



Entrevista a Eloísa del Pino, presidenta del Consejo Superior de Investigaciones Científicas

Anales de Química de la RSEQ
Revista editada en Madrid por la Real Sociedad Española de Química

Editor General

Miguel Ángel Sierra
Universidad Complutense de Madrid

Comité Editorial

Fernando P. Cossío
Universidad del País Vasco y DIPC San Sebastián-Donostia

José Manuel Costa
Universidad de Oviedo

Gabriel Cuevas González
Instituto de Química de la UNAM (México)

Óscar Millet
CICbioGUNE, Derio, Bizkaia

Gabriel Pinto
Universidad Politécnica de Madrid

M.^a Carmen Redondo
Colegio Estudio, Madrid

Elena Sáez
Universidad Complutense de Madrid

Miquel Solà
Institut de Química Computacional i Catàlisi, Universitat de Girona

Rolando A. Spanevello
Universidad Nacional de Rosario, Argentina

Alejandro Toro-Labbé
Pontificia Universidad Católica de Chile

María C. de la Torre
Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid

Otilia Val-Castillo
IES Lluís Simarro Lacabra, Xàtiva, Valencia

Secretaría Editorial

Patricia Yáñez-Sedeño
Real Sociedad Española de Química
Facultad de Ciencias Químicas. UCM
28040, Madrid

www.analesdequimica.es
administracion@analesdequimica.es



Entidades colaboradoras



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
MADRID

Socios Corporativos

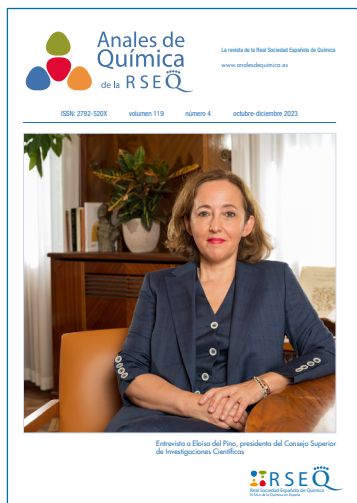


JANSSEN-CILAG S.A.



ANALES de Química de la RSEQ
Volumen 119 • Número 4 • octubre-diciembre 2023

Sumario



Composición:
Palabra de apache

An. Quím., 119 (4), 2023, 289-344
ISSN: 2792-520X
e-ISSN: 2792-5250
D. L.: M-232-1958

Editorial	292
Miguel Ángel Sierra	
Entrevista, Eloisa del Pino, presidenta del CSIC	294
Comunicado a los miembros de la RSEQ	297
Opinión	298
El verdadero coste de los acuerdos transformativos, Luis González	
Investigación Química	
Astroquímica computacional y fenómenos de superficies de los granos de polvo interestelar,	303
Albert Rimola, Joan Enrique-Romero, Stefano Ferrero, Harjasnoor Kakkar, Berta Martínez-Bachs, Eric Mates-Torres, Gerard Pareras y Jessica Perrero	
Historia de la Química	
Dos destacados centros de investigación de la Universidad de Oviedo en la primera mitad del siglo xx ...	311
Juan M. D. Tascón	
Enseñanza de la Química	
La nomenclatura química según las normas de la Real Academia Española	319
Luis Salvatella	
Noticias	325
Premio Nobel de Química 2023: descubrimiento y síntesis de puntos cuánticos	339
Reseña	341
Radicales (muy) libres	343
Índice de autores	345
Normas de publicación	348

Anales de Química de la RSEQ está disponible
en versión impresa. Para más información,
por favor, contactar con
administracion@analesdequimica.es



EDITORIAL

Miguel Á. Sierra

Pues como dice la canción de los Módulos “todo tiene su fin”. Y mi trabajo como Editor General de Anales de Química y como Director de Publicaciones de la RSEQ termina con este número. Cuando era más joven me gustaban las despedidas románticas, con el bueno alejándose a caballo mientras la chica le despedía con lágrimas en los ojos (soy de esa época). Ahora, después de ver la despedida a Kim Il-sung, con tres días de llantos continuos por parte del pueblo de Corea del Norte (sabiendo además que al primero que parase le fusilaban) he cambiado de gustos. El problema es conseguir que alguien me llore, pero todo se andará.

Dejando aparte estas consideraciones sentimentales han pasado diez años y casi cuarenta números de Anales de Química, desde que Jesús Jiménez Barbero me ofreció ser editor de Anales, oferta que acepté de forma inmediata, y no solo porque fue después de una buena comida y aderezada con copiosas bebidas, sino porque me resultaba muy atractivo. El aliciente adicional era cambiar una revista en papel por una completamente electrónica. Para alguien que cree firmemente que el papel es algo que, por el bien de todos, debe usarse lo menos posible, fue como si hubieran llegado los Reyes Magos. Entiendo que hay muchos nostálgicos, entre ellos unos cuantos editores asociados de esta revista, a quienes el papel les lleva a un estado de consciencia superior. No pasa nada, son pecadillos menores. También hay gente que vuelve a comprar vinilos y encima dicen que suenan mejor que las grabaciones digitales. Probablemente sea cuestión de tiempo volver a poner en marcha un tren con vagones de tercera, de esos que tardaban más de dos horas en ir de Madrid a mi pueblo (65 km), y, seguro que irán llenos. Dejando aparte nostalgias que, todo hay que decirlo, tienen su encanto, hoy Anales de Química es completamente digital, y completamente *open-access*. Por supuesto, y por respeto a aquellos socios a quienes les gusta más el papel, cada número de Anales puede obtenerse impreso. Faltaría más.

Posteriormente, Antonio Echavarren me ofreció continuar como editor de esta revista. Mi reticencia inicial se la cargó Antonio, quien, por desgracia, conoce mis debilidades, con una oferta que no pude resistir. Me prometió un iPad de última generación con una memoria de 1Tb y la pantalla más



grande posible. Por supuesto acepté de inmediato. Lo que no me dijo es que eso sería cuando terminase de ser editor. Tengo la sospecha de que fue una trampa, una de esas promesas que no se piensan cumplir. No importa, me gustaba editar Anales y me sigue gustando.

En cualquier caso, tanto Jesús como Antonio mantuvieron sin ninguna excepción su compromiso de que Anales de Química fuese una revista independiente, dentro de los límites del respeto a las personas y a la RSEQ. No solo eso, su apoyo a la revista ha sido incondicional durante estos años. Sonsoles Martín Santamaría y José Manuel González Díaz como secretarios de la Sociedad completaron el apoyo institucional a Anales de Química. A todos ellos gracias por haberme permitido editar Anales sin interferencias y sí con comentarios que nos han ayudado a mejorar la publicación. Esto ha sido muy importante. Me consta, que en muchas ocasiones las opiniones publicadas en Anales y algunos artículos no científicos, no han sido de su agrado, o estaban en desacuerdo con ellos. Aun así se mantuvieron firmes en su compromiso.

Editar Anales de Química no hubiera sido posible sin la participación de los editores asociados que, prácticamente en su totalidad, son los mismos que empezaron este proyecto conmigo. Sin ellos, sin sus opiniones y su trabajo editorial, llegar hasta aquí no hubiera sido posible. Patricia Yáñez-Sedeño, nuestra secretaria editorial, ha sido también una parte indispensable para que el trabajo de estos diez años llegase a (espero) buen fin. A todos ellos ¡Gracias!

Por supuesto hay un componente fundamental en Anales de Química. El editor al fin y al cabo cobra por su trabajo

(la dirección de la Sociedad se comprometió a una subida salarial anual para el editor de acuerdo con el IPC, algo que han cumplido a rajatabla y sin discusiones, dejando mi sueldo actual, que hago público como los ministros, en 0.00€ mensuales, eso sí con dos pagas extras completas). La parte más importante de la revista son los lectores y los autores. Los primeros han ido creciendo poco a poco, con unos resultados en la distribución por países en los que los lectores mejicanos superan a los españoles, y, si sumamos a los lectores americanos (desde Estados Unidos a Argentina) triplican a los españoles. Esto no solo es bueno. También demuestra que, en el futuro, la revista puede ser una referencia de la química escrita en español. Hay un componente importante de “lectores” indios y chinos atribuibles a los buscadores automáticos. No creo que en Pekín o en Calcuta haya muchos químicos interesados en leer artículos en español, aunque nunca se sabe.

Los autores son, como es lógico, indispensables para la continuidad de Anales de Química. Recuerdo que, en un episodio del Ala Oeste de la Casa Blanca, el presidente Bartlet, antes de su toma de posesión, decía que “el maldito Kennedy nos lo puso muy difícil para decir algo interesante después de *no preguntes qué puede hacer América por ti, pregunta qué puedes hacer tú por América*”. Lo mismo pasa con Anales de Química. No soy muy dado a las frases lapidarias, mi cerebro no da para tanto. Publicamos una portada hace ya años con el dibujo del *Uncle Sam* y debajo “Anales te necesita” (con las consiguientes críticas de algunos puristas). Y es así. Sin usar latinajos, tengo claro que la calidad de los artículos, ensayos, comentarios, etc. es determinante para el éxito de la revista. Quizás no lo tengamos demasiado en cuenta, pero un buen número de profesores e investigadores utilizan el material que se publica en Anales para su trabajo. Además, es una publicidad excelente para que nuestros trabajos y laboratorios se vean. Esto se traduce en que más estudiantes y postdocs consi-

derarán los grupos de trabajo de los artículos publicados en Anales para proseguir con sus estudios. Espero que el número de artículos que recibe Anales se mantenga y, si es posible, crezca. Para todos los autores es un esfuerzo que, en verdad, merece la pena. Para Anales es vital para su crecimiento y su calidad.

Por supuesto, tengo que mencionar y agradecer la columna (durante más de cinco años) de Javier de Mendoza. Sus Radicales Libres son un cierre perfecto para cada número de Anales. Lo único que no me convenía, al principio, era lo de Radicales Libres. Yo le sugerí “cationes calientes” o “heterociclos salvajes”. Afortunadamente, no me hizo caso. Desgraciadamente, la columna de este número es la última, salvo que el futuro editor le convenza para seguir. Yo no he podido.

Voy a terminar. No me gusta extenderme demasiado. En general, desde luego no siempre y depende de qué, lo bueno si breve dos veces bueno. Pero antes de terminar no puedo resistir hablar en esta editorial, una vez más del Sanedrín (la CRUE). Esta mañana he oído en la radio que han pedido ¡800 millones de euros para cumplir con los objetivos de la LOSU! Claramente, o están en un plano existencial diferente o todavía creen en los gnomos. Para cerrar el círculo que empezó con una entrevista a Alfredo Pérez Rubalcaba publicada en el primer número de Anales, en este artículo se publica una entrevista con Eloísa del Pino, la actual presidenta del CSIC. Espero que os guste.

Deseando a Juan Casares, nuestro futuro editor, que disfrute tanto editando Anales de Química como he disfrutado yo, de nuevo os doy las gracias por leer.

Gracias por leer.
¡Hasta pronto!

MIGUEL Á. SIERRA,
Editor General de Anales de Química.

ENTREVISTA A ELOÍSA DEL PINO PRESIDENTA DEL CSIC

Eloísa del Pino llegó a la presidencia del CSIC en junio de 2022, sucediendo a Rosa Menéndez, la primera mujer que ostentó el cargo entre 2017 y 2022.

Eloísa del Pino es Doctora en Ciencias Políticas por la Universidad Complutense de Madrid (UCM) y el Instituto de Investigación Ortega y Gasset (IUOG). Es investigadora en el Instituto de Políticas y Bienes Públicos (IPP) del CSIC desde 2007 y con anterioridad fue profesora de la Universidad Rey Juan Carlos y profesora honorífica en la Universidad Autónoma de Madrid.



© 2023 Real Sociedad Española de Química

— *Alguna información acerca de sus gustos aficiones, etc. A nuestros lectores también les interesa el aspecto humano de nuestros entrevistados.*

La verdad es que ahora tengo muy poco tiempo para mis aficiones, lo que no es una queja porque también disfruto mucho del trabajo. Mi principal afición, a distancia de las demás, es la lectura, tanto de ensayo como de novela. Me gusta particularmente leer sobre ciencia, sobre la historia de la cultura y devoro los ensayos sobre temas políticos.

“ *Tanto en el CSIC como en España tenemos aún mucho que avanzar en conciliación* ”

En cuanto a la novela, me gusta especialmente la literatura inglesa, pero leo de todo y me gusta tanto leer a autores consagrados, como descubrir otros nuevos. Ahora estoy terminado *Natasha's dance. A cultural history of Russia*, de Orlando Figes. Y en cola tengo la biografía del naturalista Wallace, de Medina Preciado.

Me gusta también pintar, aspiro a aprender, y el jazz y la ópera y, claro, salir a la naturaleza.

— *Tanto la dirección del CSIC en la actualidad como su trabajo político, docente y científico son absorbentes y requieren mucho tiempo. En su caso ¿Cómo ha sido la conciliación con su vida personal?*

Difícil, pero la verdad es que, independientemente de dónde esté, siempre he destinado mucho tiempo a trabajar. Es parte de mi personalidad y mi familia lo entiende y lo acepta. Por suerte, todos mis trabajos me han llenado mucho, a casi todo le veo interés y me ilusiono rápidamente. Me dejo absorber con facilidad. En todo caso, trato de pasar tiempo de calidad con la familia y los amigos.

— *¿Cree que el CSIC es un organismo que trabaja por la conciliación?*

Creo que tanto en el CSIC como en España tenemos aún mucho que avanzar. Lo notas sobre todo cuando vives un tiempo fuera de nuestro país.

“ **No imagino un desafío más grande y maravilloso que ser la presidenta del CSIC** ”

— *Según su CV ha sido: subdirectora de Análisis Institucional. División de Evaluación de Políticas Públicas en la Autoridad Independiente de Responsabilidad Fiscal (AIReF). 2021-2022. Directora del Gabinete de la ministra de Sanidad, Consumo y Bienestar Social. 2018-2020. Directora del Observatorio de Calidad de los Servicios Públicos Agencia Estatal de Evaluación de Políticas Públicas y de la Calidad de los Servicios Públicos (AEVAL). 2009-2011 y jefa del Departamento de Política Comparada, Instituto de Políticas y Bienes Públicos; Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). 2012-2014. Por supuesto, desde 2022 es presidenta del CSIC, la mayor institución pública de investigación de España. Una carrera política variada con puestos de responsabilidad creciente. ¿Tiene objetivos políticos todavía más ambiciosos?*

Yo no diría que he tenido una carrera política, sino científica y técnica. Al CSIC llegué ya tras una carrera de 12 años como profesora universitaria. Tras aprobar mi oposi-

ción como científica del CSIC, he salido del Consejo en tres ocasiones y las tres han sido para desempeñar puestos muy ligados a mi *expertise* científica.

En AEVAL, donde no conocía a nadie, contaron conmigo para poner en marcha un Observatorio de Calidad de los Servicios Públicos, que justamente había sido el tema de mi tesis doctoral. Al Ministerio de Sanidad, Consumo y Bienestar Social me fui porque mi especialidad científica son las políticas sanitarias y sociales, además de sentir en ese momento un compromiso muy fuerte con la necesaria mejora del sistema de protección social español tan deteriorado durante la Gran Recesión. Trabajar con la exministra Carcedo, quien es una persona excepcional, fue también un aliciente.

En el caso de AIReF, fue exactamente lo mismo, no tenía relación previa con nadie allí. Me lo propusieron por mi experiencia en la evaluación de políticas públicas y para introducir la aplicación de metodología cualitativa de investigación social. Lo acepté por el gran prestigio de esa institución que, como quizá conozca, es independiente, y por el fantástico equipo de profesionales que trabaja allí. Para mí era un gran desafío como investigadora.

Nunca hubiera aceptado la propuesta de asumir la presidencia del CSIC sin disponer de toda esa experiencia anterior. Hubiera sido una osadía. La gestión pública de las instituciones científicas es muy compleja y a mí no me gusta trabajar en algo sobre lo que no sé.

La ministra Morant, una mujer joven, muy profesional y con un compromiso muy claro con la ciencia como motor de desarrollo de nuestro país, supo convencerme para aceptar este puesto y no puedo estar más agradecida porque, contestando a su pregunta, la verdad es que no imagino un desafío más grande y maravilloso que ser la presidenta del CSIC, un lugar donde todos los días estas en contacto con la investigación de frontera y las mejores mentes del país.

— *El CSIC ha tenido 18 presidentes y dos presidentas (usted es la segunda). Sin embargo, lo que le diferencia de la mayoría de los presidentes es que su formación y su carrera profesional se ha desarrollado dentro de las ciencias políticas. ¿Cómo cree usted que esta diferencia puede influir en la dirección del CSIC?*

He cambiado impresiones con todos los presidentes y presidenta del CSIC y sé que han aportado lo mejor de sí mismos a la institución. Creo que es muy positivo y necesario que tengamos orígenes disciplinares y profesionales diferentes.

En mi caso, mi formación sobre los factores que explican el funcionamiento y el éxito o fracaso de las instituciones y

“ **Conozco bien el funcionamiento de la administración y entiendo la lógica política** ”

“El Contrato de Gestión implicará un fuerte incremento presupuestario”

de las políticas públicas me son muy útiles. También conozco bien el funcionamiento de la administración y entiendo la lógica política. Creo que todo ello ha contribuido a conseguir algo que llevaba pendiente desde 2009: la aprobación del Contrato de Gestión del CSIC 2023-2026, que supondrá un avance enorme para la institución en términos de gestión, presupuestarios y científicos.

En todo caso, yo no trabajo sola, no sabría hacerlo, ni me gustaría. Mi equipo más cercano está compuesto por personas de numerosas disciplinas, desde las matemáticas hasta la química. Me gusta muchísimo trabajar con personas de diferentes disciplinas y bagaje profesional y tener cerca a personas de todas las edades.

— Después de un año ¿Cuál es su análisis de la situación actual del CSIC? Según la nota de prensa del MICINN de día 21 de junio de 2022: sus objetivos son la mejora de las condiciones laborales de los investigadores y del personal laboral y administrativo, menos cargas burocráticas y administrativas y actualizar las estructuras organizativas y de gobernanza.

En un año hemos conseguido muchas cosas. El Contrato de Gestión implicará un fuerte incremento presupuestario, pero también la necesidad de ser eficaces para cumplir nuestros nuevos objetivos de gestión y científicos, que son muy exigentes. Ahora nos estamos preparando para el enorme reto de ser evaluados por terceros.

En términos más concretos, mencionaré cuatro grupos de objetivos. A grandes rasgos tenemos muchos retos de gestión. Hemos simplificado los procedimientos en cinco áreas de gestión y ahora iniciamos la segunda parte del Plan Simplifica. El reto es trabajar con el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades para convencer al de Hacienda de que para ir más allá necesitamos su apoyo. Tenemos también que implementar la segunda fase y siguientes del Plan TIC CSIC. En este ámbito hay muchas carencias en el CSIC vinculadas a años y años de austeridad y a que las tecnologías avanzan tanto que como no estés actualizándote constantemente, te quedas atrás. Este plan transformará a la institución. Finalmente, en

la actualidad tenemos en marcha más de 120 obras, algunas muy importantes, para acondicionar edificios y espacios.

En segundo lugar, estamos revisando en profundidad la forma en que se gobierna esta gran institución, de 14.000 personas, distribuida por todo el territorio nacional en casi 150 centros, multidisciplinar, con grandes infraestructuras científicas y con numerosos objetivos que van desde la producción de ciencia de altísima calidad, al asesoramiento científico o la divulgación. Hay que revisar y mejorar las normas que establecen cómo debemos comportarnos y las relaciones con terceros, por ejemplo, con las universidades con las que el CSIC tiene 52 centros. En este próximo año, y por citar solo unos ejemplos modestos de lo que haremos respeto a la gobernanza, vamos a poner en marcha un plan de comunicación institucional y un comité de sostenibilidad que no puede faltar en una institución científica moderna como el CSIC.

Desde el punto de vista de la retención de las personas talentosas, tanto investigadores como gestores, hemos puesto en marcha numerosos programas, por ejemplo, de formación o de movilidad para el personal predoctoral científico y para el personal técnico y de gestión. Estamos apostando mucho por captar jóvenes científicos. No podemos competir salarialmente con el sector privado, pero sí facilitando que

“Estamos revisando en profundidad la forma en que se gobierna el CSIC”

puedan formar equipos, disponer de la última infraestructura y reconocer su esfuerzo. Todo ello está teniendo resultados. Tenemos cifras récord en captación de Ramones y Cajales, por ejemplo, pero queda mucho por hacer.

Finalmente, obviamente nuestro objetivo más importante es producir ciencia de frontera y hemos puesto en marcha varios programas como Pro-ERC, para mejorar resultados en esas convocatorias europeas, y otros programas como el MaX, que va a incentivar a los centros del CSIC para que den pasos decididos hacia la excelencia. Además, el CSIC quiere demostrar algo que los científicos ya sabemos, pero que quizá no sea evidente para todo el mundo, y es que con investigación y ciencia se pueden abordar mejor los retos de la humanidad y, por ello, hemos puesto en marcha programas cuyo fin es la transferencia de conocimiento, como nuestro Converte de emprendimiento y transferencia, o aquellos que quieren llevar la cultura científica y la ciencia ciudadana a todos los rincones de nuestro país.

MARÍA C. DE LA TORRE
Miguel Á. Sierra

“Nuestro objetivo más importante es producir ciencia de frontera”

COMUNICADO

Estimados miembros de la RSEQ,

Como sabéis, la RSEQ es co-propietaria de las revistas del consorcio *Chemistry Europe* (CE), un portfolio de 20 revistas que abarcan todas las áreas de la química, tanto en formato abierto, como en formatos híbrido o clásico.

Chemistry Europe representa un proyecto serio y sólido, que apoya el desarrollo profesional de sus miembros promoviendo valores de integridad, diversidad, cooperación y libertad de pensamiento. Nuestra sociedad, la RSEQ, como co-propietaria del consorcio, se beneficia directamente de los artículos publicados por sus miembros en revistas de CE y estos beneficios repercuten en la financiación de los eventos científicos organizados por los socios a través de los grupos especializados y secciones territoriales.

En una época de notables cambios en el panorama editorial, las revistas de CE mantienen intactos los estándares de calidad con equipos editoriales profesionales, altamente cualificados y garantizan un proceso riguroso de revisión por pares.

Chemistry Europe supports its members at every stage of their careers as they strive to solve the challenges that impact humankind. In all its work, Chemistry Europe values integrity, openness, diversity, cooperation, and freedom of thought. The RSEQ is co-owner of the Chemistry Europe journals and benefits directly from every article published. Therefore, as a member you benefit as well as the money can be spent on, e.g., scientific events organized by the society. The Chemistry Europe Journals are leading journals in their respective field. Meanwhile, there are 20 journals in the portfolio, so there is home for every quality paper you submit. A dedicated in-house editorial team that adheres to the highest rigorous peer review standards to ensure quality is always at the fore.

MAR GÓMEZ-GALLEGO

Representante de la RSEQ en ChemEurope



OPINIÓN



L. González

Departamento de Química Física,
Facultad de Ciencias Químicas.
Universidad Complutense de Madrid
E-mail: lgonzal@ucm.es
Recibido: 13/11/2023
Aceptado: 30/11/2023
ORCID: 0000-0003-1900-1241

El verdadero coste de los Acuerdos Transformativos

Luis González

Resumen: Los presentes Acuerdos Transformativos suscritos por la CRUE y el CSIC suponen un desembolso de 170 millones de euros en gastos de suscripción y publicación. Al precio de unos 2500 € por artículo en abierto, nos abocan a un modelo completamente inasumible que costará cinco veces más que los actuales costes de suscripción de todas las bibliotecas universitarias.

Palabras clave: Acceso Abierto, repositorios, industria editorial, Acuerdos Transformativos.

Abstract: The present Transformative Agreements signed by the CRUE and the CSIC involve an outlay of 170 million euros in subscription and publication costs. At a price of about 2500 € per open article, they lead us to a completely unaffordable model that will cost five times more than the current subscription costs of all university libraries.

Keywords: Open Access, repositories, publishing industry, Transformative Agreements.

El negocio de las publicaciones científicas y el Acceso Abierto

Una de las tareas más importantes en el ejercicio de la investigación es indudablemente la lectura de la literatura científica. Durante muchos años, en España ésta era una ingrata tarea, por la dificultad de acceso a las revistas científicas. Con un limitado presupuesto, las bibliotecas podían únicamente costear una fracción de todos los títulos. El precio de las suscripciones se había erigido, tanto en España como el resto del mundo, en una barrera a la comunicación científica.

No en vano, la difusión de los resultados de investigación es un enorme negocio. Como ejemplo, cuatro de las más grandes editoriales –Elsevier, Springer-Nature, Wiley y Taylor & Francis– declaran ingresos superiores a los 15 000 millones de euros anuales, lo que sitúa a la industria editorial entre medias de la industria audiovisual y discográfica en volumen de facturación.^[1] La diferencia importante es que estos beneficios derivan de la investigación realizada principalmente en centros públicos de investigación, que asumen el coste laboral y la financiación de las investigaciones. Las editoriales científicas, por tanto, comercian con una mercancía que obtienen gratuitamente, lo que propicia unos márgenes de beneficio inauditos del 40%.^[1]

Aprovechando las nuevas posibilidades ofrecidas por la aparición de internet, a finales del siglo pasado la comunidad de física y matemáticas creó la primera gran plataforma de

acceso público universal a la ciencia, el repositorio [ArXiv](https://arxiv.org/).^[2] Este sitio web, permite depositar gratuitamente los manuscritos de las revistas del área de física y matemáticas en formato digital, saltándose así el obstáculo que la suscripción de pago suponía al acceso de la literatura científica. La viabilidad de este modelo queda avalada por el enorme éxito de esta iniciativa, que recibe alrededor de 180 000 artículos anuales, lo que se alcanza a gestionar mediante donaciones desinteresadas a un precio de apenas 14 \$ por artículo (no confundir con ChemRxiv, repositorio que es incompatible con el depósito de artículos para revistas de suscripción).

De esta manera, se constituyó desde el mundo académico el primer modelo de acceso abierto, actualmente llamado *Acceso Abierto Verde*. Consiste en el envío de artículos científicos a revistas de suscripción para su aval científico por medio de la revisión por pares, y su puesta a disposición pública por depósito en repositorios institucionales.

El “Acceso Abierto” Dorado

Ante el riesgo de que este modelo pudiese prosperar y poner en riesgo sus beneficios, los grandes grupos editoriales han pasado a abanderar un falso movimiento de acceso abierto, adaptado a sus propios intereses.^[3] En efecto, es cada vez mayor el número de revistas que permiten a los autores la posibilidad de publicar en abierto sus artículos a cambio de unos costes por procesamiento de artículo (o APC, de su

nombre en inglés). Es el llamado modelo de *Acceso Abierto Dorado*, que desgraciadamente, muchas instituciones públicas universitarias, españolas y europeas promulgan como el modelo canónico de Acceso Abierto, en detrimento del original modelo de Acceso Abierto Verde propuesto por la comunidad científica.

La Ruta Dorada, sin embargo, no es más que el ilusorio derribo de las barreras a los lectores a cambio del establecimiento de una nueva y costosa barrera a los autores de trabajos científicos, igualmente en detrimento de la divulgación de la ciencia y en beneficio de los intereses particulares.

Desde luego, para un grupo de investigación, es una gran desventaja encontrarse barreras al acceso de la literatura. Pero trocar esta barrera por otra por divulgar las investigaciones propias, elimina en la práctica el mismo objeto de la investigación académica. De hecho, los elevados costes del acceso abierto dorado excluyen la participación de multitud de grupos de investigación al acervo científico, especialmente en países menos favorecidos.^[4] Entre los países más favorecidos económicamente, se constata fácilmente que el precio de las APC se alinea con la reputación bibliométrica de las revistas, lo que genera sesgos en beneficio de los grupos mejor financiados y por ende con más posibilidades de comprarse una ventana de visibilidad en el mercado editorial.

Pero realmente, el mayor problema del modelo de Acceso Abierto Dorado es que el pago de una APC por artículo, supone un enorme incentivo perverso que amenaza seriamente la credibilidad de toda la ciencia. En efecto, en los modelos de suscripción, los editores privados en busca de beneficio están obligados a crear un producto de calidad para incentivar el mayor número de suscripciones, que es la fuente de sus ingresos. En el modelo de Acceso Abierto Dorado, por el contrario, el incentivo es justo el contrario, ya que cuantos más artículos se publiquen, más beneficios se generan para la industria editorial, independientemente de su calidad. Por lo tanto, el modelo de acceso abierto dorado está en la raíz misma del auge de las revistas depredadoras, un fenómeno bien documentado en la prensa científica,^[5] que suscita cada vez mayor preocupación en la sociedad, como se ha podido comprobar recientemente en la prensa nacional.^[6,7,8]

Desgraciadamente, y a pesar de estos problemas, el acceso abierto dorado parece estar imponiéndose como forma de financiación de la literatura científica. La causa es compleja, pero obedece entre otras razones a una estrategia comercial que cuenta lamentablemente con amplia cobertura institucional. En particular, el acceso abierto dorado se ha visto fomentado desde las propias instituciones europeas, por vía de la llamada *cOAlición S*, que está formada por las más importantes agencias financiadoras europeas y cuenta con el apoyo de la Comisión Europea y el Consejo Europeo de Investigación (ERC).^[9]

Los Acuerdos Transformativos

El objeto de esta entidad es, en principio el loable fomento del Acceso Abierto. Sin embargo, el instrumento escogido para alcanzarlo no es otro que la Ruta Dorada-el modelo

oneroso impulsado por las grandes editoriales- y la vía son los *Acuerdos Transformativos*,^[10] que en España hemos visto ampliamente anunciados desde el CSIC y la CRUE, a través de las bibliotecas universitarias.

El caso es que la amplia difusión institucional de estos acuerdos no incluye, generalmente, información alguna sobre su coste, y muy poca información adicional sobre sus condiciones, lo que nos deja a la comunidad científica sin un elemento esencial para juzgar sus bondades.

De hecho, en el portal de la CRUE *dedicado a los Acuerdos Transformativos*,^[10] la información que figura indica que "Gracias a estas negociaciones, los investigadores e investigadoras de ambas instituciones podrán seguir accediendo a la lectura y descarga de los artículos científicos de las revistas suscritas y publicar más artículos en abierto, *sin costes adicionales*."

El coste de los acuerdos

Pero no. Los Acuerdos Transformativos no son un regalo de Reyes. Más bien, la realidad es que el vigente modelo de Acceso Abierto Dorado es un modelo completamente inviable que amenaza devorar el equivalente de todos los fondos de investigación destinados al Proyecto Nacional de Generación del Conocimiento en Investigación Orientada y no Orientada.

La lectura detallada de los acuerdos contraídos con las editoriales *Elsevier*, *Springer-Nature*, *Wiley* y *ACS* por un periodo de cuatro años, resumida en la Tabla 1, indican que el coste es desde luego muy significativo: **163 millones de euros** es el gasto que le supone al CSIC y las universidades españolas la suscripción a una nutrida colección de alrededor de 5500 revistas, y la posibilidad de dar Acceso Abierto Dorado a un total de unos 50 000 artículos, mediante el pago de las correspondientes APC.

Entre los responsables de promocionar estos acuerdos, hemos oído decir con frecuencia que no suponen un gasto adicional, ya que permiten el acceso abierto de un importante número de artículos por el mismo coste que hubiese supuesto suscribirse a la colección de revistas.

