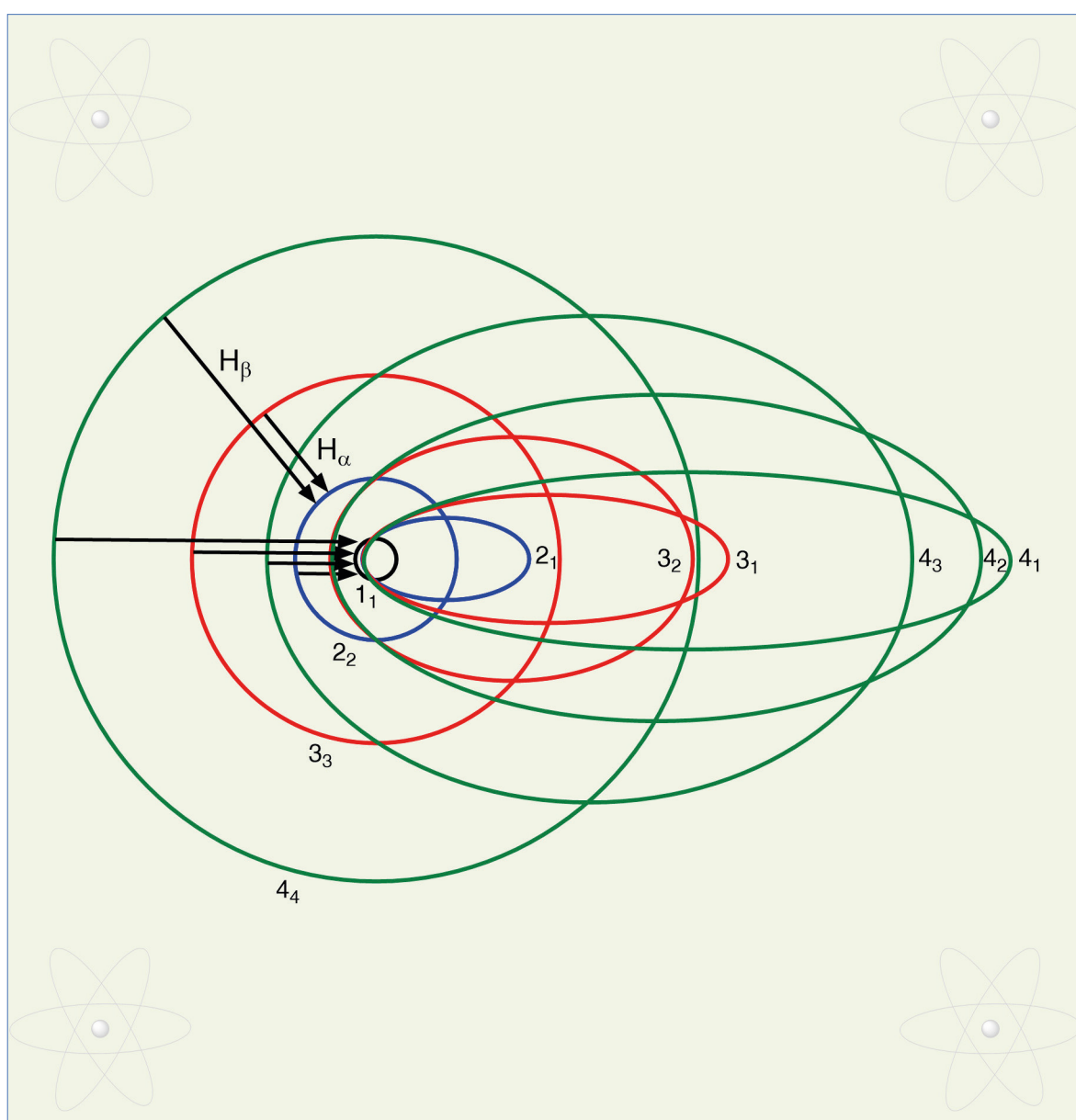


Anales de

Química

de la RSEÖ

La revista de la Real Sociedad Española de Química

● Vol. 120 ● N° 4 ● www.analesdequimica.es ●

Anales de Química de la RSEQ

Revista editada en Madrid por la Real Sociedad Española de Química

Editor General

Juan Ángel Casares González
Departamento de Química Física y Química Inorgánica, Universidad de Valladolid.

Comité Editorial

Fernando Cossío
IKERBASQUE Basque Foundation for Science, Bilbao, Bizkaia.
Vicepresidente de la RSEQ.

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

Luis Alberto Echegoyen
Institut Català d'Investigació Química (ICIQ). Profesor emérito de la Universidad de Tejas, El Paso.

Ana M. Geer
Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH), CSIC-Universidad de Zaragoza.

Carlos Martí-Gastaldo
Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), Universidad de Valencia.

Gabriel Pinto Cañón
Departamento de Ingeniería Química Industrial y del Medio Ambiente. Universidad Politécnica de Madrid.

Alfonso Salinas Castillo
Departamento de Química Analítica, Universidad de Granada.

