

### **La Bienal de química presenta los últimos avances en simulaciones químicas a través de un ordenador y en química supramolecular, la química que va más allá de las moléculas**

- En sesión de hoy se han presentado algunas de las investigaciones más punteras en química supramolecular, energía, química computacional y nanomedicina entre otros, además de contar con dos mesas redondas en nuevos procesos y tecnologías químicas y el futuro de la educación en química.
- Mañana 29 de junio finaliza la XXXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) en la que además de las presentaciones más científicas se debatirá sobre el futuro de la química.

(Zaragoza 28 de junio de 2023) La XXXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) que se celebra en Zaragoza hasta mañana 29 de junio, ha contado, entre otros temas, con la presentación de las últimas novedades en Química Supramolecular y Química Computacional de la mano de grandes expertos a nivel internacional y nacional.

Durante la jornada del día de hoy hemos disfrutado de un simposio sobre química supramolecular, aquella rama de la química que se encarga del estudio de la “**Química que va más allá de las moléculas**” y que, en el ámbito de los materiales, nos permite **controlar la organización de las moléculas** para obtener aplicaciones y propiedades muy variadas en campos muy diversos como la energía, la medicina o la electrónica molecular. En concreto, en el **Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón, INMA**, instituto mixto del CSIC y la Universidad de Zaragoza **se trabaja en el desarrollo de cristales líquidos** que se incorporan a circuitos eléctricos, en medicina mediante la fabricación de vesículas y micelas que encapsulen fármacos y que permitan su liberación controlada en nuestro organismo, geles que ofrecen materiales flexibles que reaccionan a campos eléctricos o a la luz o en el desarrollo de cables moleculares que en una única molécula son capaces de conducir electrones tal y como lo hacen otros materiales como el cobre.

El simposio de reactividad química ha tratado, entre otros temas de cómo utilizar la química computacional para modelizar enzimas. La química computacional es la rama de la química que se basa en el **estudio de reacciones químicas mediante simulaciones a través de un ordenador**. Durante el simposio que ha tenido lugar en la sesión de hoy miércoles, se han presentado cómo se emplean estas simulaciones para modelizar enzimas utilizando dinámica molecular, es decir, estudiándolas en movimiento mientras se van plegando a medida que transcurre la reacción. Esto **ayuda a conocer el mecanismo de acción de las enzimas y diseñar fármacos más potentes** al conocer el sitio activo. En Aragón, **en el Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea, ISQCH**, instituto mixto del CSIC y la Universidad de Zaragoza, se trabaja en química computacional y machine learning para estudiar mecanismos de reacción y diseñar programas que automaticen procesos computacionales. Estas simulaciones consiguen predecir los resultados de las diferentes reacciones químicas permitiendo seleccionar y optimizar aquellas que resultan interesantes para su posterior realización en el laboratorio. De este modo, se consigue **minimizar el número de experimentos fallidos, ahorrando tiempo, dinero y evitando la generación de los residuos creados en los experimentos fallidos**.

La XXXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) que se celebra en el Auditorio de Zaragoza hasta el próximo 29 de junio cuenta con un total de 16 simposios temáticos, más de 150 ponencias orales invitadas y 700 comunicaciones científicas permitirán repasar el papel de la Química en nuevos fármacos, materiales inteligentes, avances en economía circular de materiales y residuos, sostenibilidad y procesos químicos para mitigar el cambio climático, entre otros, tal como destacaron en la presentación de la bienal Fernando Lahoz, presidente del comité organizador de la Bienal e investigador del CSIC en el Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea de Aragón (ISQCH), centro mixto CSIC-UNIZAR, y Blanca Ros, miembro del comité organizador, catedrática de la Universidad de Zaragoza e investigadora del Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (INMA), centro mixto CSIC-UNIZAR.

El programa completo de la bienal se puede consultar en la web: <https://bqz2023.com/index.php/es/>

### **Acerca del CSIC**

La Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) es la mayor institución pública dedicada a la investigación en España y una de las primeras de Europa. Adscrita al Ministerio de Ciencia e Innovación, su objetivo fundamental es desarrollar y promover investigaciones en beneficio del progreso científico y tecnológico, para lo cual está abierta la colaboración con entidades españolas y extranjeras. El motor de la investigación lo forman sus 123 centros e instituciones, distribuidos por todas las comunidades autónomas, y sus más de 14000 trabajadores, de los cuales cerca de 3.000 son investigadores en plantilla. El CSIC cuenta con el 6% del personal dedicado a la investigación y el desarrollo en España, que genera aproximadamente el 20% de la producción científica nacional. Es responsable del 45% de las patentes solicitadas por el sector público en España y desde 2004 ha creado más de medio centenar de empresas de base tecnológica.

La delegación de CSIC en Aragón ostenta la representación institucional del CSIC en la comunidad, siendo la delegada, María Jesús Lázaro Elorri, la interlocutora del CSIC con las instituciones públicas y privadas de Aragón. En Aragón, el CSIC cuenta con cinco institutos y personal del centro nacional IGME, Instituto Geológico y Minero de España. Los cinco Institutos de nuestra Comunidad son la Estación Experimental de Aula Dei, el Instituto Pirenaico de Ecología y el Instituto de Carboquímica – propios del CSIC – y el Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón y el Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea – mixtos del CSIC y de la Universidad de Zaragoza-) que cuentan con más de 550 trabajadores. En Zaragoza el Instituto Geológico y Minero de España cuenta con una sede.