Los detalles de los acuerdos dicen lo contrario. En efecto, tanto el acuerdo contraído con la editorial *Elsevier*,^[11] que es el mayor con diferencia, como el contraído con la editorial *Springer-Nature*,^[12] desglosan perfectamente los costes de suscripción y de publicación en abierto. En el caso del acuerdo con *Elsevier*, de los 100 millones de euros que suponen el acuerdo, 65 corresponden exclusivamente al gasto por publicar 26 000 artículos en abierto. En el caso del acuerdo con *Springer-Nature*, el gasto en APCs para sufragar el acceso abierto a unas 9000 publicaciones es de 21 millones de Euros. El caso de *Wiley* es distinto,^[13] ya que en efecto, el coste íntegro del acuerdo corresponde a gastos de publicación en abierto, con lo que se puede admitir que las suscripciones se integran en el coste completo. Sea como sea, en estas tres editoriales nos encontramos por tanto que el gasto que asumimos en España para lograr un acceso abierto parcial y muy limitado de

nuestros artículos mediante el modelo dorado oscila entre 2400 y 2600 euros.

Lamentablemente para la Química, el acuerdo suscrito con la *American Chemical Society* es con diferencia el más caro,^[14] ya que cuesta alrededor de 12 millones de euros, a cambio de la suscripción a sus revistas y el acceso abierto a 2600 artículos al precio medio de 3750 \$ por APC.

Para poner el gasto en contexto, conviene observar que, de acuerdo al portal *Web of Science*, la producción científica nacional en revistas indexadas es de alrededor de 130 000 artículos anuales (datos de 2021). Es por tanto muy fácil hacer la cuenta y observar que, si se alcanza la *transformación* impulsada por nuestros gestores científicos a un precio de 2500 euros por artículo, los gastos de publicación en acceso abierto supondrían alrededor de 360 millones de euros anuales. Esta cantidad supera en más de cinco veces el gasto íntegro de las universidades españolas en publicaciones electrónicas de pago declarado por la Red de Bibliotecas Universitarias (REBUIN), que supone un gasto de 65 millones,^[15] y corresponde nada más ni nada menos que al 80% de todo el presupuesto del Plan de Generación del Conocimiento de 2021, que alcanzó los 452 millones de euros.

Tabla 1. Coste de los Acuerdos Transformativos, desglosados por editorial y concepto. Datos aproximados estimados de la información limitada disponible en las referencias [10-14]. Los datos de la ACS no son en euros sino en dólares.

Editorial	Coste total (millones de €)	Número de APCs	Gasto en APCs (millones de €)	Coste por APC (en €)
Elsevier	101.721	26.436	65.058	2.461
Springer	24.943	8.757	21.346	2.438
Wiley	24.000	9.178	-	2.600
ACS	12.415	2.665	-	3.750
Total	163.078	47.118		

Para poner otro ejemplo, consideremos que el vigente gasto en suscripciones de la Universidad Complutense de Madrid asciende a 1,7 millones de euros, que por mor de los acuerdos transformativos, da derecho a la publicación de unos 1800 artículos en acceso abierto dorado durante cuatro años. Sin embargo, de acuerdo a su propio portal bibliométrico, la Complutense publica alrededor de 11 000 artículos al año, con lo que sufragar su producción completa de acuerdo a este modelo aumentaría los costes de biblioteca por encima de los 20 millones de euros anuales.

No en vano, estos acuerdos se conocen entre los bibliotecarios, como los Acuerdos *Transformativos*. Este título jocoso ilustra a las claras la percepción entre los expertos de que el modelo vigente no es en absoluto beneficioso para la comunidad científica, pero también, incomprensiblemente, la circunstancia de que la CRUE ha excluido a los bibliotecarios del proceso negociador. Paradójicamente, en cambio, les corresponde la tarea de promocionar los acuerdos entre los investigadores de sus correspondientes centros.

Condiciones y desventajas

Lo cierto es que los actuales Acuerdos Transformativos no solo tienen un coste inasumible, sino que además, no consiguen en modo alguno la aspiración de acceso abierto. En efecto, los acuerdos con Elsevier, Springer-Nature y Wiley, solo cubren los gastos de publicación en las llamadas *Revistas Híbridas*. Es decir, las revistas de suscripción que ponen en abierto únicamente los artículos de aquellos autores con presupuesto para sufragar una APC. Por tanto, cuando expiren los acuerdos en 2024, los autores españoles no podremos consultar los artículos sin acceso abierto de dichas revistas, salvo nueva suscripción.

Resulta desde luego paradójico, que el plan español para alcanzar el acceso abierto ampare únicamente revistas que exigen la suscripción para poder leer íntegramente sus contenidos.

El pretexto es que las revistas necesitaban un periodo de transición para transformar su modelo por suscripción al modelo de acceso abierto dorado, lo que explica el nombre de los acuerdos. La realidad, varios años después de lanzado el plan, muestra el fracaso de los objetivos. En efecto, en un reciente *informe* de la propia coAlition S que lo impulsó,^[16] se constata que el 70% de las revistas incumplieron el ritmo de transformación acordado, y solo un 1% de todas las revistas estudiadas se transformaron en revistas 100% de acceso libre.

Algunos otros detalles de los acuerdos resultan poco favorables al interés de la ciencia española.

En particular, el gasto acordado para sufragar los artículos en abierto está comprometido *a priori* e **independientemente de su ejecución**. O lo que es lo mismo, las editoriales se embolsan el fondo para sufragar los 50 000 artículos en acceso abierto, tanto si los investigadores españoles hacemos uso de él como si no. Acaso esto fuese un detalle menor, si la ejecución de los acuerdos fuese plena. Pero lo cierto es que los datos indican nuevamente lo contrario. En el caso de la Universidad Complutense, por ejemplo, cuyo acuerdo supone 5,3 millones de Euros, *la ejecución* ha sido del 86% en 2021 y del 83% en 2022,^[17] por lo que alrededor del 15% de los gastos comprometidos en APCs durante los dos primeros años fueron a parar a manos de las editoriales sin beneficio alguno para la institución.

En cuanto a la calidad de la colección de revistas suscritas bajo el acuerdo, cabe indicar que según *un estudio* de la Universidad Complutense, 2067 títulos del total de 5485 corresponden a revistas sin índice de impacto.^[18] Esto resulta bastante paradójico, puesto que la ANECA ha considerado tradicionalmente como indicios suficientes de calidad a efecto de la evaluación de sexenios únicamente las revistas en el primer cuartil, y sin embargo, se contrae un acuerdo de suscripción en el que el 37% de los títulos ni siquiera alcanzan el nivel atribuible al cuarto cuartil de calidad. Es más, los actuales acuerdos transformativos con Elsevier, Wiley y Springer excluyen explícitamente las revistas de acceso abierto íntegro lo que con frecuencia excluye los mejores títulos y significativamente, todas las revistas de la colección *Nature Research*.

Ante esta lista de condiciones desventajosas, no es de extrañar que el impulso al modelo de Acceso Dorado promovido desde las instituciones europeas, haya supuesto un enorme aumento de la ya de por sí dominante posición monopolista de las grandes editoriales. En efecto, estudios recientes muestran cómo, la cuota de mercado de las cinco mayores editoriales ha aumentado desde el 52 % en el año 2018, hasta el 61 % en 2022, coincidiendo justamente con el lanzamiento del Plan S promovido por coAlition_S.^[19] Este crecimiento de las grandes editoriales va poco a poco dejando fuera de juego a las Sociedades Científicas sin ánimo de lucro, ya que el tamaño de los grandes grupos les permite negociar suscripciones y acuerdos en posición ventajosa.^[20]

Vemos por tanto que el esfuerzo institucional en promocionar el acceso abierto por la vía dorada y satisfacer las demandas editoriales de 'un precio justo' por sus publicaciones, no está consiguiendo garantizar el acceso abierto, aumenta la posición dominante de las grandes editoriales y amenaza con incrementar los costes de publicación de manera inasumible.

Por supuesto, publicar tiene un coste. ¿Pero cuál es el precio justo para una revista? El modelo ArXiv, y otras iniciativas similares,^[21] muestran que el mero depósito de manuscritos electrónicos, no supera el coste de 20 € por artículo. La posterior validación de los manuscritos depositados precisa de un trabajo de revisión, pero, como todos sabemos, esta es una tarea que la comunidad científica hace desinteresadamente, y es nuevamente subvencionada por las instituciones públicas (un estudio sugiere que las horas de trabajo en revisiones desinteresadas corresponden a un gasto de mil millones de euros anuales en costes salariales^[22]). ¿Justifican realmente los costes de edición y revisión el aumento del precio de los artículos desde los exigüos 20 € por artículo de ArXiv hasta el actual precio de 2500 € de los Acuerdos Transformativos?

Por desgracia para los químicos, según la ACS, podría ser que sí. En efecto, en un comunicado del septiembre de 2023,^[23] la ACS ha anunciado que en aras del acceso abierto, y para satisfacer las demandas de las agencias financiadoras, permitirá a los autores depositar los manuscritos en repositorios públicos previo pago de...2500 \$... ¡Antes de la revisión! En efecto este es el precio que la ACS sostiene que le cuesta pedirle gentilmente a los químicos que revise los manuscritos gratuitamente, junto con otros procesos mucho más costosos como la búsqueda de los revisores, el envío de las revisiones a los autores, etc., etc.

Pero otros indicios apuntan a que la ACS, al igual que muchas otras editoriales, abusa manifiestamente de su posición en detrimento de la comunidad científica. Para hacernos a la idea, es interesante mencionar la iniciativa [Open Research Europe](#),^[24] la plataforma que el Consejo Europeo ha establecido como escaparate de acceso abierto para los resultados de los proyectos Horizon 2020 y Horizon Europe. La gestión de esta plataforma está externalizada y gestionada por la empresa F1000, una filial de Taylor & Francis, que le cobra a la Comisión Europea un precio de 820 € por artículo publicado. Suponemos que F1000 no ha aceptado el encargo a pérdidas y que este precio tres veces menor que los APC de los actuales Acuerdos Transformativos es

suficiente para proporcionarle beneficios. Esto muestra a las claras la desproporción de las actuales APC. Otro ejemplo es la iniciativa SCOAP,^[25] que permite publicar en acceso abierto artículos de física de partículas en revistas de Elsevier, Springer, Hindawi y APS, entre otras, y tiene un coste de 1200 € por artículo. En este caso la mitad que los acuerdos transformativos, a pesar de que incluye revistas de las editoriales Elsevier y Springer.

La revisión del Plan S y las expectativas de rendición de cuentas

Afortunadamente, entre esta serie de datos descorazonadores, hay indicios de que las autoridades políticas podrían estar echando marcha atrás en su apoyo al modelo de acceso dorado. En mayo, el Consejo Europeo emitió una declaración reclamando la promoción de modelos de publicación dirigidos por sociedades sin ánimo de lucro, sin costes para los autores ni los lectores. En octubre, la coalición S ha reformulado su malogrado plan, asumiendo las propuestas del Consejo Europeo y eliminando cualquier mención al modelo de acceso dorado.

Mientras tanto, en España se negocia una renovación de los acuerdos transformativos. Las autoridades negociadoras españolas deben tomar nota de los costes inasumibles a los que nos abocan y de su efecto pernicioso sobre la credibilidad de la ciencia. Pero sobre todo, lo que es imprescindible es que los responsables de las negociaciones den oportunas explicaciones, no solo sobre los beneficios, como quien graciosamente nos concede un don, sino también sobre los costes, como quien rinde cuentas responsablemente a la comunidad científica de sus decisiones.

A falta de iniciativa, las sociedades científicas deben pedir explicaciones sobre este gasto y sus supuestos beneficios, reclamando un uso racional y eficiente de los escasos recursos a disposición de la ciencia en España.

Bibliografía

- [1] T. Bauwens, D. Reike y M. Calisto-Friant, *Env. Inn. Soc. Trans.* **2023**, *48*, 100749.
- [2] <https://arxiv.org> visitada el 14/12/2023.
- [3] S. Kember y A. Brand, *The Chronicle of Higher Education*, **2023**, 16 de agosto.
- [4] A. Farley, A. Langham-Putrow, E. Shook, L.B. Sterman, M. Wach, *Schol. Comm.* **2021**, *82*, 7.
- [5] R. van Noorden, *Nature*, **2023**, <https://doi.org/10.1038/d41586-023-03464-x>.
- [6] M. Ansedé, "Una megafábrica de estudios científicos falsos", *El País*, **2023**, 5 de octubre.
- [7] M. Ansedé, "La burbuja de las revistas científicas se traga millones de euros de dinero público", *El País*, **2023**, 31 de octubre.
- [8] D. Sánchez Caballero, "Se vende paper por 2000 dólares", *elDiario.es*, **2023**, 22 de Julio.
- [9] <https://www.coalition-s.org/> visitada el 14/12/2023.

- [10] <https://www.crue.org/proyecto/acuerdos-con-editoriales/> visitada el 14/12/2023.
- [11] <https://www.crue.org/wp-content/uploads/2022/02/Letter-to-CRUE-29th-of-January-021-vdef.pdf> visitada el 14/12/2023.
- [12] <https://www.crue.org/wp-content/uploads/2021/09/MoU-Springer.pdf> visitada el 14/12/2023.
- [13] <https://www.crue.org/wp-content/uploads/2021/09/MoU-WILEY.pdf> visitada el 14/12/2023.
- [14] <https://www.crue.org/wp-content/uploads/2022/01/MoU-ACS.pdf> visitada el 14/12/2023.
- [15] <https://rebiun.um.es/rebiun/admin/ManagelIndicatorsPage> visitada el 14/12/2023.
- [16] <https://www.coalition-s.org/blog/transformation-journals-analysis-from-the-2022-reports/> visitada el 14/12/2023.
- [17] <https://biblioguias.ucm.es/publicar-en-acceso-abierto/inicio> visitada el 14/12/2023.
- [18] <https://www.youtube.com/watch?v=bkKiG6A4ytU> visitada el 14/12/2023.
- [19] D. Crotty, "Quantifying Consolidation in the Scholarly Journals Market", *The Scholarly Kitchen*, **2023**, 30 de octubre.
- [20] S. Sánchez-García, *Blog Aula-Magna 2.0*. **2021**, ISSN. 2386-6705.
- [21] I. Bernal y P. Perakakis, *Nature*, **2023**, 619, 698.
- [22] B. Aczel, B. Szaszi y A.O. Holcombe. *Res. Integr- Peer Rev.* **2021**, 6, 14.
- [23] <https://www.acs.org/pressroom/newsreleases/2023/september/acs-publications-provides-new-option-to-support-zero-embar-go-green-open-access.html> visitada el 14/12/2023.
- [24] <https://open-research-europe.ec.europa.eu/> visitada el 14/12/2023.
- [25] <https://scoap3.org/> visitada el 14/12/2023.



¿Quieres formar parte de una de las sociedades científicas más importantes de España?

Si tienes menos de 26 años hazte miembro por 15€



Real Sociedad Española de Química

www.rseq.org



Astroquímica computacional y fenómenos de superficies de los granos de polvo interestelar

INVESTIGACIÓN QUÍMICA

Albert Rimola, Joan Enrique-Romero, Stefano Ferrero,
Harjasnoor Kakkar, Berta Martínez-Bachs, Eric Mates-Torres,
Gerard Pareras y Jessica Perrero 



A. Rimola, J. Enrique-Romero, S. Ferrero,
H. Kakkar, B. Martínez-Bachs, E. Mates-torres,
G. Pareras y J. Perrero

Departament de Química,
Universitat Autònoma de Barcelona,
08193 Bellaterra, Spain

C-e: albert.rimola@uab.cat

Recibido: 13/04/2023

Aceptado: 14/09/2023

ORCID: 0000-0002-9637-4554

Resumen: El Universo es molecularmente rico. Su diversidad y complejidad químicas se reflejan en las prácticamente 300 especies detectadas en el medio interestelar, algunas formándose en las superficies de los granos de polvo interestelar. La Astroquímica se estudia tradicionalmente mediante observaciones astronómicas, combinadas con modelos astroquímicos y experimentos, pero presentan algunas limitaciones. Las simulaciones de química computacional proporcionan información cuantitativa a escala atómica (estructura, energética y dinámica) de los procesos que tienen lugar en la superficie de los granos. Aquí, se presentan algunas de estas potencialidades relativas a la modelización de superficies, adsorción y reactividad, y efecto del tercer cuerpo.

Palabras clave: Química computacional, medio interestelar, modelización de superficies, adsorción, reactividad, tercer cuerpo.

Abstract: The Universe is molecularly rich. Its chemical diversity and complexity are reflected in the almost 300 species detected in the interstellar medium, some forming on the surfaces of interstellar dust grains. Astrochemistry is traditionally studied through astronomical observations, combined with astrochemical models and experiments, but they have some limitations. Computational chemistry simulations provide quantitative information at the atomic scale (structure, energetics and dynamics) of the processes occurring on the surface of the grains. Here, we present some of these potentials regarding surface modelling, adsorption and reactivity, and third-body effect.

Keywords: Computational chemistry, interstellar medium, surface modelling, adsorption, reactivity, third body.

Introducción

Hay pruebas claras de que el Universo contiene una diversidad y complejidad química muy rica. Desde la detección de la primera molécula poliatómica interestelar, el NH_3 , en 1968,^[1] la astroquímica ha experimentado un crecimiento vertiginoso, y es, en la actualidad, un campo maduro de la astrofísica y la física molecular.

Las observaciones astronómicas muestran que el medio interestelar (ISM, las regiones entre las estrellas) no está vacío sino lleno de materia difusa. El ISM está formado por una mezcla de materia en fase gas y granos de polvo. Esta materia no está distribuida uniformemente, sino que se agrupa formando nubes de gas, polvo y hielo (nubes interestelares).^[2-4] Observaciones espectroscópicas en el rango de las radiofrecuencias, microondas e infrarrojo cercano han permitido detectar prácticamente 250 moléculas gaseosas.^[5] La absorción en el infrarrojo medio se ha utilizado para identificar la presencia de materia en estado sólido (los granos de polvo interestelar) y sondear la composición y el estado estructural de los mismos. Según las condiciones de temperatura y densidad de la nube, se puede diferenciar entre nubes difusas y nubes

densas. En las nubes difusas (con una temperatura de 50-100 K y una densidad de gas de $10\text{-}10^2$ partículas cm^{-3}), los granos están formados por silicatos amorfos o materiales carbonáceos,^[6,7] mientras que en las nubes densas (con una temperatura de 5-10 K y una densidad de gas de $10^4\text{-}10^5$ cm^{-3}) los materiales refractarios están cubiertos por mantos de hielo, compuestos principalmente por H_2O , y especies menos abundantes, como CO , CO_2 , NH_3 y CH_3OH .^[8]

La formación de un sistema planetario de tipo solar es el resultado de la evolución de una nube interestelar primordial, que tiene lugar a través de cinco etapas físicas: la fase presolar, la fase protoestelar, la fase del disco protoplanetario, la fase planetesimal, y la fase de formación de planetas.^[9] La química presente en las distintas etapas es también de gran importancia. De hecho, las observaciones indican que esta sucesión de etapas va de la mano de una evolución química en la que, a cada paso, se forman moléculas más complejas, y que a su vez podría estar relacionada con el origen de la vida.^[10,11]

El aumento de la diversidad y complejidad química presente en un sistema solar naciente puede resumirse en tres grandes procesos: (i) formación de moléculas simples, como

el H_2 (la molécula más simple), H_2O , NH_3 o CH_3OH ; (ii) la síntesis de moléculas orgánicas complejas interestelares (denominadas iCOMs^[12, 13]), que son compuestos formados por 6-13 átomos donde al menos uno es C, como CH_3CHO o NH_2CHO , y (iii) producción de algunas moléculas de relevancia biológica, tales como aminoácidos, nucleobases y azúcares. Los dos primeros tendrían lugar principalmente durante las tres primeras etapas (prestelar, protoestelar y disco protoplanetario) mientras que la última en las finales (planetesimal y planetaria).^[9] Cabe destacar que esta riqueza química no se limita a los entornos locales de nuestra galaxia (en las que se realizan la mayoría de las observaciones astronómicas), ya que las nubes de las galaxias externas también se componen de gas enriquecido de moléculas y granos de composición similar.^[5, 14, 15]

Las cadenas de reacción que tienen lugar en la fase gaseosa pueden explicar la formación de algunos de estos compuestos, pero no de todos. En efecto, los granos también pueden ayudar en la formación de especies clave, como moléculas simples H_2 ,^[16-20] H_2O ,^[21-26] CO_2 ,^[27, 28] y CH_3OH ,^[27-30] y como iCOMs CH_3CH_2OH ,^[31] NH_2CHO y CH_3OOCH .^[32-39] Además, las moléculas de mayor complejidad que las iCOMs se han identificado hasta ahora exclusivamente en algunos cometas y meteoritos,^[40, 41] cuya formación seguramente favorecida por procesos de alteración hidrotérmica^[42-45] y porque los componentes minerales de estos cuerpos pueden actuar como catalizadores.^[46-48]

La investigación en astroquímica se ha llevado a cabo habitualmente mediante un enfoque interdisciplinar, combinando observaciones espectroscópicas astronómicas con modelos astroquímicos y experimentos de laboratorio. A pesar del progreso realizado, existen ciertas limitaciones, tal como no poder dar información sobre cómo se forman las moléculas detectadas o las incertidumbres asociadas a los modelos debido a la falta de precisión de algunos parámetros de entrada. En este contexto, la química computacional es una herramienta complementaria que puede ayudar a aliviar algunas de estas limitaciones ya que permite proporcionar una perspectiva estructural, energética y dinámica de los pasos elementales implicados en fenómenos de superficie de los granos. Por ejemplo, son de vital importancia datos energéticos tales como las energías de adsorción, de activación de reacciones, y de difusión, ya que son parámetros de entrada en los modelos astroquímicos, los cuales recurrentemente se introducen como valores estimados o aproximados asociados a incertidumbres, que se transfieren (y amplifican, debido a las condiciones extremas del ISM) en las predicciones de los modelos. Además, las simulaciones pueden ayudar a determinar el papel de los granos en las reacciones, esto es, como catalizadores químicos (reduciendo la energía de activación con respecto a la fase gaseosa), como concentradores de reactivos que permitan su encuentro para la posterior reacción (particularmente importante en condiciones de gran dilución como las del ISM), o como tercer cuerpo (absorbiendo las energías de reacción de reacciones exotérmicas, estabilizando los productos formados).

La presente contribución tiene por objetivo mostrar algunas de las potencialidades de las simulaciones computacionales en el contexto de la astroquímica de superficies, y que son de gran utilidad para entender mejor la riqueza química presente en el Universo y el papel que ejercen los granos de polvo en ella.

Modelización de superficies interestelares de agua hielo

La precisión de los resultados teóricos, además de los métodos químicocuanticos, también depende de los modelos específicos adoptados para simular las superficies de hielo.^[49] Dos estrategias para modelizar las superficies externas de los granos de hielo son: la aproximación periódica y la aproximación de clúster.

La aproximación periódica consiste en aplicar condiciones de contorno periódicas (PBC) a una celda unitaria que contiene los sitios de adsorción/catalíticos de la superficie, lo que da lugar a un modelo de slab 2D infinito, es decir, la periodicidad sólo se aplica en las dos direcciones que definen la celda unitaria de la superficie. Los hielos interestelares suelen ser amorfos y porosos,^[8, 50-52] aunque el grado de porosidad aún no está claro.^[53] Las PBC también pueden servir para simular sistemas amorfos. Una posible forma de hacerlo es partiendo del sistema cristalino 3D (*bulk*) y someter el sistema a un proceso simulado de "fusión" mediante simulaciones de dinámica molecular (MD) a T relativamente alta, asegurando la desorganización de las posiciones de los átomos. Dado que en los materiales amorfos no hay orden de largo alcance, se acostumbra a definir una gran celda unidad que contenga suficientes átomos para que sea representativa al menos del desorden local del material amorfo.

La aproximación de clúster consiste en recortar del modelo periódico un conjunto finito de átomos que contienen los sitios de la superficie, de modo que la superficie es modelizada esencialmente por un sistema molecular.

Mientras que la aproximación periódica es muy popular y también de alguna manera computacionalmente conveniente, los programas de cálculo disponibles se limitan a métodos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) como nivel de teoría. Además, la localización de las estructuras de los estados de transición está menos desarrollada en comparación con los códigos moleculares, por lo que el uso de la aproximación periódica se limita a procesos cuyos mecanismos de reacción son relativamente "simples". Por el contrario, una gran variedad de programas moleculares cuánticos puede manejar adecuadamente los modelos de clúster, lo que sería especialmente atractivo para caracterizar las superficies de energía potencial de reacciones químicas complejas, y permitiría un mejor tratamiento de la estructura electrónica de sistemas delicados, tales como los de capa abierta, en los que es deseable poder hacer cálculos más allá de los de DFT (e.g., CCSD(T)) siempre que el tamaño del modelo lo permita. En la Figura 1 se muestran tres modelos de agua hielo que se utilizan para describir los resultados de la presente contribución.^[49] En la Figura 1A se muestra un modelo de cluster de 18 moléculas de agua, el cual ha

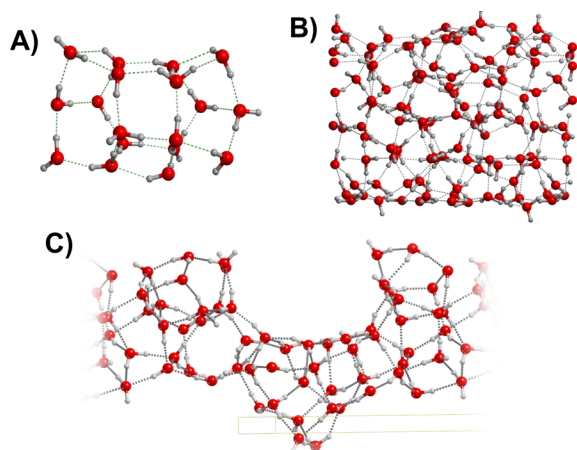


Figura 1. Distintos modelos estructurales de superficies de hielo interstelar: A) modelo de clúster de 18 aguas; B) modelo periódico amorfo compacto; C) modelo periódico amorfo poroso.

sido extraído de la estructura cristalina del hielo hexagonal. En la Figura 1B se muestra un modelo periódico de superficie de hielo amorfo de 576 moléculas de agua, el cual se ha obtenido mediante simulaciones MD clásicas a 300K de la superficie cristalina (010) del hielo. En la Figura 1C se muestra otro modelo periódico que se ha construido a partir de juntar tres modelos de clúster de 20 moléculas de agua y aplicando periodicidad al sistema resultante.

Complejos y energías de adsorción

Los fenómenos de adsorción/desorción son de mucha importancia en el campo de la Astroquímica.^[54] Por un lado, las energías de adsorción/desorción de una especie en una superficie determinan la transición de si dicha especie se encuentra en la fase sólida (e.g., como componente de los hielos) o en la fase gaseosa. Por otro lado, las energías de adsorción/desorción son parámetros cruciales en los modelos astroquímicos

que pretenden reproducir la evolución química en el ISM. Aunque las entalpías de desorción se pueden obtener experimentalmente mediante la técnica de desorción programada por temperatura (TPD), los valores obtenidos son muy dependientes de las condiciones del experimento (composición química y morfología del sustrato y régimen de monocapa o multicapa). Las simulaciones computacionales son una buena estrategia para obtener energías de adsorción precisas, pero es conveniente realizar estudios sistemáticos que cubran la adsorción de un rango considerable de especies interestelares manteniendo una coherencia de métodos y de modelos.

Las energías de adsorción (ΔE_{ads}) se calculan a partir de las expresiones de:

$$\Delta E_{\text{int}} = E_{\text{cplx}} - (E_{\text{surf}} + E_{\text{mol}})$$

$$\Delta E_{\text{ads}} = \Delta E_{\text{int}} + \Delta \text{ZPE}$$

donde ΔE_{int} es la energía de interacción entre la superficie y una molécula a partir de las energías potenciales absolutas del complejo de adsorción (E_{cplx}) y de la superficie (E_{surf}) y la molécula (E_{mol}), y añadiéndole la contribución de las energías de punto zero (DZPE) de cada fragmento.

Aquí presentamos los complejos y las energías de adsorción para distintas moléculas que son de interés astroquímico, i.e., los pares CO/CS, CH₃OH/CH₃SH, H₂CO/H₂CS; H₂O/H₂S, y CO₂/OCS.^[57, 58] Las adsorciones se han simulado utilizando el modelo de superficie mostrado en la Figura 1C, considerando hasta un total de 8 sitios de adsorción. Así pues, se han simulado alrededor de 80 estructuras de complejos de adsorción, algunas de las cuales se muestran en la Figura 2. Debido al gran número de complejos, para acelerar los cálculos, las estructuras construidas iniciales se han optimizado con el método semiempírico GFN2-xTB^[55] implementado en el código CRYSTAL17,^[56] y en las estructuras resultantes se ha realizado un cálculo puntual de energía a nivel B3LYP-D3(BJ) para obtener energías de adsorción precisas.

En la Tabla 1 se muestran los valores de las energías de adsorción (ΔE_{ads}) obtenidos para todos los sistemas en las

Tabla 1. Energías de adsorción (en kJ mol⁻¹) de las especies mencionadas en distintas posiciones de adsorción (pX).

ΔE_{ads}	p1	p2	p3	p4	p5	p6	p7	p8
CO	-15.1	-18.2	-12.8	-12.7	-10.8	-	-	-
CS	-29.8	-35.4	-27.2	-28.1	-29.7	-	-	-
CH ₃ OH	-54.2	-36.6	-54.1	-52.8	-43.2	-55.3	-45.7	-83.8
CH ₃ SH	-38.4	-21.8	-29.7	-23.7	-27.1	-29.9	-27.1	-41.4
H ₂ CO	-29.8	-35.3	-34.6	-39.6	-43.7	-38.1	-32.1	-60.2
H ₂ CS	-16.3	-33.6	-28.4	-29.0	-36.3	-34.5	-25.9	-41.2
H ₂ O	-59.4	-48.5	-49.9	-47.2	-35.0	-	-	-
H ₂ S	-23.4	-32.4	-26.2	-29.5	-22.3	-	-	-
CO ₂	-23.8	-28.7	-21.1	-21.2	-14.5	-	-	-
OCS	-28.3	-24.7	-22.2	-21.3	-14.8	-	-	-

distintas posiciones. A partir de ellos se puede establecer una escalera de afinidad de estas especies con las superficies de hielo interestelar y relacionarla con las estructuras. Por ejemplo, se ve que $|\Delta E_{\text{ads}}|_{\text{CH}_3\text{OH}} > |\Delta E_{\text{ads}}|_{\text{H}_2\text{CO}}$ debido a que el primero puede presentar un sistema de enlaces de hidrógeno cooperativo ya que el CH_3OH presenta un grupo dador y un grupo aceptor de enlaces de H; también se observa que $|\Delta E_{\text{ads}}|_{\text{CS}} > |\Delta E_{\text{ads}}|_{\text{CO}}$ es debido a que el CS puede establecer mayores fuerzas de dispersión con la superficie que el CO; mientras que $|\Delta E_{\text{ads}}|_{\text{CH}_3\text{OH}} > |\Delta E_{\text{ads}}|_{\text{CH}_3\text{SH}}$ es debido a la mayor eficiencia de los enlaces de H del CH_3OH comparado con el CH_3SH .

Los valores obtenidos pueden ser de interés para entender la composición química de los discos protoplanetarios (los sitios donde se forman las semillas de los planetas): si las especies están en estado sólido, éstas se incorporan en objetos rocosos, lo que serían los futuros planetas rocosos. Por el contrario, si las especies están en fase gas, éstas formarían parte de planetas gigantes gaseosos. El locus (la posición particular) en donde se produce la transición sólido-gas en el disco protoplanetario se llama línea de nieve (*snowline*) y sería el punto de partida en la formación de los planetas y de su composición química. Las energías de desorción son uno de los parámetros cruciales para definir estas líneas de nieve en los modelos astroquímicos, en el que especies con menores energías de desorción permanecerán como especies gaseosa a largas distancias del núcleo estelar (y, por lo tanto, mayor será su línea de nieve).

