



## LA SECCIÓN DE CIENCIAS FÍSICAS Y QUÍMICAS DE LA REAL ACADEMIA DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES DE ESPAÑA

*se complace en invitarle a la doble sesión científica de recepción de Académicos Correspondientes,  
en la que se impartirán las siguientes conferencias*

**“La química teórico-computacional como una herramienta para comprender y predecir  
la reactividad molecular”**

**Prof. Fernando Pedro Cossío Mora**, Universidad del País Vasco (UPV/EHU)

**“Rotura de enlaces para sintetizar moléculas y materiales”**

**Prof. Daniel MasPOCH Comamala**, Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia (ICN2)

*A la finalización del acto se hará entrega a los ponentes del diploma acreditativo de su nombramiento  
como Académicos Correspondientes de la Corporación*

Miércoles, 10 de abril de 2024  
18.00 horas

Sesión presencial retransmitida en directo en



Calle Valverde, 22  
28004 Madrid

## Resumen de las conferencias

### **La química teórico-computacional como una herramienta para comprender y predecir la reactividad molecular**, Prof. Fernando Cossío

La química involucra frecuentemente conceptos cuya naturaleza es difícil de definir cuantitativamente. Los grandes desarrollos en cálculo de alta eficiencia, así como los recientes avances metodológicos, han permitido tratar la estructura y la reactividad de diversas entidades químicas con un alto grado de fidelidad con respecto a los sustituyentes y a las condiciones de reacción utilizadas experimentalmente. Ello ha permitido desarrollar, en algunos casos por primera vez, modelos que permiten comprender mejor fenómenos conocidos y novedosos, así como realizar predicciones para la síntesis química de nuevos materiales y catalizadores.

Con el fin de ilustrar estos aspectos, en la presentación se expondrán estudios recientes sobre mecanismos de reacción, sobre el diseño de fármacos quimioterápicos y acerca del desarrollo de sensores fluorescentes y fosforescentes.

### **Rotura de enlaces para sintetizar moléculas y materiales**, Prof. Daniel Maspoch

Históricamente, las innovaciones en métodos y reacciones sintéticas han cambiado cómo los científicos diseñamos y sintetizamos nuevos materiales y moléculas.

En esta charla, se presentará un nuevo concepto sintético basado en la rotura de enlaces y que hemos llamado "Clip-off Chemistry" o "Química de Recorte". Esta aproximación se basa en la escisión selectiva de enlaces existentes en moléculas y materiales, proporcionando un control espacial preciso sobre la rotura de enlaces. En consecuencia, la Química de Recorte representa una nueva metodología sintética, mediante la cual la deconstrucción programada proporciona nuevas moléculas y materiales. Esta deconstrucción ocurre a nivel molecular a través de una reacción química.

En este seminario, se mostrarán los principios de la Química de Recorte y los primeros ejemplos de estructuras y moléculas sintetizadas mediante la ruptura controlada de enlaces en materiales reticulares.