperatura, tensión y atmósfera de trabajo. Y por último se hará la modelización del comportamiento superplástico de estos materiales, que permitan crear normas para conseguir el objetivo final de altas velocidades de superplasticidad, que abrirá nuevas expectativas en las aplicaciones de estos cerámicos.

¿sabías que...

Algunos materiales cerámicos pueden soportar temperaturas extremadamente altas sin perder su solidez. Generalmente tienen baja conductividad térmica por lo que son empleados como aislantes. Por ejemplo, partes de los cohetes espaciales son construidos de azulejos cerámicos.



Fórmulas matemáticas para prevenir riesgos

Áreas como Ingeniería, Medio Ambiente, Recursos Naturales, Ciencias Geofísicas, etc., necesitan del desarrollo de modelos matemáticos que representen adecuadamente las características de los fenómenos de interés en aplicaciones. Investigadores de la Universidad de Granada han obtenido 96.400

euros por parte de la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa para llevar a cabo el estudio de nuevos modelos y métodos en relación con la evaluación y prevención de riesgos.

La mejora de los procedimientos de análisis y prevención de riesgos, aspecto crítico de la investigación en diversas áreas aplicadas, depende, de manera directa, de los avances científicos en relación con el desarrollo, por una parte, de modelos matemáticos (físicos y estadísticos) que reflejen las características más significativas del comportamiento de los procesos implicados, particularmente en relación con la ocurrencia de valores o episodios extremos o anómalos, y, por otra, de métodos de análisis que permitan explotar de forma integrada toda la información eventualmente disponible (conocimiento físico previo y datos observados).

Asimismo, y en general, los avances tecnológicos en relación con dispositivos de observación, tratamiento informático intensivo y visualización de resultados hacen posible la introducción y explotación de procedimientos cada vez más sofisticados en cuanto a su fundamentación y aplicación.

Aspectos básicos del análisis estadístico de valores extremos han sido investigados de forma intensiva y sistemática especialmente durante los últimos

cincuenta años y se encuentran bien documentados en diversas publicaciones científicas. Sin embargo, la problemática específica de interés acerca de la ocurrencia de valores o episodios extremos o anómalos en el caso de procesos con evolución espacio-temporal es potencialmente muy diversa y una exploración de las contribuciones producidas en este campo demuestra que existen importantes lagunas que motivan la necesidad de afrontar nuevas investigaciones. Precisamente, una de las principales carencias en esta línea de investigación está relacionada con la

¿sabías que...

Los investigadores que forman parte del equipo de trabajo del proyecto han dedicado su actividad, de forma prioritaria, al desarrollo de una línea de investigación diversificada sobre modelos estocásticos espacio-temporales y aspectos metodológicos relacionados que fue emprendida hace aproximadamente quince años y en la que se han obtenido resultados que han sido recogidos en numerosas contribuciones publicadas en revistas reconocidas y de alto impacto en el área de la Estadística y la Probabilidad, así como en áreas multidisciplinares.



Centro

Universidad de Granada



Área

Física, Química y Matemáticas



Código

FQM 990



Nombre del proyecto

Análisis estadístico de valores extremos en procesos espacio-temporales. Aplicación a la evaluación de riesgos en Ingeniería y Medio Ambiente



Contacto

José Miguel Angulo Ibáñez

Teléfono: 958 24 04 92

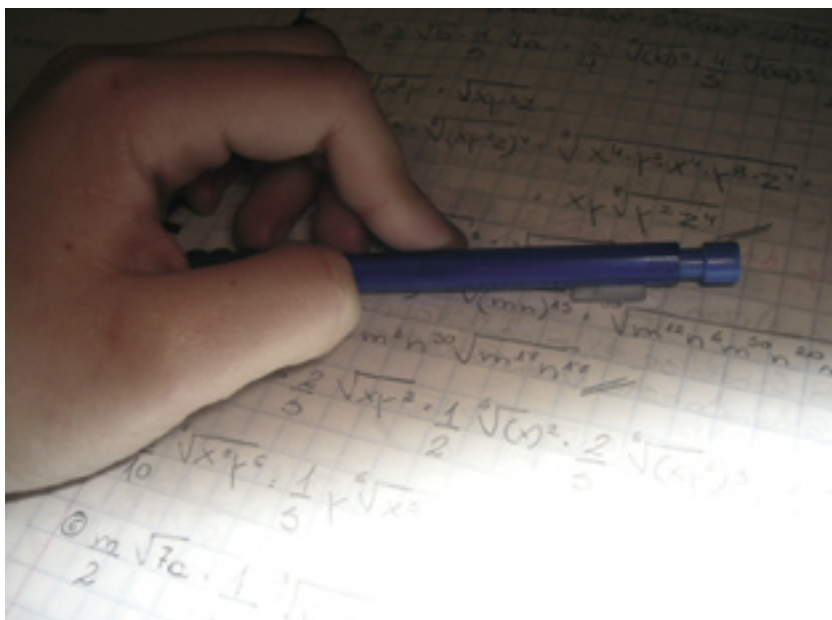
e-mail: jmangulo@ugr.es



Dotación:

96.400 euros

necesidad de desarrollar procedimientos estadísticos adaptados al conocimiento teórico existente sobre extremos en procesos espacio-temporales y, en general, sobre características de interés (variabilidad local, memoria, formas de interacción espacio-temporal, etc.) en procesos que evolucionan en el espacio y tiempo, aspectos sobre los que han logrado importantes avances particularmente en la última década. En este contexto se sitúa el presente proyecto, cuyo equipo investigador está compuesto por miembros que tienen experiencia previa, tanto conjuntamente como en colaboración con otros investigadores, en el desarrollo de diversos proyectos nacionales e internacionales enfocados al tratamiento de aspectos teórico-metodológicos y aplicados relacionados de forma directa o indirecta con los objetivos propuestos en el presente proyecto. Se puede decir que esencialmente dos características intrínsecas condicionan el conocimiento de



la dinámica de la evolución espacio-temporal de magnitudes que potencialmente tienen interés en la investigación aplicada relativa al análisis de riesgos: complejidad e incertidumbre. A éstas hay que añadir el hecho de que, generalmente, la información histórica sobre comportamientos anómalos o extremos suele ser relativamente escasa, lo que conjuntamente conlleva la necesidad de extrapolar dicha información por

medio de modelos que, al mismo tiempo, representen adecuadamente las características de los fenómenos bajo análisis relevantes para el estudio considerado y tengan la simplicidad suficiente para su tratamiento, así como de métodos de análisis estadístico que generen mediante criterios objetivos los resultados que constituirán la base para la evaluación de riesgos y consiguiente toma de decisiones.

Software para aplicaciones y simulación

El proyecto contempla objetivos que se refieren tanto al análisis teórico sobre valores extremos en procesos espacio-temporales, como al desarrollo de métodos de inferencia estadística sobre valores extremos e implementación de algoritmos relativos a dichos métodos, así como al diseño de estrategias de muestreo (redes de observación) con el fin de optimizar la información disponible para la estimación de los modelos y la predicción sobre posibles valores o episodios extremos. En relación con las aplicaciones, el proyecto contempla asimismo el desarrollo de software con la implementación de los procedimientos de análisis y visualización de resultados (mapas de riesgo, etc.), incluyendo simulaciones a partir de posibles 'escenarios'.





FÍSICA, QUÍMICA y MATEMÁTICAS

INVESTIGACIÓN CIENTÍFICO - TÉCNICA
PROYECTOS DE EXCELENCIA