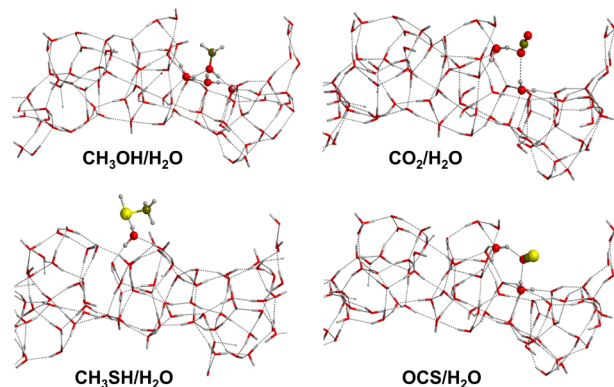


Figura 2. Ejemplos de complejos de adsorción simulados. Los átomos representados con bolas son los que participan directamente en la interacción.

Estudios de reactividad para la formación de iCOMs

Simular las reacciones de formación de moléculas de interés interestelar determinando los correspondientes mecanismos de reacción es una de las mayores contribuciones de la química computacional en el área de la Astroquímica ya que, hoy por hoy, es de exclusividad a la computación.^[35, 59]

Con la desbordante detección de iCOMs, muchos esfuerzos se han dedicado a simular la síntesis de estas especies. Se ha sugerido que la formación de iCOMs en superficies de hielos interestelares ocurre a través de un mecanismo de

acoplamiento radicalario.^[32] Esto es, debido a la incidencia de rayos UV en los mantos de hielo se producen roturas homolíticas de algunos de sus compuestos, los cuales pueden difundirse en las superficies y reaccionar para formar iCOMs. Por ejemplo, el acetaldehído (CH_3CHO) se formaría por acoplamiento entre el CH_3 i HCO que se generan por fotólisis del CH_3OH . No obstante, en una serie de trabajos desarrollados en nuestro grupo,^[36, 38, 39, 60, 61] se ha visto que este mecanismo de acoplamiento radicalario presenta una serie de limitaciones importantes: i) las reacciones presentan barreras de energía (cuando se interpretaba que no tenían) dado que se tienen que romper las interacciones entre los radicales y la superficie; ii) las reacciones precisan de una difusión previa de los radicales para encontrarse, así que las reacciones están sujetas a la probabilidad de encuentro entre los radicales, lo que disminuye su eficiencia; iii) algunas reacciones presentan canales competitivos basados en la abstracción de H (e.g., $\text{CH}_3 + \text{HCO} \rightarrow \text{CH}_4 + \text{CO}$), lo que disminuye nuevamente la eficiencia de la formación de iCOMs.

Para solventar, en parte, estas limitaciones hemos propuesto un mecanismo alternativo basado en la reactividad de un radical con los compuestos presentes en los hielos.^[37] El trabajo más reciente de nuestro grupo en base a este mecanismo es la formación de etanol a partir de la reacción de CCH con una molécula de agua de los hielos seguido de hidrogenaciones.^[31] Las etapas propuestas son:

- 1) $\text{CCH} + \text{H}_2\text{O}_{(\text{hielo})} \rightarrow \text{CHCHO}$
- 2) $\text{CHCHO} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{CHOH}$ (alcohol vinílico)
- 3) $\text{CH}_2\text{CHOH} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3\text{CHOH}$
- 4) $\text{CH}_3\text{CHOH} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ (etanol)

Las etapas 1) y 3) presentan barreras de energía, mientras que la 2) y la 4) no (esto es, son espontáneas) debido a ser una reacción entre un átomo de H (un radical de libre difusión en las superficies de hielo) con otra especie radicalaria. Este mecanismo presenta algunas ventajas con respecto al acoplamiento radicalario: elimina la probabilidad del encuentro entre las especies reactivas y no presenta reacciones competitivas. No obstante, las reacciones siguen presentando barreras de energía.

En la Figura 3 se muestran los perfiles de reacción caracterizados para las etapas 1) y 3) cuando ocurren en una superficie de hielo descrita por 18 moléculas de agua (la mostrada en la Figura 1A).

La primera etapa (Figura 3A) tiene la particularidad que se forma un complejo semi-enlazado (*hemi-bonded*) estableciéndose un sistema de 2 centros – 3 electrones entre el C del CCH y el O del H_2O . A partir de este complejo se forma un intermedio de reacción (el CCH-OH_2) que evoluciona a HC-CHOH a partir de una transferencia de un protón del OH_2 al C terminal. Dicha transferencia es asistida por moléculas de agua del hielo, lo que reduce las barreras de reacción actuando el agua hielo como catalizador químico. Al añadir las correcciones de punto cero, las barreras desaparecen ya que los estados de transición se sumergen en energía con respecto a sus puntos estacionarios anteriores. La tercera etapa (Figura 3B) trata de la hidrogenación del alcohol viní-

lico y presenta una barrera de 7.4 kJ mol^{-1} . Aunque parezca una barrera muy baja, bajo condiciones interestelares ($T = 10\text{-}30\text{K}$) el proceso se ve inhibido cinéticamente desde una perspectiva clásica. No obstante, debido a las temperaturas extremadamente bajas y a que el átomo de H es uno de los reactivos, efectos cuánticos de túnel pueden tener un papel crucial en la reacción. Para tener una estimación de dicha relevancia, se ha calculado la que se denomina la temperatura de cruce (*crossover temperature*) por debajo de la cual el efecto túnel puede dominar la cinética de la reacción. Para esta etapa 3) de la reacción, la temperatura de cruce es de 118K con lo que estos efectos pueden permitir la evolución de la reacción y formar el CH_3CHOH , cuya posterior hidrogenación (etapa 4) lleva a la formación del etanol.

Conviene decir que el etanol es una molécula que recientemente se ha detectado en el medio interestelar, pero no como especie en fase gas sino como un componente minoritario de los hielos gracias a las medidas observacionales registradas por el Telescopio Espacial James Web (JWST) con su instrumentación de alta sensibilidad y resolución en espectroscopia de infrarrojo.^[62] Las simulaciones, pues, dan una posible explicación del porqué de la presencia de etanol en los hielos interestelares.

Simulaciones sobre superficies de hielo como tercer cuerpo

Hasta ahora se ha mostrado las propiedades de hielos interestelares como concentradores de reactivos y como catalizadores de reacciones. En este último apartado veremos cómo los hielos interestelares de agua pueden actuar como tercer cuerpo.

En la astroquímica de superficies, un tercer cuerpo se define como un material que es capaz de absorber la energía liberada en una reacción exotérmica, que permite la estabilización del producto formado. Dicho de otro modo, en ausencia del tercer cuerpo, el producto formado tiene toda la energía de reacción retenida como energía interna, la cual no puede disipar y que le lleva, consecuentemente, a la disociación. Dado que las reacciones del ISM son exotérmicas, el efecto del tercer cuerpo es de vital importancia.

En este apartado presentamos los resultados que evidencian la gran eficiencia de los hielos interestelares como tercer cuerpo utilizando la reacción de formación del H_2 , *i.e.*, $\text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2$.^[63] Las simulaciones se basan en dinámicas moleculares *ab initio* (AIMD) que se realizan bajo condiciones de colectivo microcanónico (N,V,E). Esto es porque al mantener la energía total del sistema constante se puede hacer un seguimiento de la evolución de las energías potencial y cinética a lo largo de las dinámicas, como también de las variaciones de temperatura debido a intercambios de energía entre la molécula formada y el grano de hielo. En este caso el modelo de superficie utilizado es el mostrado en la Figura 1B. Este modelo es muy grande, contiene 576 moléculas de agua. La necesidad de utilizar tal modelo estructural de hielo es en este caso imprescindible para asegurar una correcta disipación

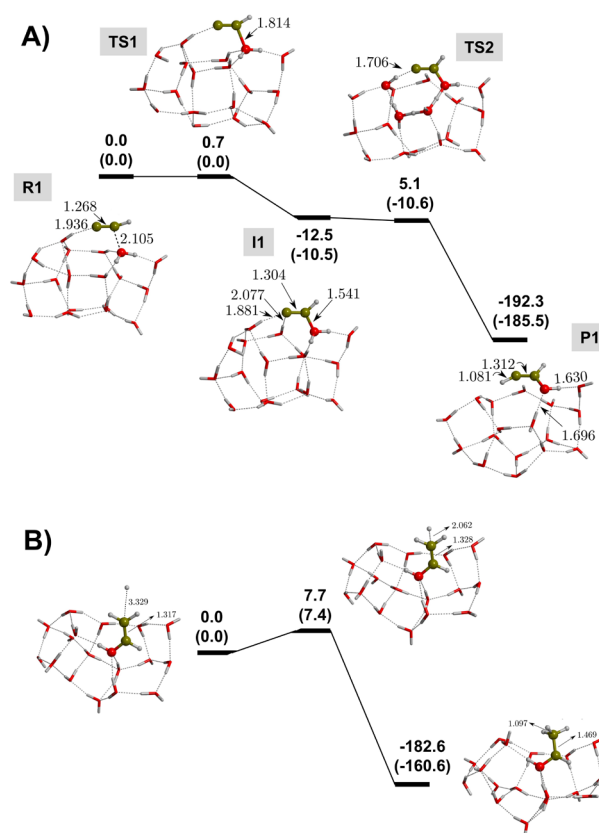


Figura 3. Perfiles de energía caracterizados para las etapas 1) y 3) en la reacción de formación de $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$. Energías relativas en kJ mol^{-1} . Valores sin paréntesis basados en energías potenciales; valores en paréntesis incluyendo la corrección de punto cero (ZPE). Distancias en Å .

de la energía de reacción en todo el hielo, que para el caso de la formación de H_2 es de -440 kJ mol^{-1} .

En la Figura 4A se presentan las estructuras de partida y final, y en la Figura 4B la evolución de las energías potencial y cinéticas (del H_2 formado y del hielo) durante el tiempo de la simulación (1 ps).

Como se puede ver, la energía de reacción se concentra inicialmente en el H_2 formado (hasta los 200 fs, ver energía cinética del H_2 , T_{H_2}), y entre los 200 y 800 fs parte de esta energía se transfiere al hielo (ver energía cinética del hielo, T_{hielo}) con un incremento de la T del hielo de 10 K a ca. 25 K . Al final de la dinámica se ha podido calcular que un 65% de la energía cinética total se ha transferido al hielo mientras que un 35% queda retenida por el H_2 . Este dato es importante porque significa que unos 150 kJ mol^{-1} se queda en forma de energía interna del H_2 . Teniendo en cuenta que la energía de adsorción del H_2 en la superficie de agua hielo es de unos 10 kJ mol^{-1} , significa que con mucha probabilidad el H_2 tiene suficiente energía cinética traslacional como para desorbirse de la superficie, siguiendo un proceso llamado desorción química. Por último, analizando las trayectorias, se puede ver que tiene lugar una reacción secundaria, esto es, la transferencia de un átomo de H del H_2 a una molécula de H_2O del hielo, formándose un par iónico del tipo $\text{H}/\text{H}_3\text{O}^+$ transitorio

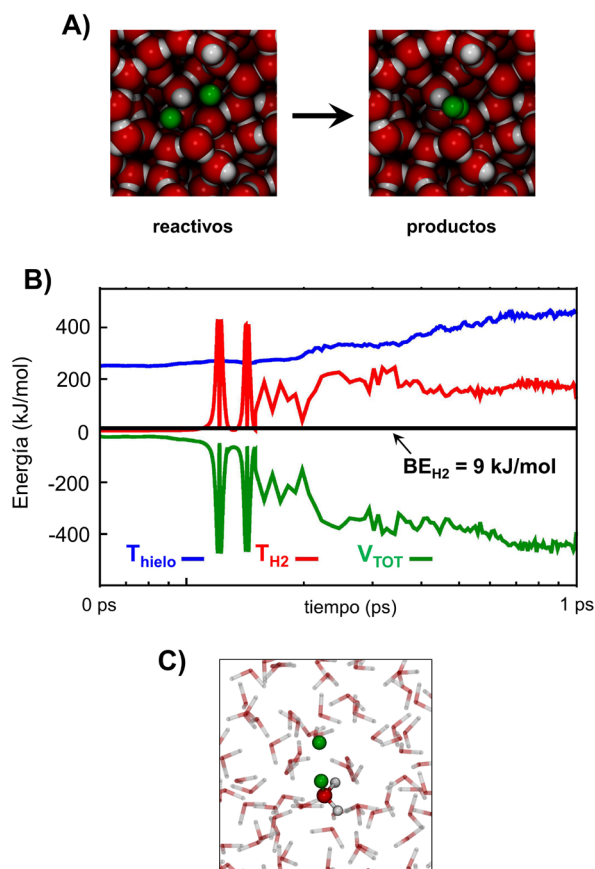


Figura 4. A) Estructuras inicial (reactivos) y final (productos) de la trayectoria asociada a la formación de H_2 encima de la superficie de agua hielo. B) Evolución de las energías potencial (V_{TOT} , línea verde) y cinéticas del hielo (T_{hielo} , línea azul) y del H_2 (T_{H_2} , línea roja) a lo largo de la AIMD. La energía de interacción del H_2 en valor absoluto ($BE_{H_2} = 9 \text{ kJ mol}^{-1}$) también se muestra como una línea negra continua (continúa a lo largo de la simulación para una mejor comparación con la variación de las energías cinéticas a lo largo de la trayectoria). C) Par iónico H/H_3O^+ que se forma transitoriamente durante la AIMD.

(ver Figura 4C). La formación de esta especie, que al cabo de algunos pasos de la AIMD revierte a H_2/H_2O , parece ser un canal muy eficiente en la disipación de la energía de reacción ya que va acompañada de una inyección súbita y grande de la energía del H_2 a la superficie.

Conclusiones

En la presente contribución se recogen algunos de los recientes estudios computacionales realizados en nuestro grupo sobre la modelización computacional de superficies de mantos de hielos como constituyentes principales de los granos de polvo interestelar y de los fenómenos de superficies relevantes que suceden en ellas; en particular, de la adsorción de moléculas de relevancia astroquímica, la reactividad para formar moléculas orgánicas complejas interestelares (iCOMs), y sobre la capacidad de los hielos de actuar como un tercer cuerpo. Los estudios proporcionan una visión molecular exclusiva de dichos fenómenos e información única, esto es, estructural,

energética y dinámica (a veces sin precedentes) de los mismos. Se muestra, además, que esta información permite extraer implicaciones astrofísicas que pueden ser de gran impacto en la comunidad astroquímica observacional y experimental.

Actualmente, las simulaciones basadas en métodos de la química cuántica en sistemas bien modelizados proporcionan una comprensión fundamental mediante una perspectiva molecular de sistemas y problemas de interés astroquímico. Obviamente, los escenarios son complejos (granos amorfos con una gran variabilidad estructural y composicional, temperaturas extremadamente bajas, incidencia de radiación UV e impacto de rayos cósmicos, participación de fenómenos cuánticos como el efecto túnel...) con lo que los fenómenos de superficies pueden verse afectados y alterados en función de los entornos astrofísicos. No obstante, las investigaciones que contienen una contribución computacional ofrecen claves importantes sobre las etapas elementales que suceden en las superficies de los granos, que conducen en última instancia a una evolución química en el espacio. Conviene mencionar, no obstante, que toda la información obtenida se sostiene por resultados teóricos basados en modelos simplificados (especialmente las superficies) y dependientes también de las limitaciones del nivel de cálculo, con lo que las interpretaciones deben considerarse con un punto de precaución. Para mitigar tanto como sea posible estos puntos débiles es altamente recomendable realizar, para cada sistema, estudios de calibración preliminares tanto del modelo de superficie como de la metodología cuántica a utilizar para tener una certeza sobre la precisión de los cálculos.

A pesar del gran trabajo que se está haciendo en el campo de la astroquímica computacional de superficies, todavía quedan retos que abordar. Uno sería dedicado a la química de superficies que vaya más allá de los hielos. En el espacio hay una gran cantidad de materiales refractarios (no volátiles) tales como los silicatos, sulfuros de hierro, óxidos metálicos, filosilicatos, aluminosilicatos, fosfatos, carbonatos, entre otros. Muchos de ellos se encuentran en la fase sólida de cometas, meteoritos y granos interplanetarios, los cuales, además, contienen una gran cantidad de materia orgánica (especialmente en meteoritos). Así pues, entender la química que ocurre en las superficies de todos estos materiales cósmicos, y relacionarla con su contenido molecular, es una línea de investigación de gran interés para la comunidad. Debido a la complejidad en la modelización de las superficies de estos sistemas sólidos (compuestos iónicos, muchos de los cuales con aniones poliatómicos) y la gran cantidad de compuestos orgánicos identificados, una buena estrategia sería desarrollar procesos de automatización de generación de estas superficies y de los sistemas superficie/molécula y sus interacciones, quizás con técnicas de aprendizaje supervisado (*machine learning*). Además, todos estos materiales pueden poseer propiedades catalíticas, con lo que sería de interés investigar si estos materiales cósmicos podrían ser catalizadores químicos que activen algunas de estas moléculas y promocionar transformaciones químicas, favoreciendo la evolución química y el incremento de la complejidad molecular. Todo ello, además, tendría cabida no solo en la química de las nubes del medio interestelar sino también en un sentido

más amplio del espacio, ya que todos estos procesos pueden ocurrir en atmósferas planetarias, incluyendo exoplanetas, y (como se ha comentado en la Introducción) en galaxias externas más allá de la vía láctea, dándole así un sentido muy transversal a la química del universo.

Agradecimientos

Los autores agradecen la financiación del proyecto QUANTUMGRAIN (GA #865657) por parte del ERC y del proyecto ACO (GA #811312) por parte del MSCA pertenecientes al programa de investigación e innovación Horizons 2020 de la Unión Europea.

Bibliografía

- [1] C. Cheung, D. M. Rank, C. H. Townes, D. D. Thornton, W. J. Welch, *Phys. Rev. Lett.* **1968**, *21*, 1701-1705.
- [2] E. F. van Dishoeck, *Faraday Discuss.* **2014**, *168*, 9-47.
- [3] A. G. G. M. Tielens, *Rev. Modern Phys.* **2013**, *85*, 1021-1081.
- [4] E. Herbst, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16*, 3344-3359.
- [5] B. A. J. a. e.-p. McGuire, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **2021**, *259*, 30.
- [6] T. Henning, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **2010**, *48*, 21-46.
- [7] A. P. Jones, M. Köhler, N. Ysard, M. Bocchio, L. J. A. Verstraete, *Astron. Astrophys.* **2017**, *602*, A46.
- [8] A. C. A. Boogert, P. A. Gerakines, D. C. B. Whittet, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **2015**, *53*, 541-581.
- [9] P. Caselli, C. Ceccarelli, *Astron. Astrophys. Rev.* **2012**, *20*, 1-68.
- [10] S. Kwok, *Astron. Astrophys. Rev.* **2016**, *24*, 8.
- [11] N. Kitadai, S. Maruyama, *Geosci. Frontiers* **2018**, *9*, 1117-1153.
- [12] C. Ceccarelli, P. Caselli, F. Fontani, et al., *Astrophys. J.* **2017**, *850*, 176.
- [13] C. Ceccarelli, C. Codella, N. Balucani, et al., **2022**, 13270, <https://arxiv.org/abs/2206>.
- [14] M. Ginolfi, L. Graziani, R. Schneider, S. Marassi, R. Valiante, F. Dell'Agli, P. Ventura, L. K. Hunt, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2017**, *473*, 4538-4543.
- [15] C. Ceccarelli, S. Viti, N. Balucani, V. Taquet, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2018**, *476*, 1371-1383.
- [16] G. Vidali, *Chem. Rev.* **2013**, *113* 8762-8782.
- [17] V. Wakelam, E. Bron, S. Cazaux, et al., *Mol. Astrophys.* **2017**, *9*, 1-36.
- [18] J. Navarro-Ruiz, M. Sodupe, P. Ugliengo, A. Rimola, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16*, 17447-17457.
- [19] J. Navarro-Ruiz, J. Á. Martínez-González, M. Sodupe, P. Ugliengo, A. Rimola, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2015**, *453*, 914-924.
- [20] J. Navarro-Ruiz, P. Ugliengo, M. Sodupe, A. Rimola, *Chem. Commun.* **2016**, *52*, 6873-6876.
- [21] E. F. van Dishoeck, E. Herbst, D. A. Neufeld, *Chem. Rev.* **2013**, *113*, 9043-9085.
- [22] G. Molpeceres, A. Rimola, C. Ceccarelli, J. Kästner, P. Ugliengo, B. Maté, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2019**, *482*, 5389-5400.
- [23] F. Dulieu, L. Amiaud, E. Congiu, J.-H. Fillion, E. Matar, A. Momeni, V. Pirronello, J. L. Lemaire, *Astron. Astrophys.* **2010**, *512*, A30.
- [24] S. Ioppolo, H. M. Cuppen, C. Romanzin, E. F. van Dishoeck, H. Linnartz, *Astrophys. J.* **2008**, *686*, 1474-1479.
- [25] Y. Oba, N. Watanabe, A. Kouchi, T. Hama, V. Pirronello, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, *13*, 15792-15797.
- [26] C. Romanzin, S. Ioppolo, H. M. Cuppen, E. F. v. Dishoeck, H. Linnartz, *J. Chem. Phys.* **2011**, *134*, 084504.
- [27] T. Hama, N. Watanabe, *Chem. Rev.* **2013**, *113*, 8783-8839.
- [28] N. Watanabe, A. Kouchi, *Progress Surf. Sci.* **2008**, *83*, 439-489.
- [29] N. Watanabe, A. Kouchi, *Astrophys. J.* **2002**, *571*, L173-L176.
- [30] A. Rimola, V. Taquet, P. Ugliengo, N. Balucani, C. Ceccarelli, *Astron. Astrophys.* **2014**, *572*, A70.
- [31] J. Ferrero, J. Enrique-Romero, B. Martínez-Bachs, C. Ceccarelli, N. Balucani, P. Ugliengo, A. Rimola, *ACS Earth Space Chem.* **2022**, *6*, 496-511.
- [32] E. Herbst, *Int. Rev. Phys. Chem.* **2017**, *36*, 287-331.
- [33] K. I. Öberg, *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 9631-9663.
- [34] H. Linnartz, S. Ioppolo, G. Fedoseev, *Int. Rev. Phys. Chem.* **2015**, *34*, 205-237.
- [35] L. Zamirri, P. Ugliengo, C. Ceccarelli, A. Rimola, *ACS Earth Space Chem.* **2019**, *3*, 1499-1523.
- [36] J. Enrique-Romero, A. Rimola, C. Ceccarelli, P. Ugliengo, N. Balucani, D. Skouteris, *ACS Earth Space Chem.* **2019**, *3*, 2158-2170.
- [37] A. Rimola, D. Skouteris, N. Balucani, C. Ceccarelli, J. Enrique-Romero, V. Taquet, P. Ugliengo, *ACS Earth Space Chem.* **2018**, *2*, 720-734.
- [38] J. Enrique-Romero, C. Ceccarelli, A. Rimola, D. Skouteris, N. Balucani, P. Ugliengo, *Astron. Astrophys.* **2021**, *655*, A9.
- [39] J. Enrique-Romero, A. Rimola, Ceccarelli, P. Ugliengo, N. Balucani, D. Skouteris, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **2022**, *259*, 39.
- [40] D. Bockelée-Morvan, N. Biver, *Phil. Trans. R. Soc. A* **2017**, *375*, 20160252.
- [41] S. Pizzarello, *Acc. Chem. Res.* **2006**, *39*, 231-237.
- [42] J. M. Trigo-Rodríguez, A. Rimola, S. Tanbakouei, V. C. Soto, M. Lee, *Space Sci. Rev.* **2019**, *215*, 18.
- [43] C. Le Guillou, S. Bernard, A. J. Brearley, L. Remusat, *Geochim. Cosmochim. Acta* **2014**, *131*, 368-392.
- [44] V. Vinogradoff, C. Le Guillou, S. Bernard, L. Binet, P. Cartigny, A. J. Brearley, L. Remusat, *Geochim. Cosmochim. Acta* **2017**, *212*, 234-252.
- [45] V. Vinogradoff, S. Bernard, C. Le Guillou, L. Remusat, *Icarus* **2018**, *305*, 358-370.
- [46] L. Rotelli, J. M. Trigo-Rodríguez, C. E. Moyano-Camero, E. Carota, L. Botta, E. Di Mauro, R. Saladino, *Sci. Rep.* **2016**, *6*, 38888.
- [47] V. Cabedo, J. Llorca, J. M. Trigo-Rodríguez, A. Rimola, *Astron. Astrophys.* **2021**, *650*, A160.
- [48] R. Santalucia, M. Pazzi, F. Bonino, M. Signorile, D. Scarano, P. Ugliengo, G. Spoto, L. Mino, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2022**, *24*, 7224-7230.
- [49] A. Rimola, S. Ferrero, A. Germain, M. Corno, P. Ugliengo, *Minerals* **2021**, *11*, 26.
- [50] M. P. Collings, V. L. Frankland, J. Lasne, D. Marchione, A. Rosu-Finsen, M. R. S. McCoustra, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2015**, *449*, 1826-1833.
- [51] M. P. Collings, M. A. Anderson, R. Chen, J. W. Dever, S. Viti, D. A. Williams, M. R. S. McCoustra, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2004**, *354*, 1133-1140.
- [52] R. T. Garrod, *Astrophys. J.* **2013**, *778*, 158.
- [53] H. J. Fraser, M. P. Collings, J. W. Dever, M. R. S. McCoustra, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2004**, *353*, 59-68.

- [54] M. Minissale, Y. Aikawa, E. Bergin, et al., *ACS Earth Space Chem.* **2022**, *6*, 597-630.
- [55] C. Bannwarth, S. Ehlert, S. Grimme, *J. Chem. Theory Comput.* **2019**, *15*, 1652-1671.
- [56] R. Dovesi, A. Erba, R. Orlando, et al., *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2018**, *8*, e1360.
- [57] S. Ferrero, L. Zamirri, C. Ceccarelli, A. Witzel, A. Rimola, P. Ugliengo, *Astrophys. J.* **2020**, 904, 11.
- [58] J. Perrero, J. Enrique-Romero, S. Ferrero, C. Ceccarelli, L. Podio, C. Codella, A. Rimola, P. Ugliengo, *Astrophys. J.* **2022**, 938, 158.
- [59] A. Rimola, M. Sodupe, P. Ugliengo, *Life* **2019**, *9*, 10.
- [60] J. Enrique-Romero, A. Rimola, C. Ceccarelli, N. Balucani, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2016**, 459, L6-L10.
- [61] J. Enrique-Romero, S. Álvarez-Barcia, F. J. Kolb, et al., *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2020**, 493, 2523-2527.
- [62] M. K. McClure, W. R. M. Rocha, K. M. Pontoppidan, et al., *Nature Astron.* **2023**.
- [63] S. Pantaleone, J. Enrique-Romero, C. Ceccarelli, S. Ferrero, N. Balucani, A. Rimola, P. Ugliengo, *Astrophys. J.* **2021**, 917, 49.



Dos destacados centros de investigación de la Universidad de Oviedo en la primera mitad del siglo XX

Juan M. D. Tascón 

HISTORIA DE LA QUÍMICA



Juan M. D. Tascón

Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono, (INCAR)-CSIC, F. Pintado Fe 26, 33011 Oviedo
C-e: tascon@incar.csic.es
Recibido: 13/10/2023
Aceptado: 08/11/2023
ORCID: 0000-0001-9219-7266

Resumen: Los Institutos del Carbón y de Química Aplicada de la Universidad de Oviedo fueron dos centros de investigación creados respectivamente en 1927 y 1933, siendo el segundo una ampliación del primero. Este artículo pretende poner de relieve el destacado nivel científico alcanzado por ambos centros, cuyos investigadores publicaron con frecuencia en medios internacionales. La variedad de trabajos realizados en el campo del carbón hace que pueda hablarse de la existencia de una actividad integral en torno a este combustible fósil, siendo especialmente destacados los resultados obtenidos en la hidrogenación del carbón en dispersión coloidal. Por otra parte, se llevaron a cabo estudios teóricos sobre la estructura de compuestos inorgánicos y experimentales sobre el desarrollo de métodos de análisis volumétrico con indicación potenciométrica del punto final, aprovechando la exaltación de las propiedades redox de determinados reactivos en medio alcalino. Las instalaciones del centro se vieron severamente afectadas en Octubre de 1934 y especialmente durante la Guerra Civil Española. Si bien en 1943 el centro se integró en el Patronato "Juan de la Cierva" del CSIC, no logró sobrevivir, desapareciendo su actividad a mediados de los años 40 del pasado siglo.

Palabras clave: Carbón mineral, Química Aplicada, Institutos de investigación, Universidad de Oviedo.

Abstract: The Institutes of Coal and Applied Chemistry of the University of Oviedo were two research centers created respectively in 1927 and 1933, the second being an expansion of the first. This article aims to highlight the outstanding scientific level achieved by both centers, whose researchers frequently published in international media. The variety of work carried out in the field of coal means that we can speak of the existence of a comprehensive activity around this fossil fuel, with the results obtained in the hydrogenation of coal in colloidal dispersion being especially notable. On the other hand, theoretical studies were carried out on the structure of inorganic compounds and experimental studies were carried out on the development of volumetric analysis methods with potentiometric indication of the end point, taking advantage of the exaltation of the redox properties of certain reagents in an alkaline medium. The center's facilities were severely affected in October 1934 and especially during the Spanish Civil War. Although in 1943 the center was integrated into the "Juan de la Cierva" Board of Trustees of the CSIC, it did not manage to survive, its activity disappearing in the mid-40s of the last century.

Keywords: Applied chemistry, Coal, Research institutes, University of Oviedo.

1. La Química en la Universidad de Oviedo en los inicios del siglo XX

El establecimiento de estudios continuados de Ciencias en la Universidad de Oviedo data de hace poco más de un siglo. La Ley Pidal, de 1845, asignó a la Universidad de Oviedo las facultades de Filosofía, Jurisprudencia y Teología, formándose en la primera de ellas una sección de Ciencias.¹ En 1857, la Ley Moyano dividió las facultades de Filosofía de las universidades españolas en facultades de Filosofía y Letras y de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales. Precisamente al amparo de la Ley Moyano se crea en 1857 en la Universidad de Oviedo una primera Facultad de Ciencias, que sería clausurada tan solo tres años después. Los posteriores intentos de establecer estudios continuados de estas materias

no cristalizarían hasta que en 1895 la Diputación Provincial de Asturias y el Ayuntamiento de Oviedo decidieron sostener económicamente la impartición de una licenciatura en Ciencias Físico-Matemáticas.² Nueve años después, el Estado se hizo cargo de sufragar estos estudios.³

En los años de inicios del siglo XX, Canella Secades⁴ preconizaba la importancia de los estudios de Química para la industria minera y metalúrgica asturiana. Pero aún hubo que esperar hasta 1913 para que se implantase en la Universidad de Oviedo la Sección de Químicas de la Facultad de Ciencias.⁵ Debió ser una época típica de creación de Secciones de Químicas en universidades españolas, porque Cano Pavón⁶ señala que en 1910 fue establecida la de Sevilla y en 1913 la de Granada.

La implantación de la licenciatura en Química hizo también necesaria la dotación en la Universidad de Oviedo de

nuevas cátedras, siendo convocadas en aquel mismo año de 1913 las de Química Orgánica⁷ y Química Inorgánica,⁸ que una vez cubiertas no tardarían en llevar a cabo labor investigadora en paralelo con la docente. En este artículo se presentan las actividades de dos institutos de la Universidad de Oviedo fundados a partir de dichas cátedras. Ambos centros desarrollaron una importante labor en los años 20 y 30 del pasado siglo, alcanzando como veremos un razonable nivel de publicación en medios internacionales. Sin embargo, con la única excepción de Bueno de las Heras,⁹ quien indicaba la existencia de “una cierta homologación internacional” al referirse a la actividad de la Sección de Químicas de Oviedo en la tercera década del pasado siglo, los autores de los escasos trabajos de tipo histórico existentes se han limitado por lo general a destacar la pobreza de medios de que se disponía y no tanto a examinar los resultados obtenidos. Creemos por ello justificado poner de relieve el nivel científico alcanzado por ambos centros de investigación. Por imperativos de espacio, este artículo se limita a presentar ejemplos seleccionados de la importante producción científica de uno y otro centro. En otros trabajos pendientes de publicación se desarrollará y discutirá en detalle dicha amplia y destacada producción científica.

2. El Instituto del Carbón de la Universidad de Oviedo

En su discurso de apertura del curso 1927-28 de la Universidad de Oviedo,¹⁰ Benito Álvarez-Buylla Lozana (1879-1941) (Fig. 1a), catedrático de Química Orgánica en dicha universidad, abogaba por la creación en la misma de un centro de investigación sobre el carbón mineral, exponiendo magistralmente su concepto del estado de conocimientos y perspectivas en las investigaciones sobre dicho combustible fósil. La biografía de Álvarez-Buylla ha sido desarrollada anteriormente por diferentes autores como Arribas Jimeno,¹¹ Martínez y Lastra¹² y Díaz González¹³ y, mucho más detalladamente, por su nieto Plácido Prada Álvarez-Buylla¹⁴, por lo que nos limitaremos a mencionar aspectos de su vida que fueron relevantes para su actividad científica. Álvarez-Buylla se licenció en 1902 en Ciencias, Sección de Fisicoquímicas, por la Universidad Central (hoy Complutense de Madrid). En ese mismo año se trasladó a hacer el doctorado a la Universidad de Bolonia (Italia), donde sería discípulo del famoso fotoquímico Giacomo Luigi Ciamician. En 1917, Álvarez-Buylla consigue por oposición la cátedra de Química Orgánica de la Universidad de Oviedo,¹⁵ que desempeñaría hasta su fallecimiento en 1941 (salvo una interrupción en 1937-40 debida a un expediente de depuración).

En el texto de su discurso de 1927 antes citado, el autor identificaba los centros nacionales de investigación sobre carbón existentes en diferentes países, invitando a la creación de uno equivalente en España, y concretamente en Oviedo, para el que incluso proponía normas concretas de funcionamiento. También exponía su visión del estado de conocimientos sobre el origen y constitución del carbón, así como los fundamentos de los principales procesos de utilización del mismo, todo ello con profusión de datos bibliográficos. Su propuesta tuvo



Figura 1. Fotografías, como profesores, de Benito Álvarez-Buylla Lozana (a), José Manuel Pertierra Pertierra (b), Carlos del Fresno Pérez del Villar (c) y María del Rosario Álvarez-Buylla Álvarez (d). Tomadas de orlas de las promociones de 1941, 1940, 1947 y 1947, respectivamente.

un resultado inmediato. Inicialmente la Diputación Provincial de Asturias, el Ayuntamiento de Oviedo y algunas empresas aportaron sumas de dinero con las que hacer frente a los gastos del centro. Pero es bien conocido que pocos años después las subvenciones al Instituto del Carbón cayeron drásticamente, por lo que tuvo que sobrevivir largo tiempo sin recibir prácticamente ayuda ni de las autoridades regionales, ni de las estatales, ni de las empresas.

Para Álvarez-Buylla, trabajar sobre carbón representaba un gran cambio con respecto a su anterior investigación en síntesis orgánica con magnesianos. En el primer trabajo que hemos identificado como realizado en el Instituto del Carbón de la Universidad de Oviedo, Álvarez-Buylla y Pertierra¹⁶ estudiaron la reacción entre los componentes del *gas de agua*, hoy conocida como síntesis de Fischer-Tropsch. Esta había sido descubierta tan solo tres años antes¹⁷ y representaba un método indirecto de transformación de carbones en combustibles líquidos. Operando a baja temperatura (254 °C), los autores consiguieron mejorar el rendimiento en hidrocarburos con respecto al hasta entonces informado en la bibliografía.

El coautor del anterior trabajo y colaborador más prolífico de Álvarez-Buylla, José Manuel Pertierra Pertierra (1903-2002) (Fig. 1b), se licenció en Ciencias Químicas por la Universidad de Oviedo en 1925 y llevó a cabo en dicha universidad su tesis doctoral, titulada “Hidrogenación de un carbón”. Esta tesis fue defendida en la Universidad Central en 1930 y sería publicada diez años después por el Instituto del Carbón de la Universidad de Oviedo. La Figura 2 muestra la portada de esa edición de 1940 de la tesis.¹⁸ Siguien-

do los trabajos desarrollados por Friedrich Bergius sobre la conversión directa de carbones en combustibles líquidos,¹⁹ Pertierra investigó la hidrogenación de una hulla de gas procedente del pozo "María Luisa" (*Sociedad Duro-Felguera*), estudiando los efectos de la temperatura, la presión y el tiempo sobre el rendimiento en productos líquidos; el autoclave utilizado por Pertierra podía operar a 450-470 °C y 260-300 atmósferas. En uno de los tres artículos derivados de su tesis, relativo a los productos líquidos de la hidrogenación del carbón,²⁰ Pertierra concluyó que los porcentajes de compuestos fenólicos (fenol, *o*- y *m*-cresoles, catecol) y básicos (piridina, 2,4-lutidina) eran mayores que en el alquitrán primario del correspondiente carbón.

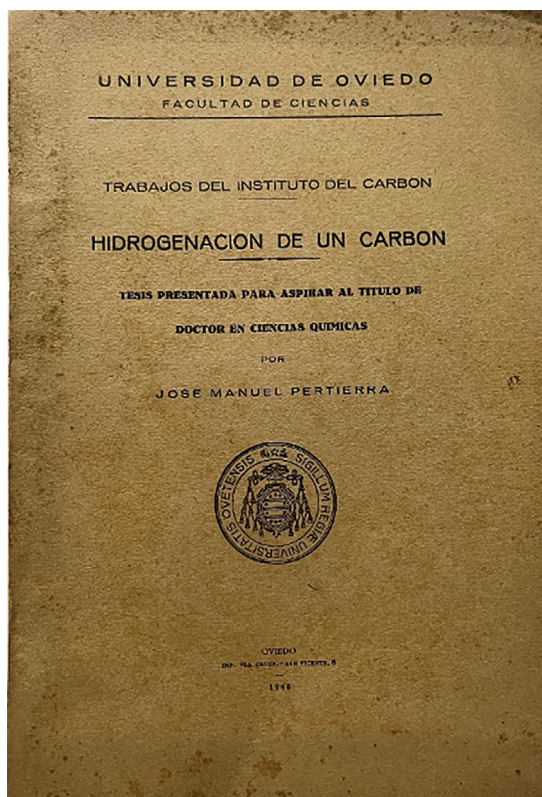


Figura 2. Portada de la tesis doctoral de José Manuel Pertierra Pertierra. Adaptada y reproducida de la ref. 18.

Entretanto, Álvarez-Buylla investigaba sobre la pirólisis de carbones asturianos. Los estudios a baja temperatura a escala de laboratorio (ensayos Gray-King y Fischer-Schrader) mostraron un comportamiento óptimo para un carbón procedente de Mieres, obteniéndose una baja proporción de fenoles;²¹ un estudio posterior a escala semi-industrial con el mismo carbón reveló una concordancia razonable con los resultados obtenidos en el laboratorio.

La *Third International Conference on Bituminous Coal*, celebrada en Pittsburgh en 1931, fue el escenario elegido por Pertierra para presentar a la comunidad científica sus hallazgos en el campo de la extracción de una hulla típica de coque (con un 24,3% de materias volátiles) mediante anilina,

piridina, quinoleína y alquitrán de baja temperatura.²² De este modo consiguió disolver entre el 80 y el 92% en peso del carbón, cifra muy superior a las obtenidas hasta aquella fecha por otros investigadores, y comprobó por microscopía la existencia en los extractos de micelas y de movimiento browniano. El autor hipotetizaba que en el proceso de hidrogenación el disolvente inicia su acción dispersando parte del carbón en forma de coloide, lo que debería facilitar mucho su reacción con el hidrógeno.²³

Posteriormente, Pertierra avanzó en el estudio de la dispersión coloidal utilizando lignito en lugar de hulla.²⁴ El grado de solubilización total conseguido con el lignito "Gualdo Cataneo" fue atribuido al efecto combinado del catalizador utilizado y las condiciones de operación del reactor. Estos experimentos fueron realizados en 1933 en el *Instituto de Química Industrial*, de la *Real Escuela de Ingeniería de Milán*, donde Pertierra se trasladó para trabajar con M.G. Levi.

Otro trabajo de Pertierra de la misma época²⁵ profundizó en el estudio de la acción de diferentes productos (alquitrán primario industrial, fenol, aceite de antraceno, fueloil de petróleo) como disolventes del carbón para la preparación de las suspensiones coloidales. En este caso se alcanzaron rendimientos de solubilización de hasta el 94,7%, (este último, utilizando aceite de antraceno). Paradójicamente, algunas publicaciones de Pertierra de esa época en medios internacionales^{26, 27} representan esencialmente "variaciones sobre el mismo tema", ya que por lo general ensayaron diferentes condiciones de operación y/o disolventes alternativos o mezclas de los mismos (por ejemplo, fenol-tetralina)^{28, 29} como contribuciones a reforzar la idea de la existencia de carbón en forma de dispersión coloidal bajo las condiciones propias de la hidrogenación a presión, y por supuesto, sus efectos beneficiosos para la denominada *berginización* del carbón.

3. El Instituto de Química Aplicada de la Universidad de Oviedo. La Sección de Metalurgia

En 1933 se decidió aunar los esfuerzos investigadores del Instituto del Carbón con los de la Cátedra de Química Inorgánica de la Universidad de Oviedo, creándose el Instituto de Química Aplicada que englobaba entre otras a las dos instituciones anteriores. Este tuvo un pormenorizado estatuto³⁰ en el que se indicaba que el nuevo centro constaría de dos secciones a las no se asignaban nombres concretos; documentos posteriores muestran que se denominaron de Combustibles y de Metalurgia. En 1934 se añadió una tercera sección denominada de Tecnología General, cuyo director era Ramón de Izaguirre Porset (1899-1952), nombrado muy poco antes catedrático de "Química Teórica o Física" de la Universidad de Oviedo y que llegaba precedido de una singular labor investigadora en química de superficies y coloides.^{31, 32, 33, 34} Quizá debido a su incorporación muy próxima a los grandes destrozos en la Universidad de Oviedo de los que hablaremos más adelante, esta tercera sección fue mucho menos productiva que las otras dos.³⁵ En la postguerra, de Izaguirre

desarrollaría actividades tanto de gestión universitaria como industriales.³⁶

Iniciamos el examen de las actividades del Instituto de Química Aplicada presentando de manera muy condensada la labor previa de la Cátedra de Química Inorgánica de la Universidad de Oviedo, que en 1933 no partía ni mucho menos de cero sino que existía en ella labor investigadora prácticamente desde el nombramiento en 1916 del primer catedrático de esta materia en dicha universidad,³⁷ Emilio Jimeno Gil (1886-1976), cuya biografía ha sido desarrollada por Calvo.³⁸ Jimeno Gil permanecería en la Universidad de Oviedo hasta 1924, iniciando una línea de trabajo sobre metalografía.³⁹ Su discípulo más destacado en Oviedo fue Carlos del Fresno Pérez del Villar (1897-1958) (Fig. 1c), quien en 1929 le sucedería en la cátedra. Licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de Oviedo en 1917, obtuvo el grado de doctor por la Universidad Central en 1923 mediante una tesis dedicada al estudio por metalografía de la micro- y macroestructura de soldaduras en carriles de tranvías.

Del Fresno publicó en los *Anales* y en revistas alemanas varios artículos de tipo teórico sobre la estructura de compuestos inorgánicos, por ejemplo sobre la relación entre volumen atómico y número atómico⁴⁰ o la energética de la formación del compuesto $\text{HCl} \cdot \text{HBr}$.⁴¹ En un trabajo general sobre los cambios de volumen en la formación de compuestos binarios⁴² el autor presentaba conclusiones globales para las tendencias en haluros/hidruros, óxidos y sulfuros.

Sin embargo, la mayor parte de la producción científica de del Fresno fue de tipo electroquímico, consecuencia de una fructífera estancia que realizó con E. Müller en el Laboratorio de Electroquímica de la *Technische Hochschule* de Dresde (Alemania). En 1925 aparecen sus primeros artículos sobre valoraciones potenciométricas de permanganato con oxalato y de halógenos con ferrocianuro [hexacianoferrato (III)]. En 1929, del Fresno y Valdés desarrollaron métodos de valoración potenciométrica con ferricianuro [hexacianoferrato (III)] de calcio en disolución alcalina. Los aplicaron primeramente a la determinación de vanadio e hidrosulfito (ditionito)⁴³ y a continuación a los elementos As, Sb, Sn y Tl.⁴⁴

Los artículos que vienen a continuación fueron publicados una vez integrado el grupo de del Fresno en el Instituto de Química Aplicada de la Universidad de Oviedo. Un conjunto de trabajos, todos ellos firmados por del Fresno y Mairlot, tienen en común el desarrollo de métodos de valoración potenciométrica en disolución alcalina con sulfato de vanadilo. Aplicaron este compuesto como reactivo para la determinación de cromatos,⁴⁵ oro,⁴⁶ cromato y ferricianuro (valoración simultánea)⁴⁷ y cobre y plata.⁴⁸ Un largo artículo⁴⁹ de 1933 compendia este conjunto de trabajos sobre potenciometrías. El modo operatorio involucraba el uso de una vasija de valoración cerrada y con atmósfera inerte (Fig. 3) donde se colocaban la sustancia a valorar y el agente alcalinizante. De este modo, la disolución generada de V(IV) en medio alcalino no entraba nunca en contacto con el aire; sin embargo, la disolución ácida de VOSO_4 , estable al aire, no precisaba de especiales precauciones para su manejo.

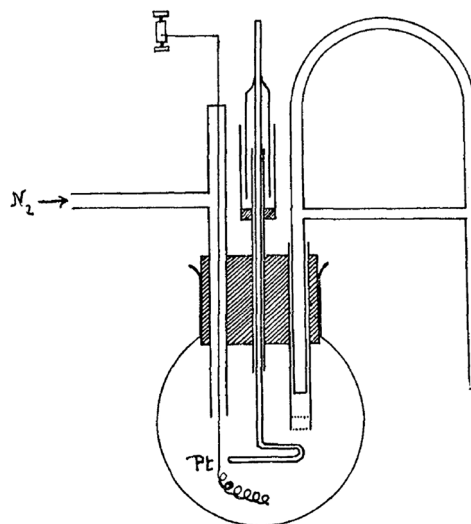


Figura 3. Matraz de reacción para las valoraciones potenciométricas con VOSO_4 en medio fuertemente alcalino. Adaptada y reproducida de la ref. 49.

Muestra de la actividad internacional de del Fresno son su informe, conjuntamente con Giral,⁵⁰ sobre la VIII Conferencia de la IUPAC celebrada en Varsovia y el hecho de ser invitado en 1933 a ser uno de los pocos científicos españoles asistentes a una reunión (celebrada en Santander) preparatoria de la IX Conferencia de la IUPAC, que tendría lugar al año siguiente en Madrid con considerable éxito.⁵¹ La reunión de Santander fue la primera conferencia científica celebrada en La Magdalena y contó con la asistencia de dos premios Nobel, Fritz Haber y Richard Willstätter.⁵²

La Universidad de Oviedo sufrió dos destrucciones sucesivas en la Revolución de Octubre de 1934 y durante la Guerra Civil. Debido a su lugar de ubicación en el hoy denominado *Edificio Histórico* (en la zona donde actualmente se encuentra el Paraninfo), las cátedras de Química Inorgánica y Química Orgánica sufrieron los efectos de un incendio ocurrido el 13 de octubre de 1934, pero no así todas las instalaciones del Instituto de Química Aplicada, como veremos en la Sección 4 de este trabajo. En cuanto a los medios humanos, Carlos del Fresno fue expedientado en 1937 y en 1940 sufrió un traslado forzoso a la Universidad de Murcia, permitiéndosele volver a la de Oviedo en 1941. Estos hechos tuvieron lógicamente una muy negativa repercusión sobre la actividad científica del Instituto.

Al inicio de la postguerra, el sistema económico de austeridad imperante en España generaba una acuciante necesidad de desarrollar tecnología propia, lo que hizo que se potenciara la investigación de carácter aplicado,⁵³ especialmente en Tecnología Química.⁵⁴ Debido a ello, los pocos centros españoles que trabajaban en este último campo fueron invitados a integrarse total o parcialmente en la división de carácter tecnológico del CSIC, el Patronato "Juan de la Cierva" (PJC). El Instituto de Química Aplicada de la Universidad de Oviedo lo haría totalmente en 1943,⁵⁵ (aunque por poco tiempo, como veremos al final de la Sección 4) teniendo una efímera recuperación bajo la dirección de José María

Fernández-Ladreda Menéndez-Valdés (1885-1954), quien había hecho la carrera militar en Artillería además de ser licenciado (1924) y doctor (1928) en Ciencias Químicas. En 1943 es nombrado catedrático de Química Orgánica de la Universidad de Oviedo, a donde se trasladó desde la Universidad de Sevilla precisamente al objeto de dirigir el Instituto de Química Aplicada. Fernández-Ladreda poseía amplia experiencia investigadora en materiales metálicos como cobre y latón, adquirida primero en el *Laboratorio de Investigaciones Físicas*, de Madrid⁵⁶ y después en la *Fábrica de Metales de Lugones*, de la *Sociedad Industrial Asturiana*.^{57,58}

La Memoria del CSIC de 1944⁵⁹ indica que en el laboratorio de Metalurgia del Instituto de Química Aplicada existían en ese año dos temáticas de trabajo sobre flotación de minerales y potenciometrías. En la primera línea, del Fresno y Arias Fernández⁶⁰ estudiaron la flotación de minerales complejos procedentes de dos minas situadas en Villamanín (León) y Cabrales (Asturias), concluyendo que era posible mediante flotación enriquecer la mena en los metales de mayor valor (Co, Cu y Ni). El trabajo sobre potenciometrías, cuyos autores eran del Fresno y Álvarez Piquero,⁶¹ derivado de otro publicado seis años antes sobre la valoración de mercurio con sulfato de vanadilo,⁶² aprovechaba el fuerte carácter oxidante en medio alcalino del tetrayodomercuriato de potasio, $K_2[HgI_4]$ para producir la oxidación cuantitativa de compuestos de As(III) y Sb(III). Los autores consideraron los resultados como satisfactorios (errores del orden del 1%). Estos trabajos de 1944 son los últimos que hemos identificado donde figure la filiación del Instituto de Química Aplicada, siendo también las últimas publicaciones que hemos detectado de del Fresno, quien no obstante permanecería en activo como catedrático hasta su fallecimiento en 1958.

4. La Sección de Combustibles del Instituto de Química Aplicada

En la época de creación del Instituto de Química Aplicada (1933) Álvarez-Buylla y Pertierra trabajaban en la síntesis de moléculas orgánicas oxigenadas (anhídrido ftálico) por oxidación parcial de derivados del carbón (naftaleno, *o*-xileno), utilizando para ello un catalizador selectivo (V_2O_5) que no llevase a la oxidación total.⁶³ Pertierra también investigó en esos años en el campo de la coquización, que abordó en un primer estudio⁶⁴ sobre las propiedades de un carbón (del pozo "San Pedro", de *Hulleras del Turón*) que determinaban la obtención a partir del mismo de coque de buena calidad; concluía que, entre los litotipos, el vitreno poseía las mejores propiedades coquizantes, ocurriendo lo contrario con el fuseno. Varios años después, el mismo autor⁶⁵ amplió la investigación de carbones para coque de la misma empresa utilizando una mayor variedad de muestras y deduciendo que, mediante mezclas apropiadas y aplicando el análisis petrográfico, sería posible el mejoramiento de la resistencia mecánica y reactividad del coque.

María del Rosario Álvarez-Buylla Álvarez (Fig. 1d), hija y colaboradora de B. Álvarez-Buylla, publicó, sin coautor,

dos trabajos que se separan considerablemente de la tónica del resto de los producidos por esta sección. En uno de ellos, sobre la aplicación de los rayos X a los combustibles sólidos,⁶⁶ comparaba las radiografías obtenidas con carbones con distinto contenido en materia mineral, infiriendo la aplicabilidad de la técnica a la depuración de carbones. En el otro trabajo la autora determinó las concentraciones de arsénico presentes en seis hullas de Asturias y dos lignitos de Galicia utilizando una técnica colorimétrica.⁶⁷ Los resultados mostraron concentraciones entre 8,5 y 43,5 μg de As por g de carbón. Es importante señalar la excelente concordancia con el intervalo de concentraciones de As en carbones aceptado actualmente: entre 0,5 y 80 $\mu\text{g/g}$ de carbón.^{68,69}

Tal como lo señalamos anteriormente para la Sección de Metalurgia, la cátedra de Química Orgánica de la Universidad de Oviedo fue destruida por un devastador incendio ocurrido en octubre de 1934, pero no así todas las instalaciones del Instituto de Química Aplicada. En este contexto es muy informativo un testimonio de Pertierra,⁷⁰ que indica que la destrucción de la Universidad de Oviedo en 1934 había dejado a salvo el llamado *Pabellón de Ciencias* y algunos instrumentos (instalación de altas presiones, equipo para la síntesis de metanol)⁷¹ que se encontraban situados en precario en un modesto tendejón en los jardines de la Universidad. Pero solo sobrevivirían durante dos años, ya que, como es bien conocido, la Guerra Civil arrasó todas las instalaciones de la Universidad de Oviedo. En cuanto a los medios humanos, Álvarez-Buylla fue expedientado y separado del servicio como catedrático en 1937, no siendo reintegrado hasta 1940. Este hecho y su casi inmediato fallecimiento en 1941 afectarían profundamente al Instituto de Química Aplicada añadiéndose a la destrucción de sus medios materiales.

En uno de los artículos sobre combustibles que realizó en la postguerra, Pertierra⁷² estudió muestras de carbón de diferentes minas de la *Sociedad Duro-Felguera*. El trabajo incluyó la medida de curvas de lavabilidad, propiedades plásticas y estudios de pirólisis a baja temperatura (550 °C) y del alquitrán primario, incluyendo el fraccionamiento de éste. Pertierra también investigaría en este período acerca del papel de la presión interna de los líquidos disolventes del carbón en el proceso de dispersión del mismo.⁷³ Con ello buscaba reforzar su hipótesis sobre la solubilización del carbón como prerequisite para disponer de una mayor superficie para la reacción con el hidrógeno en el proceso Bergius.

En su discurso de apertura del curso académico 1943-44 de la Universidad de Oviedo,⁷⁴ Lucas Rodríguez Pire, entonces decano de la Facultad de Ciencias, hizo propuestas sobre aquello que se debería potenciar en el Instituto de Química Aplicada. Lamentablemente, sus sugerencias no servirían de mucho ya que en 1945 el director de este instituto, Fernández-Ladreda, fue nombrado casi simultáneamente catedrático de Química Industrial de la Universidad de Madrid y ministro de Obras Públicas. Su marcha a Madrid debió dar al traste con la tarea investigadora de este instituto, que nunca más volvió a figurar en las memorias del CSIC o del PJC.

Por otra parte, en 1941 Pertierra fue nombrado catedrático de la Universidad de Santiago de Compostela, trasladándose de allí a Barcelona en 1948 y no volviendo a

Oviedo hasta 1952. Parece que el alejamiento temporal de la Universidad de Oviedo produjo cambios en sus intereses científicos, ya que a partir de entonces publicaría comparativamente poco sobre carbones. En el campo más general de la Química Orgánica, Pertierra promovería estudios sobre la obtención de éteres vinílicos por oxidación de alquenos o alquinos con peróxido de benzoilo catalizada por yodo.⁷⁵ De acuerdo con las memorias del PJC de 1956, 1957 y 1958, nuestro autor dirigió esos trabajos en el marco del PJC, pero en esas tres memorias ya no se menciona en ningún caso el nombre del Instituto de Química Aplicada. Otros temas de trabajo de Pertierra serían tan variados (y, paradójicamente, tan poco químico-orgánicos) como la producción de alúmina,⁷⁶ la conservación del suelo,⁷⁷ el análisis de silicatos⁷⁸ o la química de los gases nobles.⁷⁹

5. Conclusiones

Los dos institutos presentados en este artículo realizaron una importante labor en los años 20 y 30 del pasado siglo. En cuanto al trabajo de Álvarez-Buylla, Pertierra y colaboradores, además de los estudios sobre la síntesis de Fischer-Tropsch o la pirólisis de carbones a baja temperatura el resultado más destacado fue probablemente la hidrogenación en dispersión coloidal, que preservaba la estructura aromática del carbón con lo que se obtenían hidrocarburos líquidos con componentes aromáticos, que presentaban ventajas (mayor poder antidetonante) sobre las gasolinas convencionales. Incluso una autoridad como Vian Ortuño⁸⁰ tuvo palabras elogiosas para esa idea que calificaba de brillante. La labor realizada cubrió un abanico muy amplio de temas, ya que en la época del Instituto de Química Aplicada también se investigó sobre coquización y depuración de carbones, además del trabajo de M^o del Rosario Álvarez-Buylla sobre un elemento traza en carbones, el arsénico. La labor de uno y otro instituto puede por tanto ser calificada de “integral” en torno al carbón.

La línea de trabajo sobre metalografía iniciada en Oviedo por Emilio Jimeno fue objeto del trabajo inicial de del Fresno; sin embargo, sus intereses científicos se fueron pronto por otros derroteros. Por una parte, llevó a cabo estudios teóricos sobre la estructura molecular de diferentes tipos de compuestos inorgánicos. Por otra, desarrolló numerosos métodos de análisis volumétrico en los que hacía uso de la potenciometría para establecer el punto final de la valoración. Destacan entre esos trabajos los basados en reacciones redox en medio fuertemente alcalino, en el que se exaltaba el poder oxidante o reductor de determinados reactivos. El examen de su trayectoria científica muestra que del Fresno publicaba regularmente en revistas alemanas bien establecidas en su campo. Paralelamente, el alemán era entonces la *lingua franca* para la Química, con lo que esas revistas tendrían un elevado impacto. Por su parte, Pertierra publicó en conocidas revistas británicas especializadas en combustibles.

Los anteriores datos muestran el alto nivel científico de los trabajos realizados relativo al momento en que existieron ambos institutos. Lamentablemente, los destrozos producidos durante la Revolución de Octubre de 1934 y la Guerra Civil

Española representaron obstáculos insalvables para la continuación de la labor del Instituto de Química Aplicada. A esa destrucción vendrían a añadirse las consecuencias de la depuración (Álvarez-Buylla, del Fresno), el fallecimiento (Álvarez-Buylla) y los traslados a otros destinos de determinados profesores (del Fresno, Fernández-Ladreda, Pertierra). Por unas y otras razones, el centro no pudo sobrevivir, ni siquiera mediante integración en el PJC del CSIC, terminando su actividad a mediados de los años 40 del pasado siglo.

Agradecimientos

El autor agradece la ayuda económica (subvención IDI/2021/000037) recibida conjuntamente del Gobierno del Principado de Asturias y el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (ERDF/FEDER), así como el apoyo para conseguir material bibliográfico recibido del bibliotecario del INCAR-CSIC, D. Luis Gutiérrez Fernández-Tresguerres.

Referencias

- [1] M. Gutiérrez Claverol, L.M. Rodríguez Terente, Vicisitudes históricas del Museo de Geología de la Universidad de Oviedo, *Trab. Geol.* **2005**, *25*, 27-49.
- [2] Gaceta de Madrid del 20 de julio de 1895, p. 263.
- [3] Gaceta de Madrid del 3 de enero de 1904, p. 36.
- [4] F. Canella Secades, *Historia de la Universidad de Oviedo y noticias de los establecimientos de enseñanza de su distrito (Asturias y León)*, Imprenta de Flórez, Gusano y Compañía, 1903 (Reedición facsímil, Universidad de Oviedo, 1985), pp. 196-197; 215-216; 602-603.
- [5] Gaceta de Madrid del 16 de enero de 1913, p. 138.
- [6] J.M. Cano Pavón, La investigación química en Granada en el siglo actual (1900-1975), *DYNAMIS* **1996**, *16*, 317-367.
- [7] Gaceta de Madrid del 14 de agosto de 1913, pp. 398-399.
- [8] Gaceta de Madrid del 14 de agosto de 1913, p. 399.
- [9] J.L. Bueno de las Heras, Breve historia de la Facultad de Química (Discurso de clausura de los Actos Académicos), en *Inauguración oficial del nuevo edificio de la Facultad de Química*, Servicio de Publicaciones de la Universidad de Oviedo, Oviedo, 1989, pp. 119-128.
- [10] B. Buylla, El problema del carbón, *Discurso leído en la solemne apertura del curso académico de 1927-28*, Universidad de Oviedo, Tipografía de Flórez, Gusano y Compañía, Oviedo, 1927.
- [11] S. Arribas Jimeno, *La Facultad de Ciencias de la Universidad de Oviedo (estudio histórico)*, Gráficas Summa, Oviedo, 1984, pp. 28-29.
- [12] J.L. Martínez, C. Lastra, Historia de la enseñanza de las Ciencias Biológicas en la Universidad de Oviedo (hasta 1968), *Revista de la Facultad de Ciencias. Nueva Serie* **1978**, *17/18/19*, 1-36.
- [13] T.E. Díaz González, Las enseñanzas científicas en la Universidad de Oviedo en el siglo XIX. Fechas clave en el desarrollo de las ciencias en la Universidad de Oviedo, en *Tradición de Futuro. Exposición Cuatro Siglos de Historia de la Universidad*, Universidad de Oviedo, Gráficas Summa, Oviedo, 2008, pp. 312-313.

- [14] P. Prada Álvarez-Buylla, *Vida de Benito Álvarez-Buylla Lozana: "Silvio Itálico"*, Real Instituto de Estudios Asturianos, Oviedo, 2003.
- [15] Gaceta de Madrid del 14 de febrero de 1917, p. 384.
- [16] B.A. Buylla, J.M. Pertierra, Síntesis de altos hidrocarburos con gas de agua, *An. Real Soc. Esp. Fís. Quím., Secc. Téc.* **1929**, 2, 23-38.
- [17] F. Fischer, Liquid fuels from water gas, *Ind. Eng. Chem.* **1925**, 17, 574-576.
- [18] J.M. Pertierra, Hidrogenación de un carbón, Tesis doctoral, Trabajos del Instituto del Carbón, Universidad de Oviedo, Facultad de Ciencias, Imp. "La Cruz", Oviedo, 1940.
- [19] F. Bergius, Neue Methode zur Verarbeitung von Mineralöl und Kohle, *Z. angew. Chem.* **1921**, 34, 341-347.
- [20] J.M. Pertierra, Estudio de los productos líquidos de la berginización de un carbón, *An. Real Soc. Esp. Fís. Quím.* **1930**, 28, 792-805.
- [21] B.A. Buylla, Estudios acerca de los carbones asturianos.- I. Destilación a baja temperatura de un cannelcoal de Mieres (Asturias), *An. Real Soc. Esp. Fís. Quím., Secc. Téc.* **1929**, 2: 195-218.
- [22] J.M. Pertierra, The colloidal solution of coal, en *Proceedings of the Third International Conference on Bituminous Coal*, Pittsburgh. Carnegie Institute of Technology, Vol. II, pp. 13-16, 1931.
- [23] J.M. Pertierra, La dispersión coloidal del carbón, *An. Real Soc. Esp. Fís. Quím.* **1931**, 29, 663-679.
- [24] J.M. Pertierra, Disolución coloidal e hidrogenación de un lignito, *An. Real Soc. Esp. Fís. Quím.* **1933**, 31, 779-809.
- [25] J.M. Pertierra, La disolución coloidal de carbón, *An. Real Soc. Esp. Fís. Quím.* **1933**, 31, 271-288.
- [26] J.M. Pertierra, The Colloidal Solution of Coal, *Fuel in Science and Practice* **1934**, 13(1), 23-26.
- [27] J.M. Pertierra, Research on the Hydrogenation of a Colloidal Solution of Coal, *J. Inst. Fuel* **1935**, 9 (October), 16-23.
- [28] J.M. Pertierra, La disolución coloidal del carbón y su hidrogenación, *IXème Congrès International de Chimie Pure et Appliquée. Programme Scientifique*, C. Bermejo, Impresor, Madrid, 1934, p. 95.
- [29] J.M. Pertierra, Die kolloidale Lösung der Kohle un ihre Hydrierung, *Brennstoff-Chemie* **1934**, 15, 211.
- [30] Gaceta de Madrid del 24 de diciembre de 1933, pp. 2132-2134.
- [31] Wo. Ostwald, R. de Izaguirre, Ueber eine allgemeinere Theorie der Adsorption von Lösungen, *Koll.-Zeits.* **1922**, 30, 279-306.
- [32] J.M.D. Tascón, La teoría de Ostwald-de Izaguirre sobre adsorción en disolución. Parte 1. Génesis y presentación de la teoría, *An. Quím.* **2013**, 109, 193-200.
- [33] J.M.D. Tascón, Impact and repercussions of the Ostwald-de Izaguirre theory for adsorption from liquid mixtures: A 100-year perspective, *Adv. Colloid Interface Sci.* **2023**, 321, 103034.
- [34] J.M.D. Tascón, One hundred years of the Ostwald—de Izaguirre theory of adsorption from solution. Its connection with carbon adsorbents, *Carbon* **2022**, 196, 676-682.
- [35] J.M. Pertierra, La presión interna de los líquidos disolventes del carbón, *Revista de la Universidad de Oviedo* **1941**, 8: 67-84, pp. 81-84.
- [36] J.M.D. Tascón, Ramón de Izaguirre Porset (1899-1952) y la pervivencia de su obra científica, *Boletín de Ciencias y Tecnología del RIDEA* **2019**, 54, 205-249.
- [37] Gaceta de Madrid del 29 de mayo de 1916, p. 445.
- [38] F. Calvo, Emilio Jimeno Gil. *Semblanza de un maestro*, Amigos de la Cultura Científica, Santander, 1984.
- [39] E. Jimeno Gil, *Metalografía aplicada a los productos siderúrgicos. Curso complementario dado en la Universidad de Oviedo el año 1921*, Imp. Ruiz y Gracia, Calatayud, 1922.
- [40] C. del Fresno, Eine Beziehung zwischen Atomvolumen und Ordnungszahl, *Z. anorg. Allg. Chem.* **1926**, 152 (1), 25-34.
- [41] C. del Fresno, Energetische Verhältnisse beider Bildung der Verbindung HCl·HBr, *Z. anorg. allg. Chem.* **1928**, 170 (3): 222-224.
- [42] C. del Fresno, Die Volumenänderungen beider Bildung binärer Verbindungen, *Z. Elektrochem. angew. phys. Chem.* **1930**, 36, 163-165.
- [43] C. del Fresno, L. Valdés, Potentiometrische Titrationsen mit Ferriciankalium in alkalischer Lösung. I. Vanadium und hydrosulfid, *Z. anorg. allg. Chem.* **1929**, 183 (3): 251-257.
- [44] C. del Fresno, L. Valdés, Potentiometrische Titrationsen mit Ferriciankalium in alkalischer Lösung. II. Arsen, Antimon, Zinn und Thallium, *Z. anorg. allg. Chem.* **1929**, 183 (3), 258-262.
- [45] C. del Fresno, E. Mairlot, Valoración potenciométrica de cromatos en disolución alcalina con sulfato de vanadilo, *An. Real Soc. Esp. Fís. Quím.* **1932**, 30, 254-259.
- [46] C. del Fresno, E. Mairlot, Potentiometrische Bestimmungen in alkalischer Lösung. Bestimmung von Gold mit Vanadylsulfat, *Z. anorg. allg. Chem.* **1933**, 214 (1), 73-76.
- [47] C. del Fresno, E. Mairlot, Potentiometrische Bestimmungen in alkalischer Lösung. Bestimmung von Chromat und gleichzeitige Bestimmung von Chromat und Ferricyanid, *Z. anorg. allg. Chem.* **1933**, 212 (3), 331-336.
- [48] C. del Fresno, E. Mairlot, Valoraciones potenciométricas en disolución alcalina. Valoración del cobre y de la plata, *An. Real Soc. Esp. Fís. Quím.* **1934**, 32: 280-285.
- [49] C. del Fresno, E. Mairlot, Valoraciones potenciométricas en disolución alcalina con sulfato de vanadilo, *Revista de la Academia de Ciencias Exactas, Físico-Químicas y Naturales de Madrid* **1933**, 30, 315-381.
- [50] J. Giral, C. del Fresno, La VIII Conferencia de la Unión Internacional de la Química Pura y Aplicada, *An. Soc. Esp. Fís. Quím.* **1927**, 25, 392-400.
- [51] C. del Castillo Rodríguez, Misión cumplida por los científicos españoles durante la II República Española: el IX Congreso de la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada, celebrado en Madrid. *Educ. Quím. (México)* **2011**, 22, 267-270.
- [52] B. Madariaga de la Campa, C. Valbuena Morán, *La Universidad Internacional de Verano de Santander (1932-1936)*, UIMP, Santander, 1999, pp. 111-113.
- [53] J.M.D. Tascón, El Instituto Nacional del Combustible del CSIC. Parte 1. Puesta en marcha y primeros años, *An. Quím.* **2023**, 119, 107-112.
- [54] A. Toca, "Dos profesiones para un solo cometido". La introducción de la ingeniería química en España durante el primer franquismo, *DYNAMIS* **2006**, 26, 253-285.
- [55] S. López García, El Patronato "Juan de la Cierva" (1939-1960). II parte: La organización y la financiación, *Arbor* **1989**, 159(625), 1-44.
- [56] J. Guzmán, J.M. Fernández Ladreda, Cátodo de cobre y ánodo de hierro en el electroanálisis de los latones, *An. Soc. Esp. Fís. Quím.* **1915**, 13, 308-315.

- [57] J.M. Fernández Ladreda, Refino electrolítico del cobre. Procedimiento para separar la plata de los fangos argentíferos, *An. Soc. Esp. Fís. Quím.* **1922**, 20, 199-206.
- [58] J.M. Fernández Ladreda, Las propiedades físicas de los latones 72/28 y 90/10 en función de la reducción final y recocido previo a la misma, *An. Soc. Esp. Fís. Quím., Secc. Téc.* **1928**, 1, 81-112.
- [59] CSIC, *Memoria de la Secretaría General. Año 1944*, Madrid, 1945, pp. 303-305.
- [60] C. del Fresno, A. Arias Fernández, Sobre la flotación de minerales complejos de cobre y cobalto. *Revista de la Universidad de Oviedo. Facultad de Ciencias* **1944**, 21/22, 91-108.
- [61] C. del Fresno, L. Álvarez Piquero, Potenciometrías del mercurio en solución alcalina con soluciones de arsénico y antimonio trivalentes, *An. Real Soc. Esp. Fís. Quím.* **1944**, 40, 911-925.
- [62] C. del Fresno, E. de Lafuente, Determinazione potenziometrica del mercurio con solfato di vanadio in soluzione alcalina, *Gazz. Chim. Ital.* **1938**, 68, 619-625.
- [63] B.A. Buylla, J.M. Pertierra, J.M., Oxidación de hidrocarburos aromáticos, *An. Real Soc. Esp. Fís. Quím.* **1933**, 31: 59-64.
- [64] J.M. Pertierra, Influencia de los constituyentes de un carbón en su coquización, *An. Real Soc. Esp. Fís. Quím.* **1931**, 29: 374-385.
- [65] Pertierra, J.M., Estudios acerca de los carbones de "Hulleras del Turón", *Combustibles* **1941**, 2: 69-80.
- [66] M.R.A. Buylla, Los rayos X aplicados al combustible sólido, *Revista Industrial-Minera Asturiana* **1933**, 18, 305-310.
- [67] M.R.A. Buylla. El arsénico en los carbones asturianos. *Revista de la Universidad de Oviedo* **1941**, 7, 87-98.
- [68] M.A. López-Antón, M. Díaz-Somoano, R. Ochoa-González, M.R. Martínez-Tarazona, Distribution of Trace Elements from a Coal Burned in Two Different Spanish power Stations, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2011**, 50, 12208-12216.
- [69] M. Díaz-Somoano, M.R. Martínez-Tarazona, Retention of Arsenic and Selenium Compounds Using Limestone in a Coal Gasification Flue Gas, *Environ. Sci. Technol.* **2004**, 38, 899-903.
- [70] J.M. Pertierra Pertierra, La contaminación del aire y sus consecuencias, *Boletín del Instituto de Estudios Asturianos, Suplemento de Ciencias* **1965**, 11, 17-58, p. 21.
- [71] J.M. Pertierra, *La hidrogasificación del carbón y su importancia para la economía asturiana*, IDEA, Imprenta "La Cruz", Oviedo, 1980, p. 14.
- [72] J.M. Pertierra, Estudios sobre los carbones de la Sociedad Duro-Felguera, *Revista de la Universidad de Oviedo* **1940**, 1: 43-63.
- [73] J.M. Pertierra, La presión interna de los líquidos disolventes del carbón, *An. Real Soc. Esp. Fís. Quím.* **1941**, 37, 58-68.
- [74] L. Rodríguez Pire, El pasado, el presente y el porvenir de la Facultad de Ciencias, *Discurso leído en la solemne apertura del curso académico de 1943-1944*, Universidad de Oviedo, Imp. "La Cruz", Oviedo, 1943, pp. 23-28 y 44-51.
- [75] M.O. González García, Acción oxidante del peróxido de benzoilo en presencia de yodo sobre los enlaces etilénicos, bencénicos y acetilénicos de algunos compuestos orgánicos, *Revista de la Facultad de Ciencias. Nueva Serie* **1962**, 3(2), 28-52.
- [76] J.M. Pertierra, Obtención de alúmina con materias primas nacionales. Ensayos físicos para la purificación de una bauxita española, I, *An. Real Soc. Esp. Fís. Quím.* **1948**, 44B, 251-260.
- [77] J.M. Pertierra Pertierra, La conservación del suelo agrícola y la geobioquímica del hambre. *Discurso leído en la solemne apertura del curso de 1954-55*, Universidad de Oviedo, Imp. "La Cruz", Oviedo, 1954.
- [78] J.M. Pertierra, Métodos rápidos de análisis de silicatos, *Revista de la Facultad de Ciencias. Nueva Serie* **1962**, 3(1), 61-72.
- [79] J.M. Pertierra, Química de los gases nobles, *Revista de la Facultad de Ciencias. Nueva Serie* **1965**, 6(2), 99-107.
- [80] A. Vian Ortuño, La Física y la Química, en *La Edad de Plata de la Cultura Española, 1898-1936*, tomo 39, vol. 2 (Ed.: P. Laín Entralgo), Espasa-Calpe, Madrid, 1993-1994, pp. 428-472.

ENSEÑANZA
DE LA QUÍMICA

La nomenclatura química según las normas de la Real Academia Española

Luis Salvatella 



L. Salvatella Ibáñez

Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH), CSIC-Universidad de Zaragoza, Pedro Cerbuna 12, E-50009, Zaragoza
C-e: lsalvate@unizar.es
Recibido: 10/10/2023/
Aceptado: 24/11/2023
ORCID: 0000-0003-2010-9540

Resumen: La nomenclatura química se basa en las recomendaciones de la IUPAC en inglés. Sin embargo, las versiones españolas del *Libro rojo* y del *Libro azul* no abordan sistemáticamente las particularidades del español. Aquí se describen las consecuencias de una interpretación estricta de la ortografía normativa en varios aspectos de la nomenclatura química, como el uso de *z* antes de *e* o *i*, las grafías *yodo/iodo*, la tilde, la mayúscula, la generación de palabras compuestas mediante yuxtaposición o guion, el uso de la conjunción copulativa y la adaptación de las fórmulas.

Palabras clave: Nomenclatura química, Real Academia Española, Ortografía, Sintaxis, Lengua española

Abstract: Systematic nomenclature is based on IUPAC recommendations in English. However, the Spanish versions of the Red Book and the Blue Book do not systematically address the peculiarities of the Spanish language. Here, I report the consequences of a strict interpretation of the Spanish normative orthography on various aspects of chemical nomenclature, such as the use of *z* before *e* or *i*, yodo/iodo spelling, accent marks, capitalization, the generation of compound words using juxtaposition or hyphenation, the use of the copulative conjunction, and the adaptation of formulas.

Keywords: Chemical Nomenclature, Royal Spanish Academy, Orthography, Syntax, Spanish Language.

Introducción

El cuidado de la ortografía y de la sintaxis es una señal de cortesía en la comunicación escrita. Un texto bien escrito ahorra tiempo y facilita la comprensión al lector. Por eso, es importante que el autor y su público compartan un mismo código lingüístico.

En el campo de la Química, la institución encargada de la nomenclatura y la formulación es la IUPAC, cuyas recomendaciones solo son válidas en inglés. Estas reglas están recogidas principalmente en los libros de nomenclatura de Química Inorgánica y Química Orgánica, conocidos en sus versiones españolas como *Libro rojo*^[1] y *Libro azul*,^[2] respectivamente.

En las versiones originales de estos libros, las adaptaciones de los nombres sistemáticos a la eufonía inglesa mediante elisión o adición de vocales están incorporadas en el articulado.

En las traducciones españolas de estos libros, las adaptaciones al español aparecen únicamente descritas en los prólogos y en esporádicas notas a pie de página o pie de tabla. Allí se incluyen el uso de los químicos hispanohablantes o el criterio de los traductores sobre las alteraciones en vocales y consonantes o el uso de tildes.

Las instituciones encargadas de velar por la unidad de la ortografía española son las Academias de la Lengua Española (en España, la Real Academia Española, RAE). Sin embargo, estas instituciones han mostrado poco interés en

la ortografía y la sintaxis de la nomenclatura química sistemática.

Como resultado, los químicos hispanohablantes son reacios a aplicar las normas de la RAE. Así, el artículo de esta revista en el que se detallan los acuerdos entre la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales de España (RAC), la RAE, la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) y la Fundación del Español Urgente (Fundéu) sobre los nombres de los elementos químicos incluye esta velada invitación a eludir las normas ortográficas de la RAE:

«En relación con las pautas de la IUPAC para la creación de los nombres provisionales de los nuevos elementos químicos y el conflicto que se plantea con la norma ortográfica del español que obliga a escribir *m* antes de *p* o *b* (p. ej., *ingl. ununpentium* > *esp. unumpentio*), se sugiere que, si no se quiere aplicar esa norma ortográfica por considerar que oscurece la formación numérica composicional de esos nombres, se emplee la grafía inglesa (con terminación *-ium*) en cursiva hasta tanto se apruebe el nombre definitivo y su adaptación a nuestra lengua.»^[3]

Para aquellas personas que sí consideran pertinente usar la nomenclatura química adaptada a las normas de la RAE, sistematizadas en la *Ortografía de la lengua española* de 2010,^[4] recojo a continuación algunas consecuencias de su aplicación estricta. Espero que este artículo permita así abrir una reflexión sobre el grado deseable de aplicación de las normas de la RAE en la nomenclatura química.

Vocabulario

El *Diccionario de la lengua española* (conocido como DRAE)^[5] incluye un amplio listado de términos químicos. Así, cuenta con un listado actualizado de los nombres de los elementos conocidos (del *hidrógeno* al *oganésón*) rigurosamente definidos. Sin embargo, el resto de vocablos químicos incluidos en este diccionario tienen un desigual rigor científico. Mientras algunos términos son sorprendentemente especializados (*formaldehído*, *nitrobenzeno*), otros están claramente en desuso entre los químicos hispanohablantes (*benzol*, *carbinol*, *vitriolo*) cuando no son puramente acientíficos (*teína*).

Los vocablos usados para la construcción de nombres sistemáticos incluidos en el DRAE también presentan un heterogéneo grado de rigor, desde la notable especialización (*ácida*) hasta la evidente obsolescencia (*muriato*). Este diccionario incluye también nombres químicos compuestos (*ácido acético*, *cloruro de calcio*), algunos de los cuales están formados con nomenclaturas obsoletas (*anhídrido sulfuroso*, *bicarbonato sódico*) aunque arraigados en el lenguaje común.

Ortografía

Letras

Representación gráfica del fonema /z/

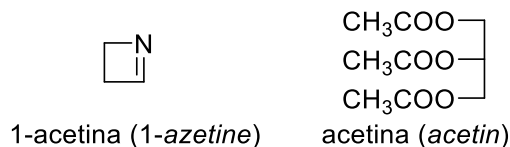
Un motivo de insumisión de los químicos hispanohablantes a la RAE consiste en la adaptación de la raíz léxica *az-* (que contiene nitrógeno) antes de las letras *e* o *i*. Mientras que el *Libro rojo* y el *Libro azul* defienden el mantenimiento de la letra *z*, el DRAE usa las grafías con *c* (*ácida*, *benzodiacepina*, *hidracida*, *hidracina*). Por tanto, habría que sustituir las formas **azida*,^[6] **hidrazina*,^[7] **pirazina*,^[8] **piperazina*^[8] y **oxazinano*^[8] (donde el asterisco indica una grafía no ajustada a las normas de la RAE) por las ortodoxas *ácida*, *hidracina*, *piracina*, *piperacina* y *oxacinano*.

Menos conflicto suele plantear la raíz *benz-* (relacionado con el benceno) antes de las letras *e* o *i*. En este caso el uso de la letra *c* es generalizado por la RAE (*benceno*) y por los químicos hispanohablantes (*bencilideno*).^[8] Curiosamente, la RAE admite la doble grafía para *bencina*/*benzina*, aunque solo usa la *c* para sus derivados (*bencinera*, *bencinero*).

El uso generalizado de *c* antes de *e* o *i* defendida por la RAE^[9] generaría términos con grafías poco habituales entre los químicos hispanohablantes (*acelaico*, *aceótropro*, *ceolita*, no incluidos en el DRAE con ninguna grafía).

La convergencia de las traslaciones de las consonantes inglesas *c* y *z* en la española *c* podría ser causa de confusión. Así, la traducción del prefijo inglés *azido-* para referirse al grupo $-N_3$ (*azidobenzene*, *azidomethane*) al español como *ácido-* impediría su distinción de la raíz homónima, usada en el DRAE en vocablos relacionados con ácidos (*acidosis*, *acidorresistente*). La aplicación estricta de la norma de la RAE generaría la grafía *acidotimidina*, que aparece con *z* en un texto de 1997 usado como ejemplo en el *Diccionario histórico de la lengua española*.^[10]

El uso de la *c* para traducir el término inglés *azetine* (heterociclo de cuatro eslabones con un nitrógeno y un doble enlace) generaría el vocablo español *acetina*, ya usado habitualmente para nombrar al triglicérido derivado del ácido acético (Esquema 1).



Esquema 1. Nombres ambiguos por la traslación *z* (inglés) > *c* (español).

El uso de *c* antes de *e* o *i* no es una norma absoluta. En muchos casos, la RAE admite las grafías *c* y *z*, aunque prefiere mayoritariamente la primera (*circonio*/*zirconio*, *acimut*/*azimut*), con la notable excepción de *zinc* (también admitido como *cinc*). Solo en unos pocos casos es válida únicamente la grafía con *z* (*enzima*, *zeína*). Aunque podría plantearse una dispensa en el uso de la grafía con *c* para los nombres químicos, la tendencia de la RAE en los últimos años es la progresiva reducción de las listas de excepciones de las reglas ortográficas, y no su ampliación. Además, resultaría extraño defender la grafía con *z* para *ácida* o *hidracina* basándose en argumentos etimológicos, cuando *benceno* no plantea problemas para escribirse con *c*.

Grupo consonántico *ft-*

En español, todas las sílabas deben contener al menos una vocal.^[11] No obstante, la RAE admite en inicial de palabra algunos grupos consonánticos extraños a la estructura silábica del español (*cn-*, *gn-*, *mn-*, *pn-*, *ps-*, *pt-*, *ts-*),^[12] que deberían pronunciarse en la práctica omitiendo la primera consonante (*ptialina* > *tialina*, *gneis* > *neis*). Sin embargo, no aborda la pronunciación o adaptación de la agrupación *ft-* en inicial de palabra (*ftálico*). La Fundéu admite la grafía *ft-* (*ftalato*) sin indicar su pronunciación,^[13] aunque la supresión de la primera consonante generaría [*taláto*] (homófono del anión derivado del talio).

Grafías alternativas para nombres de elementos

Para *yodo* y *yoduro*, la RAE admite las grafías con *y* e *i*, aunque prefiere la primera en ambos casos. Otros términos relacionados solo están admitidos con *y* (*yodación*, *yodado*, *yodar*, *yodoformo*).

Desde un punto de vista fonético, la grafía con *i* generaría nombres con secuencias vocálicas difíciles de pronunciar (*triioduro*). El término *diiodo* (I_2) sería difícil de distinguir de *diodo* (válvula electrónica). Por cierto, las mismas dificultades fonéticas aparecen en los sufijos *-dii-* y *-triii-* para nombrar los cationes formados por la adición de dos o tres hidrones, respectivamente (H_4O^{2+} , *oxidanodii*).^[14]

La RAE acepta para algunos elementos químicos una pluralidad de nombres (*wolframio*/*volframio*/*tungsteno* y

teluro/telurio) o grafías (zinc/cinc, yodo/iodo, kriptón/criptón, circonio/zirconio y lawrencio/laurencio).^[3] Esta tolerancia multiplicaría el número de nombres químicos válidos (yoduro de circonio/ioduro de circonio/yoduro de zirconio/ioduro de zirconio).

Tilde

La tilde es un signo imprescindible para especificar la pronunciación de una palabra en español que, evidentemente, no mencionan los libros de nomenclatura en inglés.

Acentuación de diptongos e hiatos

Los diptongos se acentúan solo si corresponde hacerlo según las reglas generales de acentuación (*propiónico, benzoico, catión*). En cambio, los hiatos formados por vocal abierta átona seguida de vocal cerrada tónica se acentúan siempre en la vocal cerrada (*cisteína, esparteína*), incluso si las vocales están separadas por *h* (*formaldehído*). El resto de hiatos se acentúa según las reglas generales de acentuación (*aminoácido, butadiino*).

Un radical derivado de un ácido acabado en *-oico* presenta el sufijo *-oilo* (*benzoílo*),^[15] para el que sería incorrecta la grafía sin tilde (**ftaloilo*^[8] debería escribirse *ftaloilo*). El catión análogo de este radical debería tener la terminación *-oilio* (*benzoílio*).

Acentuaciones alternativas

Mientras que el *Libro rojo* y el *Libro azul* usan generalmente una única acentuación para cada palabra, la RAE admite en algunos casos dos acentuaciones alternativas (*amoníaco/amoníaco, anhídrido/anhidrido*), aunque recomienda usar la grafía que refleja la prosodia de la lengua oral.^[16]

Mayúscula

En los títulos de obras, capítulos y epígrafes, debe escribirse con inicial mayúscula solo la primera palabra y los nom-

bres propios. Si el primer elemento del título es una cifra, la siguiente palabra debe escribirse con letra minúscula (*1080 recetas de cocina*).^[17] Esta regla podría aplicarse también a títulos que comienzan con un nombre químico iniciado por un localizador numérico (*2-propanol como reductor*), aunque las normas de la RAE no abordan expresamente estos casos.

Formación de palabras compuestas y su acentuación

El inglés tiene una grafía fundamentalmente etimológica, mientras que el español tiene una grafía esencialmente fonética. Por eso, la formación de palabras compuestas en inglés por yuxtaposición de morfemas resulta muy sencilla. En cambio, las palabras compuestas en español deben además «sonar bien».

Dígrafo ll

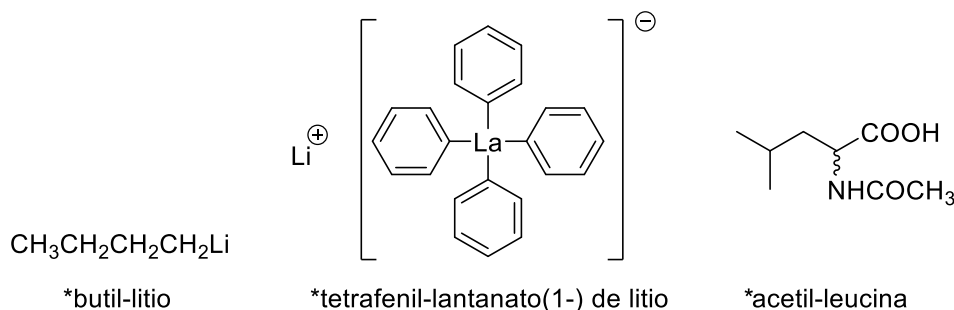
La yuxtaposición de dos letras *l* generaría el dígrafo *ll*, creando así un fonema nuevo, por lo que esta unión está prohibida por la RAE. Esta interdicción impide que se pueda escribir correctamente la palabra **sal-le*, forma verbal *sal* + pronombre átono *le* (**Sal-le al paso*).^[18] La aversión de la RAE por los guiones en las palabras compuestas impediría así formar algunos nombres químicos (**butil-litio, *tetrafenil-lantanato(1-)* de litio, **acetil-leucina*, Esquema 2).

Dígrafo rr

En la unión de un morfema acabado en vocal seguido de otro iniciado con *r*, hay que usar el dígrafo *rr* (*birrefringencia*).^[19] De esta forma, las palabras **cobaltorenio*^[20] y **trirodio*^[21] deberían sustituirse por *cobaltorrenio* y *trirrodio*, respectivamente.

Uso de m antes de b y p

Las palabras compuestas por yuxtaposición están sometidas a las mismas reglas ortográficas que el resto de vocablos. Así, se escribe *m* (y no *n*) antes de *b* y *p*.^[22] Por tanto,



Esquema 2. Nombres químicos no admitidos por la prohibición general del guion en la formación de palabras compuestas.

serían incorrectas las grafías **unbinilio* (nombre provisional del elemento de número atómico 120) y **unpentnilio* (nombre provisional del elemento de número atómico 150),^[23] que deberían ser sustituidas por *umbinilio* y *umpentnilio*, respectivamente.

Acentuación de palabras compuestas con componentes soldados

Para la formación de palabras compuestas, la RAE establece como norma general que los componentes deben escribirse soldados, sin espacio, guion u otro signo tipográfico entre ellos (*nitrobenceno*), aunque contempla un listado limitado de excepciones.^[24] En la formación de palabras compuestas por yuxtaposición, la norma general establece que solo se mantiene el acento prosódico (y gráfico, si lo hay) del último componente (*fisicoquímico*, *decimoséptimo*).^[25] Por eso, en los nombres químicos se mantiene la tilde del último componente (*diclorurooxígeno*),^[26] mientras desaparece de los demás (*tetrahidroxidosilicio*).^[26]

El único caso admitido de doble acentuación prosódica corresponde a los adverbios terminados en *-mente*,^[27] por lo que sería incorrecta la doble acentuación fónica (**hi.dró.ge.no.car.bo.ná.to*) propuesta en el *Libro rojo*.^[20]

La yuxtaposición de una vocal abierta átona seguida de una vocal cerrada tónica genera un hiato que debe acentuarse gráficamente (*cortaúñas*, *arcoíris*), regla que debería aplicarse también a los nombres químicos (*octatetraíno*, *heptabromuro de tetraíndio*).^[28]

Acentuación de palabras compuestas con componentes unidos por guiones

Muchos nombres sistemáticos están formados por componentes unidos por guiones intercalados que permiten insertar información estructural (posiciones de sustituyentes o insaturaciones, ramificaciones, estereoquímica, etc.). Las normas de la RAE no contemplan la nomenclatura química sistemática, por lo que se pueden establecer dos analogías sobre el impacto del guion intercalado en nombres químicos sistemáticos que conducen a conclusiones opuestas.

Por un lado, se puede considerar que el guion intercalado es análogo al signo de división de palabras al final de línea, de forma que interrumpe la grafía del nombre sin alterar su acentuación gráfica (*acetato de furán-2-ilo*, *naftalen-1-ol*,

pirrolidin-2-ona, *N^α-benzoil-L-triptófano*),^[29] siguiendo el uso habitual entre los químicos hispanohablantes.

Por otra parte, se puede considerar que el guion intercalado es análogo al que une palabras diferentes (*teórico-práctico*, *árabe-israelí*),^[30] tal como defiende el traductor Gonzalo Claros.^[31] Esta interpretación generaría nombres con grafías poco habituales en la literatura química (*acetato de furán-2-ilo*, *naftalén-1-ol*, *pirrolidín-2-ona*, *N^α-benzoil-L-triptófano*, Esquema 3). En las palabras compuestas separadas por guiones, cada componente se pronuncia separadamente (*rac-histidina*).^[28]

Sintaxis

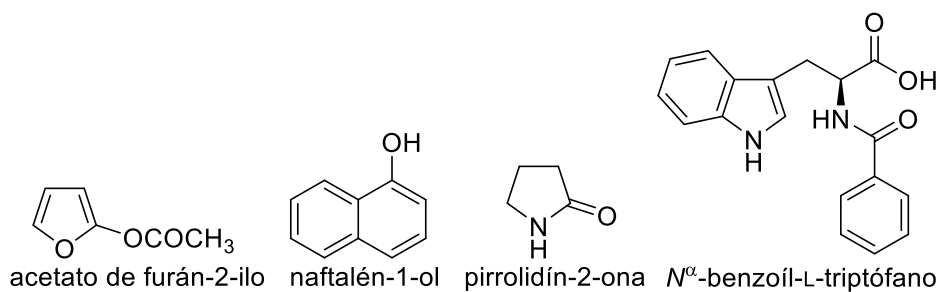
Preposición de

Muchos nombres químicos en inglés tienen la forma de sintagma nominal formado por dos sustantivos separados por un espacio (*sodium chloride*, *ethyl acetate*). Estos nombres se traducen al español invirtiendo el orden de los sustantivos e intercalando la preposición *de* entre ellas (*cloruro de sodio*, *acetato de etilo*). Por lo tanto, *phenyl azide* y *methyl isocyanate* no deberían traducirse como **fenilacida* y **metilisocianato*, sino como *ácida de fenilo* e *isocianato de metilo*, respectivamente.

En el caso de los radicales, es habitual entre los químicos hispanohablantes traducir el nombre completo (*methyl radical*) usando una aposición (*radical metilo*). En cambio, la RAE prefiere intercalar la preposición *de*, como muestra su definición de *metilación* (*proceso químico por el que se introducen uno o más radicales de metilo en un compuesto orgánico*).^[5]

Conjunción copulativa y

En inglés, los nombres de las sales dobles se construyen mediante concatenación de los nombres de los componentes mediante espacios (*magnesium potassium fluoride*, *bismuth chloride oxide*). El *Libro rojo* traduce estos nombres intercalando la conjunción *y* entre los componentes electropositivos (*fluoruro de magnesio y potasio*), pero no entre los electro-negativos (**cloruro óxido de bismuto*).^[32] Desde un punto de vista gramatical, no existe justificación para esta diferencia



Esquema 3. Nombres con tilde por acentuación gráfica separada de cada componente.

de criterio, por lo que debería usarse la conjunción y también en el último caso (*cloruro y óxido de bismuto*).

La conjunción y debería transformarse en e cuando preceda al fonema /i/ (*carbonato de amonio e itrio*), exceptuando los diptongos /ie/ (*trióxido de estroncio y hierro*) y /io/ (*hidróxido y ioduro de zinc*, en el caso de usar la grafía con i para el nombre del ion I).^[33]

Formulación

Abreviaciones de los nombres de ligandos

Las fórmulas químicas están formadas fundamentalmente por símbolos, números, signos tipográficos y trazos, por lo que son esencialmente independientes de las normas lingüísticas y, por tanto, idénticas en todos los idiomas. Sin embargo, existen algunas excepciones a esta norma general.

Para la representación de los elementos químicos (*Fe* para hierro) y los aminoácidos (*Phe* para fenilalanina) se utilizan símbolos, representaciones gráficas normalizadas con una grafía única en todos los idiomas.^[34] Por eso, la palabra *mol* tiene plural (*dos moles*), mientras que el símbolo *mol* no lo tiene (*2 mol*).

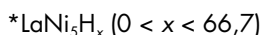
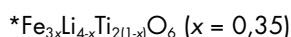
Al referirse a los ligandos (ligantes, para muchos químicos hispanohablantes), la versión española del *Libro rojo* traduce *abbreviations* por *abreviaturas*.^[35] Sin embargo, esta traducción es incorrecta, ya que las *abreviaturas* deben terminar siempre en punto (*pág.*) o barra (*c/*),^[36] signos ortográficos ausentes en las representaciones de los ligandos. La traducción correcta sería en realidad *abreviaciones*, que subsume varios métodos de simplificación de la grafía (*abreviaturas*, *acortamientos*, *acrónimos*, *siglas*, etc.).

Las abreviaciones están restringidas a su ámbito lingüístico.^[37] Por eso, el acortamiento inglés «app» no es válido como término español, aunque puede sustituirse por el acortamiento español «apli» o la adaptación «ap»,^[38] o simplemente resaltarse en cursiva como extranjerismo (*app*).

La falta de carácter internacional de las abreviaciones de los nombres de los ligandos en inglés haría que muchas de ellas (como *py* o *Ph*) no fueran válidas en español, por lo que deberían adaptarse acuñando abreviaciones en español o, simplemente, destacándolas en cursiva. Por tanto, las fórmulas como * $[Ag(py)_2]MnO_4$ o *PhLi* deberían sustituirse por $[Ag(py)_2]MnO_4$ o *PhLi*.

Separador decimal

La nomenclatura de compuestos no estequiométricos incluye números reales que especifican su composición. El *Libro rojo* (publicado en 2007) incluye ejemplos con números reales que usan la coma como separador decimal:



Desde 2010, la RAE recomienda usar como separador decimal el punto, aunque la coma sigue siendo válida.^[39] Por tanto, en las fórmulas anteriores debería recomendarse la sustitución de la coma por un punto, lo que permitiría la identidad de las fórmulas en español e inglés.

Conclusiones

La aplicación estricta de las normas ortográficas de la Real Academia Española conduciría a una grafía de la nomenclatura química distinta a la habitual en la literatura química en español.

La adaptación ortográfica defendida por la RAE genera nombres fáciles de pronunciar, especialmente para las personas ajenas a la Química, y coherentes con las normas ortográficas del léxico general.

Sin embargo, los químicos hispanohablantes suelen oponerse a esta adaptación alegando la coherencia con una amplia literatura científica, la dificultad de reconocer los componentes del nombre, la aparición de ambigüedades innecesarias o incluso la imposibilidad de nombrar algunas entidades químicas.

Por eso, creo pertinente abrir una discusión sobre el alcance de la validez de las reglas ortográficas de la RAE en la nomenclatura química. Como objetivo, los libros de nomenclatura y las revistas químicas deberían abordar de forma sistemática los conflictos entre la nomenclatura sistemática y las normas de la RAE.

Agradecimientos

El autor agradece la financiación del Ministerio de Ciencia e Innovación (proyecto PID2021-125762NB-I00), el Gobierno de Aragón y FEDER (grupo E37_20R).

Bibliografía

- [1] N. G. Connelly, T. Damhus, R. M. Hartshorn, A. T. Hutton. *Nomenclatura de Química Inorgánica: Recomendaciones de la IUPAC de 2005. Versión española elaborada por Miguel A. Ciriano y Pascual Román Polo*. Zaragoza: Prensas Universitarias de Zaragoza, 2007.
- [2] Comisión de Nomenclatura de la Química Orgánica de la IUPAC. *Nomenclatura de la química orgánica. Secciones A, B, C, D, E, F y H; adaptación española... preparada por E. Fernández Álvarez y F. Fariña Pérez*. RSEQ-CSIC, Madrid, 1987.
- [3] M. Á. Ciriano, J. Elguero, J. García-Martínez, P. Goya, P. R. Polo, *An. Quím.* **2017**, 113(1), 65-67. <https://analesdequimica.es/index.php/AnalesQuimica/article/download/966/1301/2873>
- [4] Real Academia Española. *Ortografía de la lengua española*. Madrid: Espasa, 2010.
- [5] Real Academia Española. *Diccionario de la lengua española*. 23.ª edición. Madrid: Espasa, 2014.
- [6] ref. 1, p. 75.
- [7] ref. 1, p. 318.

- [8] E. R. Martín, P. R. Polo. *Nomenclatura química y normas de la IUPAC en español*. Universidad de la Rioja, 2022. <https://dialnet.unirioja.es/descarga/libro/873818.pdf>
- [9] ref. 4, cap. I, art. 6.2.2.7.1, pp. 123-125.
- [10] Real Academia Española. (1997-). antisídico, a. En *Diccionario histórico de la lengua española*. Visitado el 14/07/2023, de <https://www.rae.es/dhle/antis%C3%ADdico>
- [11] ref. 4, cap. II, art. 2.2.1, p. 196.
- [12] ref. 4, cap. I, art. 6.5.2.2.1, pp. 180-183.
- [13] Fundeu. *Cursiva y redonda: Guía de estilo. 2013-2022*. <http://www.fundeu.es/wp-content/uploads/2013/05/CursivasGuia-Fundeu.pdf>
- [14] ref. 1, p. 105.
- [15] @Fundeu. (28 septiembre, 2015). Se escribe con tilde (se forma, por tanto, hiato). [entrada en Twitter]. Recuperado de <https://twitter.com/ACDS2015/status/648535445576421376>
- [16] ref. 4, cap. II, art. 2.3.3, pp. 207-212.
- [17] ref. 4, cap. IV, art. 4.1.1.1, pp. 451-452.
- [18] ref. 4, cap. I, art. 6.5.2.1.1, p. 174.
- [19] ref. 4, cap. I, art. 6.2.2.5.1, pp. 118-119.
- [20] ref. 1, p. 12.
- [21] ref. 1, p. 18.
- [22] ref. 4, cap. I, art. 6.2.1.1, pp. 88-91.
- [23] ref. 1, p. 251.
- [24] ref. 4, cap. III, art. 4.1.1, pp. 402-424.
- [25] ref. 4, cap. II, art. 3.4.5.1.1, p. 273.
- [26] ref. 1, p. 113.
- [27] ref. 4, cap. II, art. 3.4.5.1.2, pp. 273-274.
- [28] ref. 4, cap. II, art. 3.4.5.2, p. 275.
- [29] ref. 4, cap. III, art. 4.1.1.1, pp. 402-411.
- [30] ref. 4, cap. III, art. 4.1.1.2, pp. 411-422.
- [31] G. Claros Díaz. *Cómo traducir y redactar textos científicos en español: Reglas, ideas y consejos*. Segunda edición, corregida y aumentada. Barcelona: Fundación Dr. Antonio Esteve, 2016. <https://www.esteve.org/wp-content/uploads/2018/01/13226.pdf>
- [32] ref. 1, p. 41.
- [33] ref. 4, cap. I, art. 6.1.2.1.2, pp. 76-81.
- [34] ref. 4, cap. V, art. 4, pp. 586-591.
- [35] ref. 1, p. 63.
- [36] ref. 4, cap. V, art. 3.2, pp. 568-577.
- [37] ref. 4, cap. V, art. 3, p. 565.
- [38] @RAEinforma. (31 de agosto, 2018). No existe una abrev. convencional. Si es imprescindible abreviar la secuencia, puede usar «apl.» para «aplicación» y «móv.» para «móvil» (aunque esta es poco eficaz, solo ahorra un carácter). Se registran tb. el acortamiento «apli» y la adaptación «ap». [entrada en Twitter]. Recuperado de <https://twitter.com/RAEinforma/status/1035445236833701888?s=20>
- [39] ref. 4, cap. VIII, art. 2.2.1.2.1, pp. 666-667.

7th IBERIAN CARBOHYDRATE MEETING
January 15-17 2024
BARCELONA Sitges

RSEQ Real Sociedad Española de Química
SOCIETAT PORTUGUESA DE QUÍMICA

PREMIOS RSEQ 2023

El pasado 27 de octubre, el Paraninfo de la Universidad de Sevilla albergó la entrega de los Premios y Distinciones de la RSEQ correspondientes a la edición de 2023.

Se entregaron los premios en las modalidades de “Medalla de la RSEQ”, “Reconocimiento a Carreras Investigadoras Distinguidas”, “Excelencia Investigadora” y “Tareas Educativas y Divulgativas de Enseñanza Preuniversitaria”. Además, hubo un reconocimiento a los socios con cuarenta y cinco años de vinculación a la Sociedad y, para finalizar, disfrutamos de la conferencia de uno de nuestros patrocinadores, el Dr. Andrés Trabanco en nombre de Janssen-Cilag.

La Mesa Presidencial estuvo formada por la Dra. Patricia Aparicio Fernández, Directora General de Relaciones de Gobierno de la Universidad de Sevilla, que actuó como Presidenta de la Mesa; el Dr. Antonio M. Echavarren, Presidente de la RSEQ; Dña. Lorena Garrido Serrano, Viceconsejera de Universidad, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía y el Dr. Juan Luis Pérez Bernal, Decano de la Facultad de Químicas de la Universidad de Sevilla.

La Dra. Patricia Aparicio Fernández tomó la palabra para presentar a los miembros de la Mesa. A continuación, intervino Dña. Lorena Garrido Serrano, quien aseguró que «no hay investigación sin ciencia» y recordó que «se está elaborando el primer borrador de la Ley de la Ciencia, la Tecnología y la Innovación para Andalucía». Por su parte, el presidente de la RSEQ, Dr. Antonio M. Echavarren, resaltó que «hemos superado con creces los cinco mil miembros. Somos así la sociedad científica, de todas las áreas, con el mayor número de miembros de España [...] y la tercera sociedad química a nivel europeo. [...] Eso nos da también una mayor responsabilidad». Recordó la creación de los premios de la RSEQ clasificados por áreas en el año 2000 y su posterior transformación en los premios de excelencia a partir



Reconocimiento a los socios con 45 años en la RSEQ. Manuel Blázquez Ruiz, Jose Bonjoch Sese y Fernando Langa, en representación del resto de los socios, acompañados por los miembros de la Mesa Presidencial.

de 2014. «La química evoluciona disolviendo las fronteras de conocimiento entre las disciplinas. [...] Cada vez formamos mejor a nuestros estudiantes como químicos integrales», afirmó el Dr. Echavarren. Así mismo hizo mención al incremento de la cuantía de los premios de la RSEQ con el paso del tiempo. Concluyó el Dr. Juan Luis Pérez Bernal diciendo que «la excelencia, y la búsqueda de esta excelencia, es el mejor catalizador para acelerar el desarrollo del conocimiento científico y el avance de la química y también su aportación a una sociedad y un futuro más justo y sostenible».

De la presentación de los premiados se encargó la Secretaria General de la RSEQ, la Dra. Sonsoles Martín Santamaria, quien fue nombrando a cada uno de los galardonados.



Mesa Presidencial. De izquierda a derecha: Dña. Lorena Garrido Serrano (Viceconsejera de Universidad, Investigación e Innovación de la Junta de Andalucía), D. Antonio M. Echavarren (Presidente de la RSEQ), Dña. Patricia Aparicio Fernández (Directora General de Relaciones de Gobierno de la US) y D. Juan Luis Pérez Bernal (Decano de la Facultad de Químicas de la US).



Premio a las tareas educativas y divulgativas de enseñanza preuniversitaria a Almudena de la Fuente Fernández, entregado por Patricia Aparicio y Lorena Garrido.



Premios reconocimiento a carreras investigadoras distinguidas. *Izquierda*, María José Camarasa Rius y, *derecha*, Víctor Sotero Martín García, acompañados por Juan Luis Pérez y Antonio M. Echavarren.

En primer lugar, se llevó a cabo el **Reconocimiento a los socios con 45 años de servicios a la RSEQ**. Se contó con la asistencia presencial de los Dres. Manuel Blázquez Ruiz, Jose Bonjoch Sese y Fernando Langa de la Puente, en representación de todos

los reconocidos. Estos fueron los Dres. M^o Carmen Cartagena Causapé, Carmen Díez Sánchez, Antonio Domingo Coto, Josefa Donoso Pardo, Margarita González Prolongo, Ramón González Rubio, M^o Pilar Jiménez Sierra, Antonio Laguna

© 2023 Real Sociedad Española de Química



Premios a la Excelencia Investigadora. *Arriba – izquierda*: Ana Carmen Albéniz Jiménez, premio entregado por Teresa de Haro (UCB Biopharma) y Patricia Aparicio; *derecha*: Igor Larrosa Guerrero, con Lorena Garrido y José Cid (Janssen-Cilag). *Abajo – izquierda*: María Soledad Martín González con Ignacio López (CEPSA Química) y Antonio M. Echavarren; *derecha*: Diego Peña Gil con Juan Luis Pérez e Iván Albertos (BASF Española).



Medalla de la RSEQ a Agustí Lledós Falcó, entregada por Antonio M. Echavarren y Víctor García Pidal (Bruker Española).

Castrillo, Francisco López Calahorra, Rafael Lozano Fernández, M^o Paz Martínez Alcázar, David Mauléon Casellas, M^o Teresa Molina Orden, Rosa María Ortuño Mingarro, Luis Carlos Otero Díaz, Juan Carlos Palacios Albarrán, Rafael Pedrosa Saez, Ricardo Riguera Vega, José Antonio Serrano Blázquez y María Vallet Regí.

Manuel Blázquez fue el encargado de dirigir unas palabras a los asistentes. «Queremos trasladar un mensaje a las nuevas generaciones para que sean pacientes, persistentes en la excelencia y que no desistan de su carrera científica; que apoyen a la Real Sociedad Española de Química sin ningún atisbo de duda siendo miembros», afirmó.

Seguidamente se dio paso a la entrega del **Premio a las "Tareas Educativas y Divulgativas de Enseñanza Preuniversitaria"** a la Dra. Almudena de la Fuente Fernández, profesora en el Colegio de Nuestra Señora de los Ángeles de Madrid y en la Universidad Complutense de Madrid, quien hizo suyas las palabras de Comenius «quien enseña a otros se enseña a sí mismo. Quizás por eso los profesores no dejamos nunca de aprender».

La ceremonia continuó con los **Premios en reconocimiento a "Carreras Investigadoras Distinguidas"**, que recayeron en la Dra. María José Camarasa Rius, del Consejo Superior de Inves-

tigaciones Científicas, quien destacó la importancia del trabajo en equipo: «[A] un investigador solo, [...] sobre todo en este fascinante campo de la química médica, [le resulta ...] muy difícil llegar a buen puerto», y en el Dr. Víctor Sotero Martín García, de la Universidad de La Laguna, quien comentó que, si volviera a nacer, seguiría siendo químico. «La química es la ciencia que creo que ha contribuido mayoritariamente a mejorar la calidad de vida de este planeta».

Los **Premios a la "Excelencia Investigadora"** fueron entregados por los patrocinadores de los galardones, acompañados por un miembro de la Mesa Presidencial. En nombre de UCB Biopharma, estaba previsto que Dña. Teresa de Haro hiciera entrega del premio a la Dra. Ana Carmen Albéniz Jiménez, de la Universidad de Valladolid, acompañada de Dña. Patricia Aparicio. En el último momento, por problemas técnicos, la Dra. de Haro, que debía conectarse telemáticamente, no se pudo unir a la entrega. En nombre de Janssen-Cilag, D. José Cid, acompañado de Dña. Lorena Garrido, hicieron lo propio con el Dr. Igor Larrosa Guerrero, de la Universidad de Manchester. D. Ignacio López Serrano, de CEPESA Química, y D. Antonio Echavarren entregaron el reconocimiento a la Dra. María Soledad Martín González, del Consejo Superior de Investigaciones Científicas. D. Iván Albertos García, de BASF Española, y D. Juan Luis Pérez Bernal se encargaron de entregar el último de estos premios al Dr. Diego Peña Gil, de la Universidad de Santiago de Compostela.

En esta edición de 2023, patrocinada por Bruker Española y entregada por D. Víctor García Pidal y D. Antonio Echavarren, la **Medalla de la RSEQ** fue concedida al Dr. Agustí Lledós Falcó, de la Universidad Autónoma de Barcelona, quien hizo un repaso por su trayectoria, y por las personas y situaciones que han influido en ella. Hizo suya una frase de Gaudí para explicar que «para hacer las cosas bien es necesario primero, el amor, yo diría la pasión más que el amor, y segundo, la técnica» y agradeció a su familia su apoyo a lo largo de su carrera. Finalizó con la lectura de unas frases de la obra 'Helgoland' de Carlo Rovelli sobre la teoría cuántica.

La sesión finalizó con la conferencia "Drug Discovery at Janssen R&D" impartida por el Dr. Andrés Trabanco, Senior Scientific Director and Global Head Screening Triage & Early Chemistry de Janssen-Cilag.

Noticias grupos especializados

Entrega de los premios RSEQ a jóvenes investigadores 2023

El pasado día 13 de noviembre tuvo lugar en Murcia la entrega de los **Premios a Jóvenes Investigadores de la RSEQ** en su edición 2023. En la modalidad Líder de Grupo fueron reconocidos la Dra. Eva Blasco Pomar (Universidad de Heidelberg), el Dr. Josep Cornellà Costa (Instituto Max-Planck del Carbono), el Dr. Abraham Mendoza Valderrey (Universidad de Valencia) y la Dra. Katherine Villa Gómez (ICIQ). Así mismo, fueron galardonados en la modalidad Investigador postdoctoral el Dr. Jesús Barrio Hermida (Imperial College London), la Dra. Carla Casadevall Serrano (ICIQ / Universidad Rovira i Virgili), el Dr. Luis Escobar González (Universidad de Cambridge) y el Dr. Pablo Garrido Barros (Universidad de Granada).

La mesa presidencial estuvo formada por María Senena Corbalán García, vicerrectora de investigación de la Universidad de Murcia; José Ruiz López, presidente de la RSEQ-



Mesa presidencial



Arriba: Los premiados en la modalidad 'Líder Investigador' acompañados de Pablo Recacha, representante de Merck, y José Ruiz López, presidente de la RSEQ-ST Murcia. Abajo: Los premiados en la modalidad 'Investigador Postdoctoral' acompañados de Antonio Franconetti, presidente del JIQ, y José Ruiz López (fotos a la izquierda) / Francisco Juliá, miembro del Comité Organizador (fotos a la derecha).

ST Murcia; Francisco Guillermo Díaz Baños, decano de la Facultad de Química de la Universidad de Murcia; Antonio Franconetti García, presidente del JIQ y Marta Marín Luna como representante del comité organizador. Francisco Juliá, miembro del comité organizador, actuó como moderador de la ceremonia. El evento contó además con la presencia de Pablo Recacha Burgos en representación de Merck, empresa patrocinadora de los premios en la modalidad Líder de Grupo.

Como es habitual, la ceremonia de entrega se hizo coincidir con el **XIX Simposio de Investigadores Jóvenes**, cita de referencia anual para los jóvenes científicos de todas las áreas de la química que cuenta con el inestimable apoyo de la empresa Merck. Esta edición del Simposio contó con más de 150 participantes y se presentaron un total 137 comunicaciones. Los premiados RSEQ impartieron 8 de las 13 conferencias plenarias celebradas.

1º ESCUELA DE FOTOQUÍMICA (desde el Fundamento a la Aplicación)

La 1ª Escuela de Fotoquímica impartida íntegramente en español y organizada por la actual Junta del Grupo Especializado de Fotoquímica (GRUFO) de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) tuvo lugar del 6 al 8 septiembre de 2023 en la localidad de Castro-Urdiales (Cantabria), un enclave maravilloso para reunirse.

El evento, que se realizó en el Centro Cultural La Residencia, contó en la mesa inaugural con la presencia de Dña. Elena García Lafuente (concejala de Educación, Cultura y Atención Ciudadana del Ayuntamiento de Castro-Urdiales) Dña. Marta Liras Torrente (presidenta del GRUFO); D. Raúl Pérez Ruiz (vicepresidente del GRUFO y coordinador de la Escuela) y Dña. Virginia Martínez Martínez (secretaria del GRUFO, castreña y organizadora local).

La participación total fue de 51 personas. Cabe destacar que la procedencia de los/las alumno/as (38) fue muy di-

versa (Andalucía, Canarias, Castilla-La Mancha, Cataluña, Comunidad de Madrid, Comunitat Valenciana, Galicia, Illes Balears, País Vasco o Región de Murcia).

Durante dos días y medio los miembros de la Junta del GRUFO impartieron las diferentes clases del programa docente coordinado que abarcaban desde fundamentos teóricos de la Fotoquímica hasta sus distintas aplicaciones en diferentes áreas de interés. También se invitaron a 4 profesores/as especialistas en diversas áreas para que enseñaran de manera magistral como implementan la Fotoquímica en sus campos de investigación. Las profesoras invitadas fueron la Dra. Mercedes Novo Rodríguez de la Universidad de Santiago de Compostela y la Dra. Inés Corral Pérez de la Universidad Autónoma de Madrid. Mientras que el Dr. Santi Nonell Marrugat de la Universitat Ramon Llull y el Dr. José Alemán Lara de la Universidad



Asistentes a la 1ª Escuela de Fotoquímica impartida en español celebrada en Castro-Urdiales

Autónoma de Madrid fueron los profesores invitados. Para ver con más detalle el contenido del programa visite la página web: <https://grufo.rseq.org/actividadesgrufo/escuela-de-fotoquimica/>.

Además del programa educacional, se fomentó la creación de relaciones y la interacción entre los asistentes en las comidas organizadas durante la escuela, así como en las visitas a los locales nocturnos más representativos de la noche castreña. También se organizaron varias visitas guiadas por la ciudad de Castro-Urdiales.

Agradecer a todos los patrocinadores que han participado para poder realizar este evento: Ayuntamiento de Castro-

Urdiales, RSEQ, Lasing S. A., Agilent Technologies, MTB, MicroBeam y Luzchem.

La 2ª Escuela de Fotoquímica también en español se volverá a celebrar, *a priori*, en Castro-Urdiales en el año 2025, alternándose con las Jornadas Ibéricas de Fotoquímica (JIF) que se celebran en años pares siendo la próxima en Lisboa (Caparica) en 2024. Estas series de eventos marcan claramente el camino de la investigación nacional en Fotoquímica y se espera que en el futuro hagan de esta área de investigación un escenario más potente para el intercambio de conocimiento y una herramienta para fomentar este importante campo de las ciencias naturales.

Autumn GERMN NMR day: future NMR

El pasado 26 de noviembre en el salón de actos del instituto de química física “Blas Cabrera” tuvo lugar la jornada científica que bianualmente celebra el grupo especializado de Resonancia Magnética Nuclear, GERMN de la Real Sociedad Española de Química, RSEQ. Este año llevaba por título “Future NMR”, donde se repasaron los últimos adelantos tecnológicos y algunas de las futuras promesas que trabajan

en España en el campo de la RMN dieron a conocer sus investigaciones, además los premiados a las mejores tesis del año 2021 tuvieron la oportunidad de exponer su trabajo. Finalmente, la jornada terminó con la celebración de la junta ordinaria del GERMN, donde como punto más resaltado fue la renovación de la junta, donde se agradeció su esfuerzo durante estos años y donde se deseó suerte a la nueva junta.



Asistentes al Autumn GERM NMR day

Celebración de la XLI Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica.

Entrega de los Premios GEQO 2023

El pasado día 20 de octubre se celebró en Alcalá de Henares la XLI Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica, en su formato de jornada-simposio. La organización del evento corrió a cargo de la Junta de Gobierno del GEQO y de nuestros anfitriones en Universidad de Alcalá, Ernesto de Jesús, Marta González Mosquera Cristina García Yebra y Javier Carreras. La reunión contó con la participación de un centenar de asistentes y en ella intervinieron Andrew Weller (University of York), Miquel Costas (Universidad de Girona), Julio Lloret (ICIQ) y Alba Collado (Universidad Autónoma de Madrid). Además, nueve jóvenes investigadores presentaron y discutieron su trabajo con la audiencia.

En la reunión se hizo entrega de los Premios GEQO 2023, en sus diferentes categorías:

Medalla Rafael Usón al Dr. Miquel Costas Salgueiro por su trayectoria excepcional y sus excelentes contribuciones en el

campo de la química organometálica, en particular en el estudio de modelos de oxigenasas, el desarrollo de métodos selectivos de activación de enlaces carbono-hidrógeno, la oxidación de agua y el diseño de sistemas supramoleculares metálicos

Premio GEQO a la Excelencia Investigadora al Dr. Julio Lloret Fillol por sus extraordinarias contribuciones al desarrollo de compuestos organometálicos para catálisis foto- y electroquímica de interés en síntesis orgánica, en generación de hidrógeno a partir de agua y en reducción de CO₂. También es muy destacable su labor en la transferencia de tecnología.

Premio GEQO a Jóvenes Investigadores a la Dra. Alba Collado Martínez por su destacada labor investigadora en el campo de la química organometálica durante su carrera científica, en particular en el desarrollo de complejos metálicos para catálisis.

Toda la información sobre los premiados se puede encontrar en <https://geqo.rseq.org/premios-geqo-2023/>.



Entrega de los Premios GEQO 2023. De izquierda a derecha Miquel Costas, Medalla Rafael Usón, Julio Lloret premio a la Excelencia Investigadora y Alba Collado, premio Jóvenes Investigadores

Jornada organizada por el Grupo Especializado en Didáctica e Historia de la Física y la Química (GEDH) el 6 de octubre de 2023

El pasado 6 de octubre tuvo lugar una reunión del *Grupo Especializado en Didáctica e Historia de la Física y la Química* (GEDH), común a las RSEQ y RSEF. Con el título de “**Jornada 6-10²³. Didáctica e Historia de la Física y la Química: de los conceptos a las situaciones de aprendizaje**”, se realizaba un homenaje al número de Avogadro, por tratarse de una fecha que puede asociarse a ese valor. Como curiosidad, se menciona que, en algunos países de habla inglesa, se celebra el “día del mol” cada 23 de octubre, entre las 6:02 a.m. y las 6:02 p.m., y suele anunciarse con el dibujo de algún topo simpático -Isaac Asimov indicó que, para saber si una persona es química de profesión, se le invite a leer la palabra “mole”, término polisémico en inglés que significa “topo” y “mol”. En español, por el modo habitual de indicar fechas, se puede celebrar solo cada cien años (cada 6/10/23); así que no dejamos desaprovechar la oportunidad.

En la organización de la Jornada colaboró la Universidad Politécnica de Madrid (UPM) –a través del Instituto de Ciencias de la Educación (ICE), la E.T.S. de Ingenieros Industriales (ETSII) y el Grupo de Innovación Educativa de Didáctica de la Química–.

Con una duración de 8 horas, se impartieron las ponencias: Iniciativas en didáctica de las ciencias (Gabriel Pinto Cañón), Innovación educativa en la didáctica de la química (María Martín Conde), Un caso peculiar en la historia de la ciencia: Las aportaciones de Elmer Imes (Mario González Jiménez),

Situaciones de aprendizaje basadas en historia de la ciencia (Luis Moreno), Situaciones de aprendizaje y metodologías activas: un ejemplo práctico (Víctor Montero Gil), Cómo abordar la enseñanza de los polímeros en las distintas etapas educativas (Victoria Alcázar Montero), Los proyectos educativos de la Confederación de Sociedades Científicas de España (COSCE) (María Belén Yélamos López), y El proyecto educativo europeo *Science on Stage* (Nuria Muñoz Molina). También se desarrollaron los talleres “Aprender haciendo: espectroscopía (José Benito Vázquez Dorrío) y “Ejemplos de aprendizaje práctico de la química” (José Antonio Martínez Pons).

Se contó con cerca de un centenar de asistentes, la mayoría docentes de diversas etapas educativas del ámbito nacional, pero con presencia también de profesorado de Argentina, Chile, Canadá e Irán. Se aprovechó el evento para celebrar la reunión de la Junta General del GEDH y para la entrega del Premio “Salvador Senent” al mejor trabajo científico especializado, de revisión o de carácter divulgativo, relacionado con la didáctica o con la historia de la física o de la química. Este premio recayó en Mario González Jiménez, por su trabajo “Elmer Imes, historia negra de los Estados Unidos y la espectroscopía”, publicado en la revista *Anales de Química*, Vol. 119 (1), pp. 25-31 (2023), como se anunció anteriormente en esta revista.

A su vez, se hizo entrega de los Premios “A la labor educativa: «Física y Química para el desarrollo sostenible»” (ver



Fig. 1. Asistentes a la Jornada en el vestíbulo de la ETSII en la Universidad Politécnica de Madrid.



Fig. 2. Gabriel Pinto y Mª Victoria Alcázar, presidente y tesorera del GE de Didáctica e Historia de la Física y la Química posan con uno de los carteles de la Jornada.



Fig. 4. Fotografía del taller impartido por José Antonio Martínez Pons.



Fig. 3. Mario González Jiménez, Premio “Salvador Senent”, recibe el diploma junto a: de izquierda a derecha, Chema Hernández, anterior tesorero y miembro del GE de Didáctica e Historia de la Física y la Química, Gabriel Pinto, presidente y Mª Victoria Alcázar, tesorera.

bases en: <https://short.upm.es/7krcrc>), que fueron los siguientes: Primer premio, a Benigno Palacios Plaza (“Una molécula, Un objetivo”, Colegio Santo Domingo Savio, Madrid); Segundo premio, a Estela Peral Elena, Olga Hernández González y María Jesús Olga García Moríñigo (“Formulación natural de cosméticos sólidos capilares utilizando plantas aromáticas: la convergencia de la física y la química en la búsqueda de soluciones sostenibles”, CIFP Rodríguez Fabrés, Salamanca); y Menciones de Honor a Antonio José Sánchez Arroyo (“Jabones solidarios - Gotas de aceite recicladas como gotas de salud”, Colegio Virgen de Atocha – FESD, Madrid), Desirée Serrano Ríos (“Abordando los ODS desde las STEM”, Colegio La Inmaculada, Algeciras, Cádiz), Elena Poncela Blanco y Beatriz Padín Romero (“Física, Química y Tecnología

para alcanzar los ODS”, Colexio Manuel Peleteiro, Monte Redondo - Castiñeirío, Santiago de Compostela, La Coruña), José Plaza Catalán y Juan Francisco Rodenas Juan (“Jóvenes investigadores en Física y Química: Un desarrollo sostenible es posible”, Colegio San José de la Montaña, Ceste, Valencia), y Miriam Pascual Martín y Luis Miguel Cabezas Clavo (“Física y Química para el desarrollo sostenible: 17 razones”, IES Ramón y Cajal, Valladolid). Los premiados tuvieron la oportunidad de exponer sus trabajos, lo que hicieron, incluso con la ayuda de alumnos protagonistas de los proyectos. Con estos premios, el GEDH ha pretendido destacar la tarea ejemplar del profesorado de Física y Química de enseñanzas no universitarias, en pro del desarrollo sostenible, así como difundir buenas prácticas para el futuro. Participaron en la convocatoria docentes de toda España, que presentaron trabajos de gran calidad, lo que dificultó la labor del jurado.

Aparte de momentos para la discusión y el conocimiento de experiencias educativas entre docentes de diversos entornos, cabe destacar que, durante el intervalo de descanso de la Jornada se aprovechó para que los participantes que quisieran, disfrutaran de un paseo por el entorno del centro en el que tuvo lugar. Con el nombre de “Los ‘altos del hipódromo’: una zona emblemática de la ‘Edad de Plata’ de la cultura española (1868-1936)”, guiados por alumnos de la UPM, se desarrolla esta actividad dentro de la modalidad educativa conocida como Aprendizaje-Servicio.

Más detalles de la Jornada se recogen en <https://gedh.rseq.org/actividadesgedh>. Muy bien valorada por los asistentes, como se recoge en la encuesta que hizo para su evaluación el ICE de la UPM, se trató de un evento intenso en actividades, que permitió conocer muchas iniciativas y actividades de interés para docentes de Física y Química de las distintas etapas educativas.

GABRIEL PINTO CAÑÓN
Grupo Especializado de Didáctica e Historia
de la Física y la Química (GEDH) de las Reales
Sociedades Españolas de Física y de Química.

PREMIOS NACIONALES DE INVESTIGACIÓN

Jesús Jiménez Barbero, Premio Enrique Moles




Jesús Jiménez Barbero

Jesús Jiménez-Barbero es profesor de investigación Ikerbasque y director científico de CIC bioGUNE desde 2014, en el que ha liderado su reconocimiento como Centro de Excelencia Severo Ochoa en 2017 y 2022. Se doctoró en 1987 en La Universidad Autónoma de Madrid, trabajando en el Instituto de Química Orgánica General (IQOG-CSIC). Entre 1986 y 1992 desarrolló su labor investigadora en el CERMAV-CNRS (Grenoble); Univ Zurich; Instituto Nacional de Investigación Médica (Reino Unido) y Universidad Carnegie Mellon (EE. UU). Antes de trasladarse a CIC bioGUNE, fue profesor de investigación del CSIC en el Centro de Investigaciones Biológicas (CIB, 2002-14). Anteriormente fue científico titular (1988-96) e investigador científico (1996-2002) en el IQOG.

Ha sido profesor invitado en la École Normale Supérieure de París (2004), Sorbona (2008), Universidad Milano Bicocca (2009-2011) y en la Universidad del País Vasco (EHU/UPV, 2016-2023).

Desde la perspectiva de gestión, ha sido presidente de la Real Sociedad Española de Química (2011-2017) y de la International Carbohydrate Organization (2012-2014). También fue gestor del panel de Química del Plan Nacional de Investigación del Ministerio de Ciencia (2009-18).

Sus intereses científicos se centran en la Biología Química, en el descubrimiento de las bases moleculares del reconocimiento de glicanos por receptores biológicos, utilizando un enfoque multidisciplinar de síntesis química, bioquímica de proteínas y biología molecular, biofísica, modelado molecular y Resonancia Magnética Nuclear. Sus estudios sistemáticos sobre las interacciones de glicanos con lectinas han contribuido a nuestra comprensión general de las interacciones mediadas por los glicanos en salud y enfermedad han sido difundidos en más de 600 publicaciones y más de 300 conferencias invitadas y han sido reconocidos con numerosos premios a escala nacional e internacional. Ha supervisado


hasta la fecha 36 Tesis Doctorales y más de 50 colaboradores postdoctorales. Sus avances más recientes emplean sondas activas de RMN para examinar el reconocimiento molecular *in vitro* y en células. Con esta propuesta recibió la ERC Advanced Grant (2018-2024).  [0000-0001-5421-8513](https://orcid.org/0000-0001-5421-8513)

Silvia Osuna Oliveras, Premio María Teresa Toral



Silvia Osuna Oliveras

Silvia Osuna se doctoró en 2010 por la Universidad de Girona (UdG) en el Institut de Química Computacional (IQC). En 2010, se trasladó al grupo del Prof. Houk en la Universidad de California, Los Ángeles (UCLA) con una beca postdoctoral Marie Curie. Desde 2018, Osuna es profesora de investigación ICREA en el Institut de Química Computacional i Catalàlisi (IQCC) de la UdG. Su grupo fue creado gracias al proyecto otorgado del Consejo Europeo de Investigación de 2015 – Starting Grant (ERC-2015-StG-679001) centrado en el desarrollo de nuevas herramientas y enfoques computacionales para el diseño racional de enzimas para su uso industrial. Silvia cuenta con más de 95 publicaciones de investigación, y ha sido galardonada con el premio talento joven 2023 de la Sociedad Catalana de Química (SCQ), el premio 2022 Marcial Moreno de la delegación Catalana de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ), el premio Europeo EuChemS Lecture Award 2021, el Premio Nacional de Investigación – Joven Talento 2019 de la Fundación Catalana de Recerca i Innovació (FCRI), el Premio Joven Investigador de Lilly y la RSEQ (2019), el premio al talento joven de la RSEQ 2016, y premio investigación de la Fundación Princesa de Girona (FPdGi 2016), entre otros. Actualmente su grupo está financiado por el proyecto del Consejo Europeo de Investigación - Consolidator Grant (ERC-2022-CoG-101088032) centrado en el diseño de enzimas eficientes mediante estrategias computacionales rápidas, ERC- Proof of Concept (ERC-2022-POC-101112805), dos

proyectos de investigación del Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2021-129034NB-I00, PDC2022-133950-I00), y el proyecto internacional del programa Human Frontier Science Program Grant (RGPO054/2020).  [0000-0003-3657-6469](#)

Javier García Martínez, Premio Juan de la Cierva



Javier García Martínez

Presidente de la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada para el bienio 2022-2023. Anteriormente, Javier ha sido miembro del Comité Ejecutivo de la IUPAC y vicepresidente de su División de Química Inorgánica.

Catedrático de química inorgánica y director del Laboratorio de Nanotecnología Molecular de la Universidad de Alicante (UA) donde ha desarrollado una extensa labor docente e investigadora en nanomateriales y en su aplicación en el sector energético.

Catedrático de la Fundación Rafael del Pino en la que dirige el informe "Diez tecnologías para impulsar España". Esta hoja de ruta para poner a la ciencia en el centro de la agenda política, económica y social de nuestro país. Coordinador del libro "España a Ciencia Cierta"


Miembro del Consejo de Tecnologías Emergentes del Foro Económico Mundial del que fue vicepresidente en 2011. Actualmente en miembro de la Red de Expertos del Foro Económico Mundial.

Fundador de la empresa de base tecnológica Rive Technology, que comercializa la tecnología que desarrolló durante su estancia postdoctoral Fulbright en el Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT). Los catalizadores desarrollados por Javier se utilizan en varias refinerías aumentando sensiblemente la eficiencia del proceso y reduciendo las emisiones de CO₂.

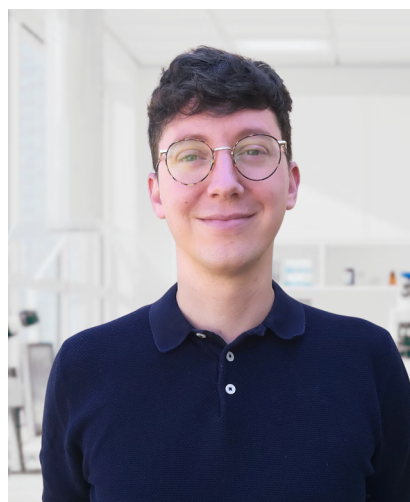
Fundador y presidente de Celera, un programa de apoyo al talento en España que selecciona cada año diez jóvenes excepcionales para darles recursos, formación y grandes

oportunidades. Setenta jóvenes han participado ya de este programa creado por Javier con la Fundación Rafael del Pino y en el que colaboran varias empresas e instituciones españolas.

Presidente de la Academia Joven de España, corporación de derecho público creada por el Gobierno de España en febrero de 2019 de la que forman parte 30 de algunos de los mejores investigadores jóvenes de nuestro país. Sus objetivos son reconocer y dar visibilidad a los mejores científicos jóvenes españoles y proponerlos como referentes para el fomento de las vocaciones científicas y técnicas, especialmente entre las mujeres.

El liderazgo científico y empresarial de Javier ha sido reconocido con algunos de los premios más importantes. En junio de 2014, le fue otorgado el Premio Rey Jaime I en su categoría de Nuevas Tecnologías y desde 2015 es el primer español en recibir el Premio al Investigador Emergente de la de la American Chemical Society. En verano de 2017, Javier fue reconocido por la misma organización como el mejor emprendedor de EE. UU. en el sector químico. Javier es Fellow de la Royal Society of Chemistry y el primer español Fellow de la American Chemical Society. Javier es doctor honoris causa por la universidad de La Rioja.  [0000-0002-7089-4973](#)

Miguel Ángel Mompeán García, Premio Margarita Salas



Miguel Ángel Mompeán García


Miguel Mompeán, con dos licenciaturas en Química (2010) y Bioquímica (2015), así como un Máster Europeo en Química Teórica y Modelado Computacional, ha forjado una carrera notable en el campo de la Biofísica. Ingresó al Instituto de Química Física Blas Cabrera (IQF-CSIC) en 2011, obteniendo su doctorado internacional en Biofísica en 2015 por la Universidad Autónoma de Madrid. Durante este periodo, se especializó en la resonancia magnética nuclear de proteínas y técnicas biofísicas, fusionando esta experiencia con su interés en enfoques computacionales para

abordar la compleja pregunta biológica del ensamblaje de proteínas.

Tras un periodo de formación postdoctoral en técnicas avanzadas de RMN, incluyendo implementación de hardware, diseño de microbobinas, biosólidos y técnicas de hiperpolarización, Miguel obtuvo el primer puesto en el programa Juan de la Cierva-Incorporación (Convocatoria 2018, categoría de Biociencias y Biotecnología) y una beca Junior Leader de la Fundación la Caixa, reincorporándose al IQF-CSIC como Investigador Principal Júnior.

Esto le permitió iniciar una nueva línea de investigación para estudiar amiloides homólogos y heterólogos, así como otras formas ensambladas de proteínas, utilizando una combinación única y poderosa de técnicas de RMN en disolución y en estado sólido, junto con una variedad de enfoques computacionales, buscando concordar teoría y experimento en la búsqueda de respuestas biológicas relevantes y nuevos métodos.

Esta línea de investigación fue consolidada en 2020, cuando Mompeán fue galardonado con un contrato Ramón y Cajal, obteniendo el tercer puesto más alto en la categoría de Biociencias y Biotecnología (Convocatoria 2019) y posteriormente con un proyecto "Starting Grant" del Consejo Europeo de Investigación (ERC, convocatoria 2021). Actualmente, Miguel Mompeán está a la espera de nombramiento como Científico Titular (OEP 2020-2021).

Miguel Ángel Mompeán ha sido galardonado con el Premio Nacional de Investigación para Jóvenes "Margarita Salas" por "su visión innovadora y multidisciplinar de la biología, aplicando técnicas en la vanguardia de la química y biología estructural. Ha sido pionero en la combinación de la espectroscopía de RMN en disolución y de biosólidos para la caracterización de la formación de condensados biomoleculares y su conversión a amiloides, abriendo nuevas vías de diagnóstico y tratamiento de patologías asociadas al envejecimiento celular e infecciones virales."  [0000-0002-5608-3648](https://orcid.org/0000-0002-5608-3648)

Entrega de los Premios Rei Jaume I a los Profs. Antonio M. Echavarren y Daniel Maspoch

El pasado día 28 de noviembre su Majestad el Rey presidió la ceremonia de entrega de los “Premios Rei Jaume I” a Antonio Echavarren, en la categoría de Investigación Básica; y a Daniel Maspoch, en Nuevas Tecnologías.

La entrega de los premios tuvo lugar en el Salón Columnario de la Lonja de los Mercaderes. Unas breves palabras de la alcaldesa de Valencia, otras del presidente de la Fundación Valenciana “Premios Rei Jaume I” y la proyección de un vídeo sobre los premiados dieron paso a la lectura del acta de concesión de los premios. Tras ello, Su Majestad el Rey hizo entrega de las medallas. Finalizado el acto de entrega de los galardones, Alfonso Jiménez, Premio Rey Jaime I 2023 al Emprendedor; tuvo unas palabras de agradecimiento en nombre de todos los premiados, asimismo, Don Felipe, afirmó “un año más, quiero destacar la inestimable labor de la Fundación Valenciana Premios Rei Jaume I que, con la organización de estos premios, lleva más de tres décadas fomentando la excelencia científica de una manera innovadora y emprendedora en nuestro país, al servicio del bienestar y el desarrollo humano; contribuyendo también a crear una sociedad más consciente, que reivindique los recursos, los medios y el tiempo que la ciencia necesita”.

Antonio M. Echavarren Pablos, ha recibido este galardón en reconocimiento a sus contribuciones a la química orgánica, particularmente en desarrollo de procesos catalíticos con compuestos de oro. Doctor en Química por la Universidad Autónoma de Madrid, Antonio Echavarren es director científico del programa Severo Ochoa del Instituto Catalán de Investigaciones Químicas, profesor de investigación del CSIC y presidente de la Real Sociedad Española de Química.

Por su parte, Daniel Maspoch Comamala ha sido galardonado por su trabajo centrado en el avance de la Nanotecnología y en el diseño y desarrollo de materiales reticulares porosos y sistemas de liberación de sustancias para distintas aplicaciones, particularmente en la administración de fármacos. Daniel Maspoch es profesor de Investigación ICREA, jefe del Grupo NanoQuímica y Materiales Supramoleculares del Instituto Catalán de Nanociencia y Nanotecnología (ICN2).

Desde estas líneas, damos nuestra más sincera enhorabuena a Antonio y a Daniel. Es un reconocimiento a su buen hacer y a la química de excelencia que se hace en España por lo que es motivo de alegría para toda la comunidad química.



En la imagen: Su Majestad el Rey Don Felipe VI y los premiados. Foto tomada de: Torres, D. [Fotos de la entrega de los premios Jaume I 2023](#). *Las Provincias*, 28 nov. 2023.

El Prof. Peter Seeberger recibe el premio RSEQ Elhuyar-Goldschmidt 2022

El Prof. Peter H. Seeberger del *Max-Planck Institute for Colloids and Interfaces* (Potsdam, Alemania) recibió el pasado lunes 27 de noviembre el premio Hispano-Alemán Elhuyar-Goldschmidt 2022 otorgado por la Real Sociedad Española de Química. La ceremonia tuvo lugar en el Centro de Investigaciones Biológicas Margarita Salas del CSIC donde impartió la conferencia titulada: "Automated Glycan Assembly Enables the Glycosciences". Sonsoles Martín Santamaría, Secretaria General de la RSEQ, y Javier Cañada Vicinay, ex-Presidente del Grupo Especializado de Hidratos de Carbono (GEHiC) hicieron la entrega del galardón.

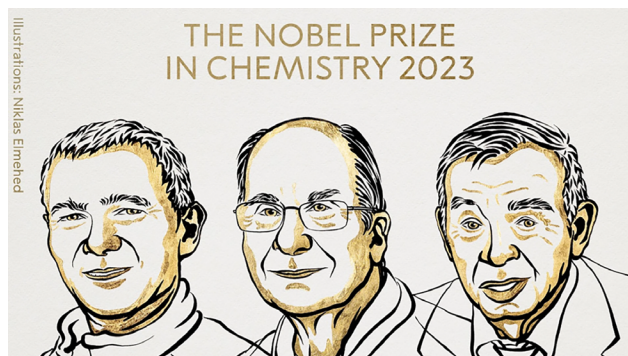
Con motivo del premio se organizó un *tour* en el que el Prof. Seeberger visitó, además del CIB-CSIC en Madrid, el IIQ-CSIC en Sevilla, el CIC bioGUNE en Bilbao, el CIC bio-maGUNE en San Sebastián y el Instituto Químico de Sarrià en Barcelona. El *tour* estuvo coordinado desde el GEHiC.

El premio 'Elhuyar-Goldschmidt' instituido conjuntamente por la Sociedad Química Alemana y la RSEQ, tiene como objetivo reconocer la investigación científica con proyección internacional que se realiza en Alemania y España en cualquiera de sus áreas. Se concede en España en los años pares y en Alemania en los impares.



En la imagen: El Prof. Seeberger recibe el premio de manos de Sonsoles Martín Santamaría, Secretaria General de la RSEQ, y de Javier Cañada Vicinay, ex-Presidente del GEHiC.

Premio Nobel de Química 2023: descubrimiento y síntesis de puntos cuánticos



Mounqi G. Bawendi, Louis E. Brus y Alexei I. Ekimov

El premio Nobel de Química 2023 ha sido otorgado a Mounqi G. Bawendi, Louis E. Brus, y Alexei I. Ekimov "por el descubrimiento y la síntesis de los puntos cuánticos". Estos nanocristales, cuyas propiedades varían según su tamaño, representan un régimen intermedio entre los materiales macroscópicos y aquellos compuestos por pocos átomos, mostrando propiedades distintivas. En realidad, ya en el siglo XIX Michael Faraday, considerado por muchos el padre de la Nanoquímica, intuyó y argumentó que el cambio de colores que observaba en sus preparaciones de metal tenía que ver con su tamaño en relación con la longitud de onda de la luz incidente. En el siglo XX, en concreto en 1937, H. Fröhlich teorizó sobre la dependencia de ciertas propiedades de los metales con el tamaño, una idea más tarde ampliada por V. B Sandomirskii, quien sugirió que estos efectos serían más notorios en materiales semiconductores. Estas predicciones, sin embargo, no se confirmaron experimentalmente hasta la década de 1980.

Ekimov y Brus han sido galardonados por descubrir estos sistemas en vidrios coloreados y dispersiones coloidales

de nanocristales en medios líquidos. Aunque aparentemente temáticas alejadas, la preparación de ambos sistemas muestra aspectos comunes, como la difusión de los precursores para iniciar la formación de núcleos y su posterior crecimiento, bien sea dentro de una matriz vítrea o en un medio líquido, como el disolvente en las dispersiones coloidales. Ekimov y sus colaboradores investigaron cómo los dopantes y tratamientos térmicos modificaban el color de los vidrios, centrándose en el sistema CuCl. Mediante espectroscopía óptica de absorción UV-VIS y dispersión de Rayos X a bajo ángulo, demostraron que las variaciones de color se debían a diferencias en el tamaño de los cristales de CuCl nanométricos embebidos en la matriz vítrea.

Por otro lado, Louis Brus, ajeno a los trabajos publicados por Ekimov, estudiando la fotocatalisis de dispersiones de cristales de CdS, observó cambios en los espectros de absorción relacionados con el tamaño de las partículas. Brus identificó correctamente este efecto en un contexto de confinamiento cuántico, aunque sin un control preciso del tamaño de los cristales. Poco después, Brus publicó un trabajo en el que nos dejó uno de sus legados: la conocida "Ecuación de Brus", que nos permite calcular el valor de la energía de la banda prohibida del semiconductor en función de su tamaño, temática en la que Alexander Efros ha contribuido sustancialmente al campo desde aquella época.

Mounqi G. Bawendi, en 1993, junto con D.J. Norris y C.B. Murray realizó una contribución trascendental al sintetizar estos nanocristales de manera controlada en medio líquido, facilitando enormemente su posterior manipulación, fuera de la matriz de los vidrios de Ekimov. Los autores de este artículo seminal publicado en el "Journal of the American Chemical Society" aplicaron los principios de nucleación y crecimiento, inicialmente desarrollados por La Mer y colaboradores para sintetizar coloides submicrométricos de sílice, a la síntesis de cristales nanométricos de calcogenuros de

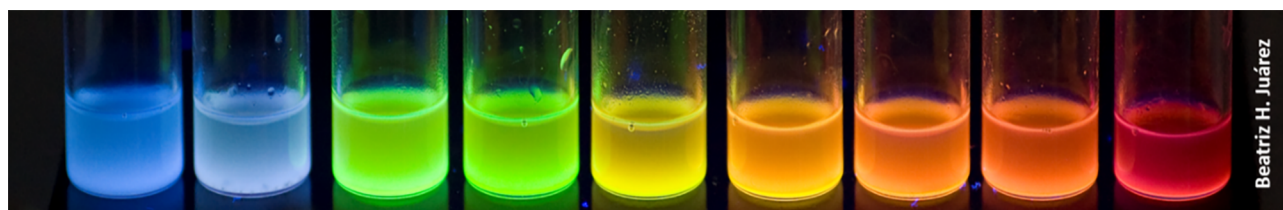


Figura 1. Viales conteniendo dispersiones coloidales de nanocristales de CdSe en medio líquido, de tamaño creciente (de izquierda a derecha), desde un tamaño medio de 2 nm hasta un tamaño medio de 5 nm, obtenidos mediante una síntesis por inyección en caliente y excitados ópticamente con una lámpara UV.

cadmio. Esta metodología (conocida como síntesis de inyección en caliente) ha permitido controlar tamaño, forma y morfología de estos sistemas, con una estrecha distribución de tamaños, abriendo nuevas vías para el estudio y aplicaciones prácticas.

El efecto de confinamiento cuántico es evidente en los nanocristales de CdSe sintetizados siguiendo el método de la inyección en caliente que se muestran en la **Figura 1**. La imagen muestra viales con dispersiones coloidales de nanocristales de CdSe excitadas ópticamente, y cuyos tamaños varían entre aproximadamente 2 nm (azul) y 5 nm (rojo). El alto brillo y definición del color captó rápidamente la atención de la industria de pantallas, integrando estos nanocristales en televisores planos apenas dos décadas después. Las aplicaciones de los puntos cuánticos, la mayoría de ellas aún por explotar industrialmente, se extienden a la fotocatalisis, la fabricación de células y concentradores solares, fotodetectores, iluminación, láseres excitados óptica y eléctricamente, sensores, computación cuántica o nanomedicina. En esta temática, mencionar que, en 1998, los grupos de P. Alivisatos

y S. Nie, de manera independiente, demostraron que estos nanocristales, tratados adecuadamente, son biocompatibles y capaces de atravesar la membrana celular. Esto ha abierto una plétora de posibilidades para el diagnóstico de enfermedades, la liberación de fármacos, la terapia, la imagen médica, o el potencial para monitorizar señales eléctricas neuronales.

En resumen, la relación entre las propiedades ópticas y el tamaño en nanocristales semiconductores ha desencadenado numerosas investigaciones científicas y oportunidades de aplicación práctica. Desde una perspectiva sintética, el trabajo pionero de Bawendi y sus colaboradores en 1993 ha simplificado considerablemente la fabricación de diversos materiales a escala nanométrica con exquisito control sobre su morfología, tamaño y distribución del mismo. Esta metodología sintética coloidal incluye no solo semiconductores, sino también metales y dieléctricos, abriendo así la puerta a una multitud de nuevos materiales, muchos de los cuales aguardan aún ser descubiertos en términos de potenciales futuras aplicaciones.

BEATRIZ H. JUÁREZ
Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid

Reseñas

Historias de una ferretería: Aceite de linaza, cinabrio y un cerdo que comía margaritas

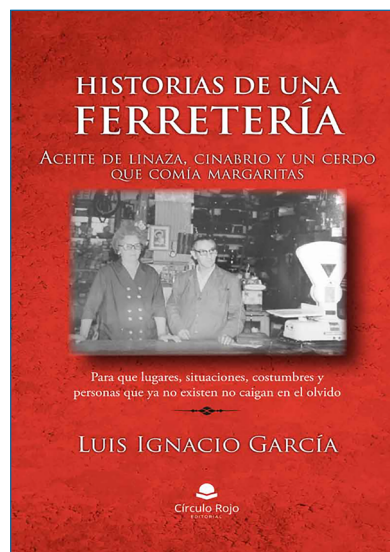
Luis Ignacio García

Luis Ignacio García González es licenciado en Ciencias Químicas y ha ejercido, durante tres décadas y media, como profesor de educación secundaria de Física y Química. Es muy conocido a nivel nacional e internacional por la web <https://fisquiweb.es/> en la que incluye, con gran entusiasmo, un buen número de recursos para la enseñanza de esas dos ciencias. Su tarea ha sido ampliamente reconocida. Por ejemplo, en 2014 recibió el premio de la RSEQ a la *Tarea Educativa y Divulgativa a Profesores de Enseñanzas Preuniversitarias* y, cuatro años después, recibió el *Premio Enseñanza y Divulgación de la Física (Enseñanza Secundaria)* por parte de la RSEF-Fundación BBVA.

Hace unos meses público este interesante libro en la editorial Círculo Rojo (ISBN 978-84-1175-505-4), del que van ya tres ediciones. En él nos describe, a través de sus recuerdos de niñez, cómo transcurría la vida en su villa natal, Luanco (Asturias), en los años sesenta y principios de los setenta del pasado siglo. Con los correspondientes matices, todo era similar a lo que ocurría en cualquier pueblo y pequeña ciudad de España: en aquella época, la televisión estaba en sus albores, y los niños se educaban, aparte de en el colegio, en la calle y en casa, tratando de buscar soluciones y encontrar explicaciones a lo que iban descubriendo en sus ambientes cotidianos.

El libro se titula *Historias de una Ferretería* porque comienza, con gran gracejo, describiendo todo lo que se encontraba en la ferretería que regentaban sus padres. Así, nos describe desde la bomba aspirante que se usaba en los años cuarenta para servir el aceite hasta restos de instrumentos de un barco donde había trabajado su padre, en sus años jóvenes, antes de montar la ferretería.

La tienda incluía también un recinto, conocido como "cuarto de pintura", en el que había productos como aguarrás (*esencia de trementina*, como se aclara en el texto), aceite de linaza cocido (del que, aparte de su composición, el autor nos indica que tiene efectos fungicidas y antimicrobianos) o albayalde (del que no nos deja sin explicar que su nombre procede de su color –blanco– en árabe y que es carbonato básico de plomo, con fórmula incluida). De este pigmento se señala que hasta pintores destacados, como Rubens y Goya, lo utilizaron sin ninguna precaución a pesar de su toxicidad y que se empleaba también en cosmética. Es curiosa también la descripción de los compuestos de cadmio, mercurio, etc. que se usaban para dar color. Ese cuarto tenía, a los ojos del autor, algo de laboratorio, dado que se hacían allí las "operaciones básicas de los procesos químicos" para la preparación de pinturas. Incluye cómo allí consiguió



Fecha de Publicación: 6/2023
ISBN: 978-84-1175-505-4
Páginas: 208
Editorial: Círculo Rojo
Precio: 17,00€

fabricar pólvora (con gran disgusto de los vecinos). Provoca ternura cuando indica que, con doce o trece años, intentó reproducir el experimento de Lavoisier, citado por su profesora, con el que el genial francés obtuvo oxígeno, calentando un óxido rojo de mercurio. Luis Ignacio lo intentó con el pigmento bermellón, preparado a partir de cinabrio (HgS) y obtuvo unas gotitas de mercurio. Se ilustran algunos objetos y materiales, como una lámpara de carburo (tan usada por los mineros), aprovechando para explicar que se trataba de carburo de calcio y especificando cómo en contacto con agua se desprendía acetileno que, al prenderse, daba una llama muy luminosa.

Aparte de la tienda y el *cuarto de la pintura*, el libro se completa con otros diez capítulos en los que se describe también el barrio, el trabajo en la tienda, sus familiares, el lugar donde estaba situada la tienda (el Corral) junto al mar con todos los fenómenos marinos y la importancia de la pesca en la época, los lugares de ocio (como circos y comedias), las fiestas y vivencias religiosas, la importancia de los cines y la llegada de la televisión, la escuela, el instituto, y el trascurso de los veranos.



Luis Ignacio García González, autor del libro reseñado.

Al tratar sobre la casa de dos entrañables tías, describe cómo le gustaba observar el comportamiento de las gotas de agua al caer sobre la superficie metálica de la cocina de carbón, produciendo una “desenfrenada y errática carrera, perdiendo volumen rápidamente, hasta que se desvanecían en una nube de vapor dejando una pequeña mancha”. Y lo explica, con la mayor naturalidad, indicando que se trata del “efecto Leidenfrost”, que pasa a justificarnos. También nos explica, a partir de esa casa, las deficiencias asociadas a los braseros de las mesas camilla de entonces. Estas deficiencias abarcaban desde problemas circulatorios por el excesivo calor en las piernas, o los incendios producidos con los faldones, a la producción del peligroso monóxido de carbono por combustión incompleta si sobre las brasas del carbón se acumulaban cenizas, impidiendo la llegada del oxígeno necesario. Y de eso se pasó a las estufas ‘catalíticas’, más seguras pero menos apreciadas al principio porque “no calentaban igual”, y que estaban basadas en la combustión del butano que, como en las cocinas, fue sustituyendo al carbón.

En el capítulo dedicado a los cines y la llegada de la televisión, destaca la impresión que le produjeron los programas de divulgación científica (como *Misterios al descubierto*) del profesor Luis Miravittles, que empezaban con la frase: “saber es útil, soñar es necesario” y donde este afamado divulgador llegó a predecir que, en cuestión de veinte años, habría una terminal universal de comunicación, anticipando así el teléfono móvil e internet.

Al tratar sobre su escuela, el autor alude a los famosos dictados, que servían para aprender a escribir correctamente,

te, y a la utilización de la enciclopedia Álvarez, con contenidos que permitían aprender “de todo”. Y sin tanta ilustración como los libros de texto actuales, en los que las imágenes, con frecuencia, no tienen mucha relación con el texto. En dicho capítulo, el autor aprovecha, cuando se refiere a la típica foto escolar de la época, para señalar: “no deja de ser un misterio cómo una emulsión de puntos de plata ennegrecida al recibir la luz pueden recoger la limpieza de la mirada de un niño”, o de cómo coloreó pacientemente la parte superior de una peonza con los siete colores del arco iris, para observar lo explicado en clase sobre el experimento de Newton al girar un disco con esos colores. Nos explica también cómo superó, con nueve años de edad (uno antes de lo legislado), el examen de ingreso al Instituto Técnico de Enseñanza Media, donde se impartía Bachillerato Laboral. En este Bachillerato, además de materias de ciencias y letras había talleres, a los que se asistía con un mozo azul oscuro, en los que se trabajaba el metal y la madera. También se disponía de un laboratorio donde se podían ver aparatos de física, contemplar reacciones químicas y comprobar efectos como la avidez del ácido sulfúrico por el agua o la formación de las burbujas de hidrógeno cuando se echaba una lámina de zinc dentro de dicho ácido.

Muchas aclaraciones físicas y químicas se realizan a través de más de cien notas a pie de página, en la que se explican también términos asturianos, de la pesca, y de aspectos de la época incluidos en el texto.

El gran divulgador científico Oliver Sacks, sin ser químico, sino neurólogo, en su libro *Uncle Tungsten: memories of a Chemical Boyhood*, traducido en español (obviando lamentablemente la denominación de wolframio) como *El tío tungsteno: recuerdos de un químico precoz*, introduce muchas curiosidades y conceptos de química, como cuestiones que le maravillaban en su niñez sobre la tabla periódica. Todo ello desde la evocación de la fábrica de bombillas, hechas con filamentos de wolframio (descubierto por los hermanos Elhuyar), de su tío Dave. Podemos afirmar que la obra de Luis Ignacio le hace merecedor de una comparación a la altura del libro de Sacks; también él, a través de la evocación a su infancia y el trabajo de sus padres en la ferretería, es capaz de explicarnos su amor por la ciencia y, en concreto, por la física y la química. Es por todo ello un libro que se considera ideal para profesores y alumnos de todas las edades, además del público general. Los lectores descubrirán por qué en el subtítulo se alude a “un cerdo que comía margaritas” y, con toda seguridad, disfrutarán con la lectura de algo más de 200 páginas llenas de ciencia, humanidad y ternura.

MANUELA MARTÍN SÁNCHEZ Y GABRIEL PINTO CAÑÓN
Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física
y la Química (GEDH) de las Reales Sociedades Españolas
de Física y de Química.

RADICALES (MUY) LIBRES



J. de Mendoza

Catedrático jubilado de Química Orgánica
(Universidad Autónoma de Madrid)
Profesor Emérito, Instituto Catalán
de Investigación Química
(ICIQ, Tarragona)
C-e: jmendoza@iciq.es

Transparencia

Hubo un tiempo, no hace tanto, en que los políticos eran admirados cuanto más claro y transparente era su discurso ante los ciudadanos, cuanto más fiables eran su palabra y sus compromisos. Hablábamos entonces de estadistas, capaces de conectar con la población, aunque les dieran malas noticias o les exigieran sacrificios, porque eran coherentes con su propias ideas, comportamiento y vida personal. Todo empezó a cambiar cuando, apenas sin darnos cuenta, surgieron a nuestro alrededor como setas las puertas giratorias y las promociones injustificadas a cargos diversos, todas bien remuneradas, en pago a servicios prestados. El fenómeno era transversal, y afectaba tanto a los grandes partidos como a los minoritarios. La gran mayoría de nombramientos eran para cargos que poco o nada tenían que ver con los conocimientos o capacidades de los así premiados, obligados por ello a rodearse de una corte de asesores, casi todos anónimos, que impidieran que el titular del cargo metiera la pata continuamente. Y esta contradicción entre el cargo y la función a desarrollar se ha normalizado ya totalmente, extendiéndose desde cuotas partidistas, de género o de compromisos territoriales, hasta nombramientos en consejos de administración de grandes empresas del sector privado, casi siempre tras haber pasado por un cargo relacionado con las actividades de estas. Los tímidos intentos de regular el abuso de esas llamadas puertas giratorias han sido cosméticos y totalmente ineficaces, no sirviendo de nada, lo que ha proyectado una imagen de corrupción sistémica nada edificante en un país que se proclama a sí mismo como una de las democracias más avanzadas del planeta.

En definitiva, nos hemos acostumbrado a la propaganda y el marketing político, a la falta de transparencia y a la opacidad en el comportamiento de nuestros políticos. Desde la oposición se critica todo con una ferocidad que desaparece como por encanto en cuanto el que critica alcanza también el poder. Los partidos políticos se han convertido en reinos de taifas que controlan el comportamiento de sus militantes y parlamentarios, castigando e incluso declarando tráfugas a cuantos se atreven a votar ocasionalmente en contra del partido, o simplemente a expresar una opinión discrepante en público o ante sus órganos internos. Yo pediría a nuestros políticos, que disponen de abundante tiempo libre, que hicieran algo de bibliografía leyendo nuestra Constitución para comprobar a quién pertenece un escaño o a comparar

nuestra cámara legislativa con lo que pasa en el parlamento británico, sin ir más lejos. También por razones económicas. Si todos los de un partido han de votar al unísono, como en Fuenteovejuna, bastarían muchos menos, ya lo hicieron sabiamente los italianos recientemente, pues la disciplina férrea sin debate lleva a concluir que incluso unos pocos representantes por grupo, respetando la cuota de participación que cada partido haya alcanzado electoralmente, podrían desarrollar las mismas leyes que ahora requieren 350 escaños, ya que los debates pocas veces sirven para mejorar un proyecto, pues está comprobado que la mayoría de la cámara permanece muda toda la legislatura, sólo aplaudiendo a los suyos, abroncando a los adversarios, o apretando el dedo en las votaciones. Deberían dejar más libres a sus parlamentarios, de no hacerlo podrían acabar siendo irrelevantes y enviados de regreso a sus casas.

Esta (poco) breve introducción parece bastante alejada del objetivo científico de mi columna, pero veremos pronto que la ciencia también tiene cosas que ocultar, y que los científicos, como seres humanos, también nos comportamos a veces de forma oscura o cuando menos, poco transparente. En nuestro descargo, al menos nos diferenciamos de los políticos en la forma de razonar, porque nuestros argumentos y justificaciones se basan en hechos experimentales que se pueden refutar y a veces corregir. Para ilustrar el *link* que pretendo establecer, es obvio que ninguna revista científica admitiría un cambio de conclusiones sobre unos resultados publicados sin ninguna evidencia experimental adicional, propia o de otro autor, que abriera paso a nuevas hipótesis. Los debates en las sociedades científicas de siglos pasados, cuestionando los descubrimientos de sus ilustres miembros, se basaban en creencias guiadas por la vanidad, la rivalidad, la envidia o la religión, no en evidencias experimentales. Sobran ejemplos en astronomía, biología, química y física, sin ir más lejos. Ninguno de esos debates superaría el filtro de unos evaluadores actuales. Sin embargo, fuera de la ciencia, en política se puede convencer fácilmente de cualquier asunto a los ciudadanos, mediante propaganda y argumentos que nada tienen que ver con el motivo real de la propuesta, por la escasa memoria que conservan y el hartazgo y desinterés que muestran por los políticos y sus manejos.

El ejemplo más inmediato, y más arriesgado de comentar, pero no el único, es la ley de amnistía que comienza a

tramitarse estos días en el Congreso. Usaré una argumentación basada en hechos, la propia del método científico, como si fuera un observador imparcial que nos estuviera mirando desde el espacio. Es obvio que no soy imparcial, como casi nadie lo es, pues al margen de la oportunidad o no de aprobar ese proyecto, creo que los acusados de delitos nunca deberían ser quienes negocien y redacten el borrador de una ley que les beneficie. Pero detengámonos por un momento en las razones esgrimidas. Las de pacificación, normalización o convivencia no son argumentos científicamente pertinentes, pues nadie tiene conocimiento de que haya habido cambios relevantes en esos aspectos durante los últimos meses en el país, y el mismo gobierno que propone ahora cambiar de criterio estaba radicalmente (y debería subrayar esa palabra) en contra de aplicar dicha medida antes de las últimas elecciones generales. No me imagino a ningún evaluador aceptando la publicación de un artículo porque su autor justificara su urgencia al ser ya más relevante y apremiante que unos meses antes, sin que nada nuevo en su campo lo justificara, más allá del interés del autor en incrementar su currículum de inmediato. A nadie se le escapa que la verdadera razón para tramitar la ley de amnistía, por vía de urgencia y sin los informes jurídicos previos habituales, es que la situación ha cambiado, porque el gobierno saliente necesitaba apoyos para seguir gobernando, y de ese modo evitar que gobernara la oposición. Este sí que es un argumento perfectamente válido y sincero políticamente hablando, no es más que hacer de la necesidad virtud, o dicho de forma menos romántica, porque el fin justifica los medios. Por fin se acepta esa verdad con la boca pequeña, aunque sigan insistiendo en los beneficios sociales de la medida. El problema de tal argumento es que viene a decirnos que no nos podemos permitir que cambie este gobierno autodenominado progresista, llegando incluso algunos a proclamar que eso debería continuar así para siempre, que no vuelvan a gobernar jamás los del otro lado, sin dar un paso atrás. En esencia, negando la alternancia política como uno de los pilares de la democracia, y proclamando este gobierno como el único aceptable y democrático, lo que es una de las características principales de las autarquías. Quienes peinamos canas sabemos bien lo que eso significa.

Si a todo lo anterior unimos la opacidad, la ausencia de información en tiempo y forma a la ciudadanía, con la excusa de que las negociaciones han de ser discretas, y la descalificación de todo aquel que pretenda argumentar en contra, tendremos el círculo completado. ¿Pasa algo de eso también en la ciencia? Por supuesto, no de forma tan exagerada, pero a lo largo de cinco años, en mis ya veinte entregas de esta columna de *Radicales (muy) libres*, he insistido en señalar algunos de los casos más frecuentes de falta de transparencia, con continuas analogías entre lo que ocurre en el mundo científico y el que no lo es, todo ello adornado a veces con balsámicos toques de humor e ironía. Así, han desfilado por ellas los problemas de endogamia universitaria, o de resultados que no se divulgan porque los experimentos no han salido según lo previsto, o de suprimir en un artículo

los casos que no funcionan porque pondrían en peligro la publicación del manuscrito. Eso impide que otros renuncien a emprender esas vías fallidas, al ignorar su existencia. También he hablado de las continuas carreras entre grupos de científicos para ver quien llega antes a la meta y se lleva la gloria de un hallazgo que varios persiguen, sin compartir información entre ellos y con un secretismo como los que más arriba he denunciado. Eso es fácil de entender en el sector industrial, pues no proteger unos resultados puede hundir una empresa, pero tiene peor justificación en el mundo académico, aunque desgraciadamente comprobemos que para muchos ser el descubridor tiene más importancia que lo que se descubre, pues la lucha por la gloria es consustancial con la naturaleza humana.

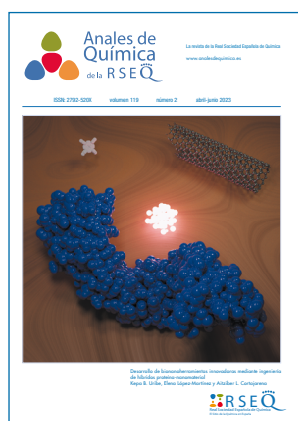
Tampoco he escondido los problemas asociados a la divulgación de resultados, pues los editores de revistas rivalizan cada vez con más fuerza por su posición en los índices de impacto, y también por su negocio, y así van proliferando las modalidades *Open access* de las que mucho deberíamos hablar. En este apartado, cobran importancia las dificultades que los jóvenes investigadores encuentran en alcanzar su independencia y en obtener financiación para sus proyectos. No es fácil encontrar soluciones, pero deberemos buscar fórmulas que mejoren la situación. Por último, he dedicado varias columnas a los problemas de energía, cambio climático y preservación de recursos. Releyendo mis crónicas, he comprobado que he sido tal vez muy radical y contundente en estos temas, sin considerar aspectos importantes que dificultan las soluciones, como el factor tiempo. Reconozco que no he sido muy transparente en eso. Por ejemplo, el 80% de la energía consumida actualmente en el mundo sigue procediendo de fuentes fósiles, y aunque se gastan ya 1,7 dólares en desarrollar fuentes renovables por cada dólar que se emplea en petróleo y otros materiales fósiles, se tardará bastante en conseguir la descarbonización total, y tal vez ya no lleguemos a tiempo, teniendo en cuenta el aumento vertiginoso de la población mundial, que no cesa en el tercer mundo y en los países emergentes. Como he repetido en múltiples ocasiones, los factores cinéticos, el control de la velocidad en los cambios, son vitales para evitar un colapso global que sería peor que las soluciones propuestas. Y ese control de los tiempos opera también en otros aspectos de la vida.

Esta es mi última columna en *Anales de Química*, quiero evitar el riesgo de empezar a repetirme. Espero que hayan interesado a mis lectores. Y con respecto a temas menos científicos, pero de igual o superior importancia, una última reflexión. Los países que alcanzan acuerdos entre sus mayorías son los únicos que prosperan, ninguno de los que viven polarizados como ahora el nuestro llega a ninguna parte, y eso no son opiniones, lo dice la historia, el pasado, la única parte del tiempo a la que podemos acceder desde la ciencia, ya que el tiempo futuro es sólo proyección o especulación, más propia de los filósofos que de los investigadores.

JAVIER DE MENDOZA

Índice de autores

Anales de Química de la RSEQ Volumen 119 ISSN: 2792-520X



ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

- **Domínguez-Vera, José M.**
Véase, González, Ana
- **Fuente Fernández, Almudena de la**
Hacia una evaluación competencial de la Química en las pruebas de acceso a la universidad, **2023**, 119 (3), 175-180
- **García-Molina, Rafael**
Véase, Tomás-Serrano, Antonio
- **González, Ana**
Érase una vez el hierro, **2023**, 119 (2), 87-91
- **Pastor-Belda, Marta**
Véase, Tomás-Serrano, Antonio
- **Quílez Pardo, Juan**
La regla de Madelung-Klechkowski: origen, empleo como instrumento didáctico y limitaciones, **2023**, 119 (2), 92-98
- **Sabio, Laura**
Véase, González, Ana
- **Salvatella, Luis**
La nomenclatura química según las normas de la Real Academia Española, **2023**, 119 (4), 319-324
- **Tomás-Serrano, Antonio**
Algunas consideraciones y propuestas en torno a la determinación del contenido en oxígeno del aire usando lana de acero, **2023**, 119 (2), 99-106

Una contribución para dilucidar las principales causas del ascenso de agua en un vaso invertido sobre la llama de una vela, **2023**, 119 (3), 181-

HISTORIA DE LA QUÍMICA

- **González Jiménez, Mario**
Elmer Imes, historia negra de los Estados Unidos y la espectroscopía, **2023**, 119 (1) 25-31
- **Navarro García, Eduardo**
Contribución del Químico Dr. Antonio Casares a la hidrología médica canaria mediante el estudio analítico de las aguas minerales de Azuage (Gran Canaria) en el siglo XIX, **2023**, 119 (1) 49-52
- **Pastor Valle, Jesús Francisco**
Véase, Pastor Villegas, José
- **Pastor Villegas, José**
Bicentenario de la independencia de México (1821-2021): Aspectos químicos del tiempo mexica-hispánico, de la etapa virreinal y del inicio nacional, **2023**, 119 (1) 32-41
- **Quílez, Juan**
Primeros modelos de configuración electrónica del átomo en la explicación del sistema periódico, **2023**, 119 (1) 42-48
- **Tascón, Juan M. D.**
El Instituto Nacional del Combustible del CSIC. Parte 1. Puesta en marcha y primeros años, **2023**, 119 (2) 107-112

El Instituto Nacional del Combustible del CSIC. Parte 2. Consolidación y desaparición, **2023**, *119* (2) 113-119

Dos destacados centros de investigación de la Universidad de Oviedo en la primera mitad del siglo XX, **2023**, *119* (4) 311-318

INVESTIGACIÓN QUÍMICA

- **Betancort, Juan M.**
Síntesis de éteres cíclicos naturales, **2023**, *119* (3) 153-160
- **Carrillo, Romen**
Véase, Betancort, Juan M.
- **Cirujano, Francisco G.**
Arquitecturas porosas ordenadas como catalizadores heterogéneos para una síntesis orgánica sostenible, **2023**, *119* (3) 161-168
- **Cortajarena A. L.**
Véase, Uribe, Kepa B.
- **Delgado López-Cózar, Emilio**
Detectando patrones anómalos de publicación científica en España (I): Las evidencias empíricas, **2023**, *119* (2) 71-86
- **Díaz Díaz, David**
Véase, Betancort, Juan M.
- **Enrique-Romero, Joan**
Véase, Rimola, Albert
- **Ferrero, Stefano**
Véase, Rimola, Albert
- **Funes-Ardoiz, Diego**
Véase, Sanosa, Nil
- **García, Celina**
Véase, Betancort, Juan M.
- **García-González, Jessica**
Véase, Rincón, Irene
- **García-Tellado, Fernando**
Véase, Tejedor, David
- **Giménez-Gómez, Alberto**
Véase, Sanosa, Nil
- **Kakkar, Harjasnoor**
Véase, Rimola, Albert
- **López, Leonardo**
Véase, Sanosa, Nil
- **López-Martínez, Elena**
Véase, Uribe, Kepa B.
- **Martín, Tomás**
Véase, Betancort, Juan M.
- **Martín, Víctor S.**
Véase, Betancort, Juan M.
- **Martín-Martín, Alberto**
Véase, Delgado López-Cózar, Emilio
- **Martínez-Bachs, Berta**
Véase, Rimola, Albert
- **Mates-Torres, Eric**
Véase, Rimola, Albert
- **Ramírez, Miguel Á.**
Véase, Betancort, Juan M.
- **Rimola, Albert**
Astroquímica computacional y fenómenos de superficies de los granos de polvo interestelar, **2023**, *119* (4) 303-310
- **Rincón, Irene**
Redes Metal-Orgánicas como agentes prometedores en remediación ambiental, **2023**, *119* (1) 9-17
- **Rojas, Sara**
Véase, Rincón, Irene
- **Sampedro, Diego**
Véase, Sanosa, Nil
- **Sanosa, Nil**
Una visión computacional de la catálisis fotorrédox: la importancia de los radicales, **2023**, *119* (3) 169-174
- **Tejedor, David**
Control de la reactividad en plataformas moleculares multifuncionales y su aplicación a la construcción molecular orientada a la diversidad. Éteres propargílicos vinílicos como un caso de estudio, **2023**, *119* (1) 18-24
- **Padrón, José M.**
Véase, Betancort, Juan M.
- **Padrón, Juan I.**
Véase, Betancort, Juan M.
- **Pareras, Gerard**
Véase, Rimola, Albert
- **Peñín, Beatriz**
Véase, Sanosa, Nil

- **Perrero, Jessica**
Véase, Rimola, Albert

- **Pozo-Gavara, Víctor**
Véase, Sanosa, Nil

- **Uribe, Kepa B.**
Desarrollo de bionanoherramientas innovadoras mediante ingeniería de híbridos proteína-nano-material, **2023**, *119* (2) 65-70

OPINIÓN

- **Elguero, José**
Distribución de citas en los elementos de la Tabla Periódica, **2023**, *119* (3) 150-152

- **González, Luis**
El verdadero coste de los acuerdos transformativos, **2023**, *119* (4) 298-302

RADICALES (MUY) LIBRES

- **Mendoza, Javier de**
Renovarse o morir, **2023**, *119* (1) 55-56
Marketing y ciencia, **2023**, *119* (2) 137-138
E.T. El extraterrestre, **2023**, *119* (3) 196-197
Transparencia, **2023**, *119* (4) 341-342

Normas de publicación

Directrices para autores/as

Instrucciones generales

La revista **Anales de Química** de la RSEQ admite la publicación de artículos en español. Los artículos se incluyen en las siguientes categorías:

- **Artículos de revisión.** Dirigidos a una audiencia multidisciplinar y no especializada. La extensión máxima será de 6 páginas impresas, incluyendo figuras y referencias.
- **Ensayos.** Con una extensión máxima de cuatro páginas impresas. Un ensayo es una reflexión u opinión razonada sobre un tema de interés para la comunidad científica y educativa. El Comité Editorial revisará el manuscrito y decidirá sobre la oportunidad de su publicación.
- **Artículos de Opinión.** Tendrán una extensión máxima de cuatro páginas. Serán revisados por el Editor General y dos Editores Asociados, y el Comité Editorial será el encargado de aprobar su publicación.
- **Reseñas de libros.** Deberán solicitarse al Editor General. La solicitud deberá ir acompañada de un ejemplar del libro que quedará en poder de la persona que haga la reseña.
- **Cartas al editor y al presidente de la RSEQ.** Deben tener una extensión máxima de media página. Estas cartas se publicarán sin editarse y no serán sometidas a revisión, excepto si se refieren a personas o instituciones de forma ofensiva.
- **Noticias** de interés, tanto de la RSEQ en general como de los grupos y las secciones en particular.
- **Obituarios.** La publicación de un obituario deberá solicitarse a la Oficina Editorial siendo discrecional del Comité Editorial.

Los manuscritos se enviarán en un solo archivo que contenga las figuras, tablas, esquemas y gráficos integrados en el texto. El formato recomendado es pdf., aunque también se aceptan archivos en formato tipo docx.

En el proceso de envío telemático de los manuscritos es necesario adjuntar una carta al editor (en formato docx o pdf.) en la que se incluya la información de contacto del autor correspondiente y el tipo de contribución a Anales de Química de la RSEQ (Investigación Química, Enseñanza de la Química, Historia de la Química). Durante el proceso de

envío los autores podrán sugerir los nombres de cuatro evaluadores competentes en la materia. Es responsabilidad del autor correspondiente el informar al resto de los autores del estado de recepción, revisión o publicación del manuscrito.

Tras el proceso de revisión, se requerirá a los autores, en su caso, que remitan la versión definitiva del texto, tablas y leyendas de esquemas y figuras en formato docx para la confección final del artículo. Las figuras, tablas, esquemas, gráficos y fotografía/s del/de los autor/es deberán remitirse en el formato original, cada una como un archivo independiente y todo ello en una carpeta tipo zip. El empleo del servicio telemático agiliza considerablemente el proceso de publicación en Anales de Química de la RSEQ y, por ende, es la forma de envío de artículos por excelencia. No obstante, si por algún motivo no se pudiera utilizar, los manuscritos también pueden enviarse vía correo electrónico a Patricia Yáñez-Sedeño (pyanezs@rseq.org). Se recomienda a los autores que envíen propuestas atractivas para la portada de la revista (con una calidad mínima de 600 dpi y formato original o EPS).

El autor principal de un artículo publicado en Anales de Química de la RSEQ recibirá una copia de la edición impresa del número de la revista donde aparece su artículo y la versión electrónica final del mismo en formato pdf.

Preparación del manuscrito

Los manuscritos deben redactarse utilizando la letra Arial a 9 puntos y 1.5 de espaciado. Se recomienda prepararlos empleando la Plantilla Manuscritos Anales (95.95 kB); al mismo tiempo puede utilizarse el artículo Artículo Modelo (755.71 kB) como plantilla. Deben respetar las siguientes secciones: título, filiación de los autores, fotografía de los autores, resumen (español e inglés), palabras clave (español e inglés), introducción, exposición del trabajo, conclusiones, agradecimientos y bibliografía.

Primera página. En esta página debe aparecer el título del manuscrito, los nombres de los autores, sus fotografías, filiación, dirección postal completa, y dirección de correo electrónico del autor principal o de contacto, que se puede identificar mediante un asterisco. También se incluirán en esta primera página cinco palabras clave y un resumen

de un máximo de 100 palabras, tanto en español como en inglés. El/los autor/es podrá/n incluir, si así lo desearse/n, resúmenes en cualquiera de las lenguas oficiales de España y de los países iberoamericanos.

Texto. Deberá incluir referencias relevantes al tema que se presenta y su exposición se hará de modo que resulte atractivo y divulgativo. En la mayoría de los artículos se sugiere a los autores comenzar con una visión global del tema tratado para finalizar considerando los aspectos más particulares y las conclusiones de la investigación presentada.

Tablas. Deben numerarse consecutivamente y situarse a continuación del texto donde se mencionan. En la parte superior de cada tabla, debe aparecer un título que describa su contenido, sin necesidad de recurrir al texto. Si se necesita especificar algún detalle se puede indicar como nota al pie de página.

Figuras. Todas las figuras o esquemas deben mencionarse en el texto en orden consecutivo y numerarse en concordancia. Deben situarse detrás del párrafo de texto en el que se mencionan. Al pie de cada figura debe presentarse una leyenda que indique el número de figura correspondiente y una pequeña descripción, preferiblemente menor de cuatro líneas. Las figuras se deben preparar para un formato de una columna (8,5 cm de anchura), o para un formato de dos columnas, con un ancho máximo de 17,5 cm.

Parámetros físicos o ecuaciones, nomenclatura, etc. Para aspectos más específicos relacionados con la presentación de parámetros físicos o ecuaciones, nomenclatura, análisis de estructuras cristalinas, o cálculos teóricos, se recomienda seguir las normas generales de publicación de la revista *Chemistry—A European Journal* (https://onlinelibrary.wiley.com/page/journal/15213765/homepage/2111_guideline.html).

Bibliografía. En el texto, los números deben aparecer como superíndices (por ejemplo, Wittig¹) y, si procede, después de las marcas de puntuación (por ejemplo, Dorel.²). Los nombres de las revistas deben abreviarse de acuerdo con el Chemical Abstracts Service Source Index (CASSI) [en caso de duda, consúltese: www.cas.org/expertise/cascontent/caplus/corejournals.html] y seguir el estilo general de las revistas patrocinadas por la Real Sociedad Española de

Química. Las referencias en y a la revista *Anales de Química de la RSEQ* se escriben como se muestra en los siguientes ejemplos:

Artículos de revistas

- a) B. M. Trost, *Chem. Eur. J.* 1998, 4, 2405–2412; b) S. Grimme, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2006, 45, 4460–4464. R. Dorel, *An. Quím.* 2020, 116, 223–232.

Libros

D. Tullius en *Comprehensive Supramolecular Chemistry*, Vol. 5 (Eds.: J. L. Atwood, J. E. D. Davies, D. D. MacNicol, F. Vögtle, K. S. Suslick), Pergamon, Oxford, 1996, pp. 317–343.

Citas a páginas web: url de la página web seguido de visitada el día/mes/año. En lo posible deben evitarse citas de Wikipedia, optándose siempre por las citas originales.

Aviso de derechos de autor/a

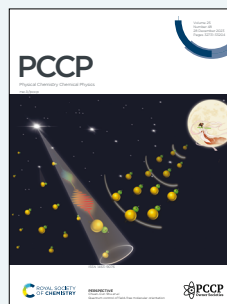
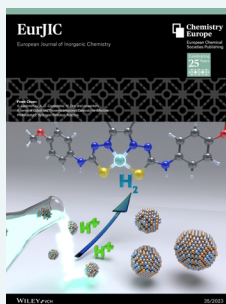
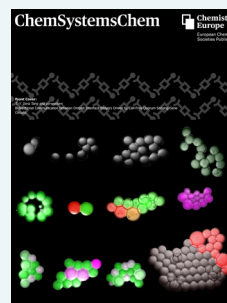
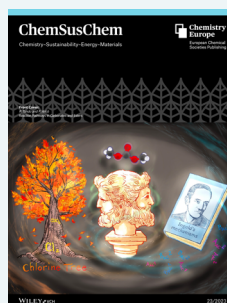
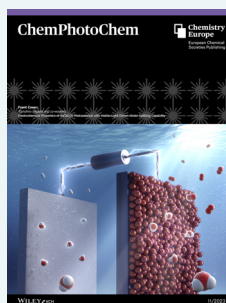
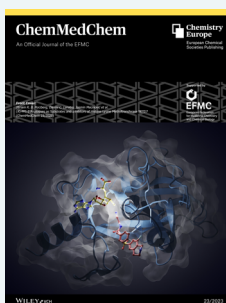
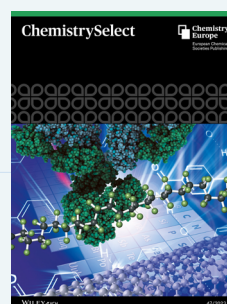
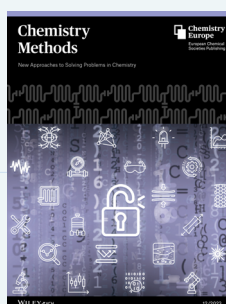
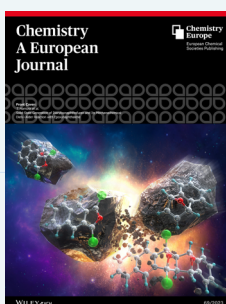
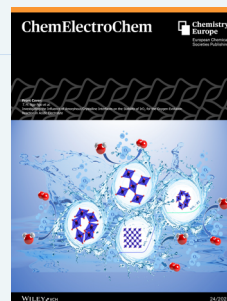
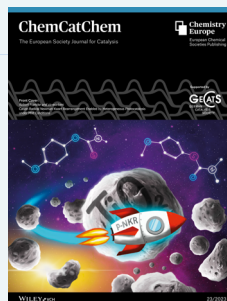
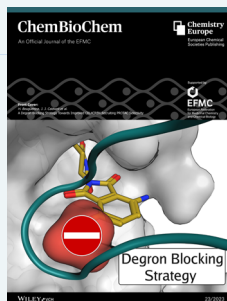
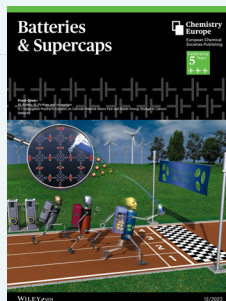
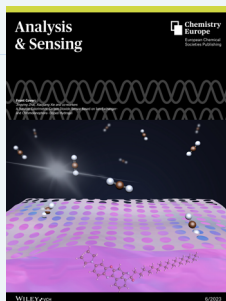
© Real Sociedad Española de Química. Los originales publicados en las ediciones impresa y electrónica de la Revista *Anales de Química de la RSEQ* son propiedad de la RSEQ, siendo necesario citar su procedencia en cualquier reproducción parcial o total.

Los textos originales no pueden ser utilizados, distribuirse, comercializarse, reproducirse o transmitirse por ningún procedimiento informático, electrónico o mecánico con ánimo de lucro, directo o indirecto. Si se transforman o se crea nuevo contenido a partir de ellos, la nueva contribución se deberá difundir bajo la misma licencia que el artículo original. Podrán ser usados y citados para fines educativos y científicos, pero en todos los casos se debe referenciar la autoría y la fuente editorial, remitiendo al correspondiente enlace URL en la web de *Anales de Química de la RSEQ*. Debe indicarse: “Publicado inicialmente en *Anales de Química de la RSEQ* en [volumen y número, año], disponible en URL.

Los autores, al enviar un artículo a la revista aceptan licencia de uso y distribución utilizada por la revista (“Creative Commons Reconocimiento-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional”), así como las políticas del editor sobre copyright y autoarchivo, y de acceso abierto.

Se rechazarán todos los artículos que incumplan estas normas

Revistas patrocinadas por la Real Sociedad Española de Química





CYRENE™

A bio-based alternative to petroleum-based DMF and NMP solvents

A SAFER SOLVENT

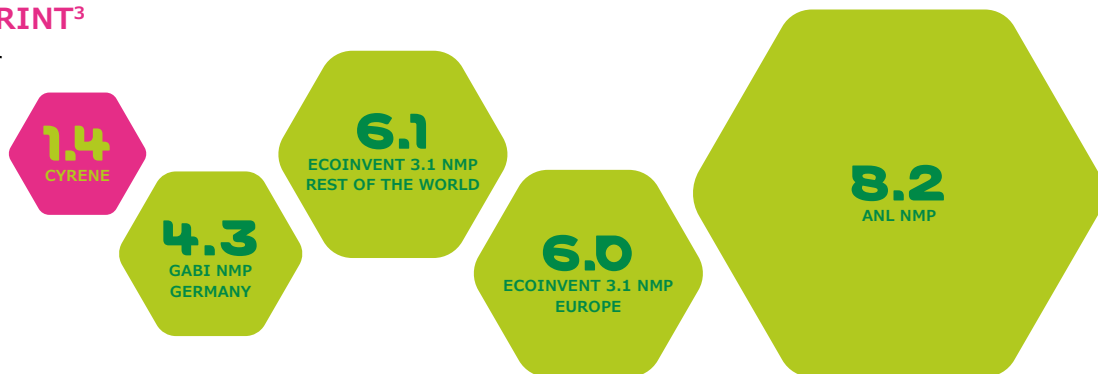
NMP and DMF are on the European ECHA list of substances of very high concern because of their mutagenic toxicity.¹

- In 2020, the ECHA implemented strict restrictions on the use of NMP within the EU²
- Cyrene™ does not contain the amide group associated with mutagenic toxicity and is therefore not subjected to the same regulatory restrictions as NMP and DMF¹



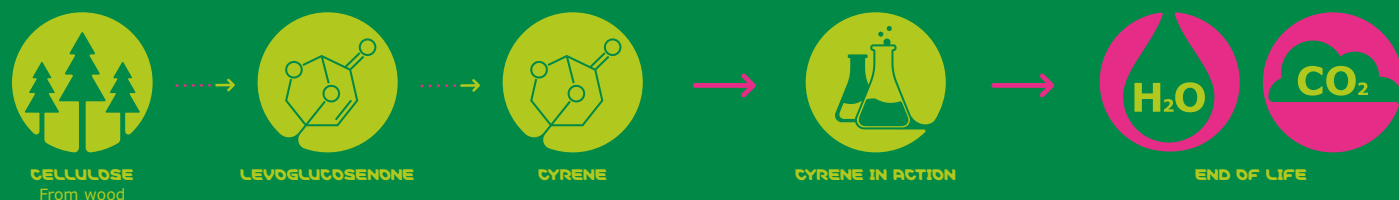
A SMALLER FOOTPRINT³

When compared to other solvents, Cyrene™ has a drastically smaller cradle-to-gate global warming potential (kg CO₂e/kg Solvent).



IPCC 2013 Impact Assessment Method

A SUSTAINABLE OPTION



Solvents constitute more than half the waste of a typical pharmaceutical process.⁴

Cyrene™ does not contain chlorine, sulfur, or nitrogen heteroatoms, which can present pollution issues or create corrosive by-products if incinerated.¹⁻⁵

The production of Cyrene™ is energy neutral and sustainable. It is produced in only two steps from waste cellulose and releases only carbon dioxide and water at end of life.¹⁻⁶