Miquel Solà
Instituto de Química Computacional y Catálisis. Universidad de Girona.

Rolando Ángel Spanevello
Universidad Nacional de Rosario (Argentina).

Uxue Uribe
Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la Universidad del País Vasco.

Otilia Val-Castillo
Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid

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



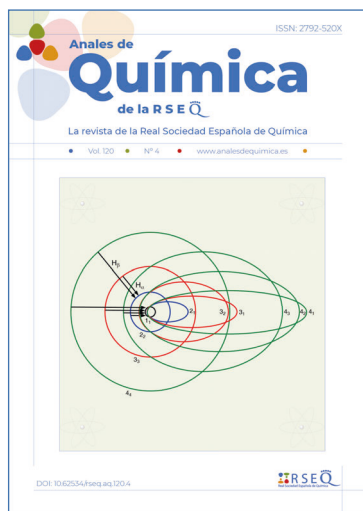
Johnson & Johnson
Innovative Medicine

MERCK



ANALES de Química de la RSEQ
Volumen 120 · Número 4 · octubre-diciembre 2024

SUMARIO



Diseño y maquetación:
signocomunicacion.es

An. Quím. RSEQ, 120 (4), 2024, 179-250
ISSN: 2792-520X
eISSN: 2792-5250
D. L.: M-232-1958

Carta del editor

Juan Á. Casares 182

Investigación Química

Materiales de un único átomo de hierro-nitrógeno- carbono para la reducción electroquímica de oxígeno y CO_2 , Jorge Torrero Cámara y Jesús Barrio Hermida 183

Complejos con ligandos sililo polidentados como catalizadores homogéneos en reacciones de hidrogenación e hidrosililación, Francisco J. Fernández Álvarez 192

Enseñanza de la Química

Breve introducción a las plantas luminiscentes, Otilia Val Castillo 199

Un experimento sencillo para comprobar que la llama de una vela, cubierta con un vaso, se apaga antes de consumir la totalidad del oxígeno disponible, Antonio Tomás-Serrano 206

La química que se esconde detrás de las mascarillas de oxígeno de los aviones, Fernando I. de Prada Pérez de Azpeitia 212

Imágenes de la Química

El modelo atómico de Bohr-Sommerfeld, Santiago Álvarez 219

Noticias 224

Índice de autores 244

Normas de publicación 246

Carta del editor

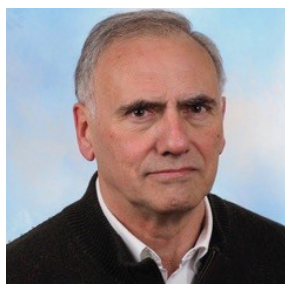
Juan Á. Casares

El número de diciembre de Anales recoge cada año la noticia de la concesión de los Premios Nobel de Química. En esta ocasión los premiados son David Baker (USA) (50%) "for computational protein design", y Demis Hassabis (UK) (25%) y John Jumper (UK) (25%) "for protein structure prediction". El diseño computacional de proteínas y la consiguiente síntesis de proteínas artificiales está ya proporcionando nuevos materiales y nuevos enzimas. La predicción de estructuras de proteínas mediante inteligencia artificial ha cambiado de un plumazo, y de forma un tanto inesperada, la forma de hacer investigación en bioquímica y el papel de los científicos que se dedican a eso, a determinar estructuras de proteínas por distintos medios. Pero las decisiones de la Real Academia Sueca de Ciencias tienen más importancia que la mera distribución de galardones (y dinero) a investigadores, por el simple hecho de que todos estamos pendientes de su decisión y escuchamos con atención el resultado. La Academia Sueca ha dicho alto y claro que la inteligencia artificial ha llegado a la Química para quedarse, y que el uso de computación no sólo nos permite entender los fenómenos químicos, también lleva la investigación a otros territorios. Y todo el mundo lo ha oído.

El uso de la computación avanzada y la inteligencia artificial (en adelante IA) en investigación se está imponiendo por la vía de los hechos. La investigación en química es un campo extremadamente competitivo y las herramientas que dan ventaja competitiva sacan de ese campo a quienes no las utilizan, por lo que no necesitan especial promoción. El uso potencial de la IA va más allá de la interpretación de datos experimentales complejos, alcanza toda la actividad científica, desde el diseño de experimentos a la redacción de publicaciones, y desde luego a la creación de las figuras que se incluyen en las publicaciones. Esto es muy importante porque las figuras de las publicaciones son el resumen gráfico de los datos experimentales y la expresión simbólica de conceptos abstractos. Otro asunto diferente es el uso de la IA con fines de ilustración gráfica. Habrá situaciones en las que la ilustración cree una impresión falsa de la realidad, y otras en las que cumpla una función meramente estética.

El uso de la IA en investigación plantea una serie de cuestiones éticas en las que deberíamos pensar, empezando por decidir si es correcto utilizar imágenes falsas para describir fenómenos de los que intentamos interpretar su causa química

Otro aspecto importante del desarrollo de la IA es su uso en docencia (a la que la mayor parte de nosotros dedicamos algún tiempo al cabo del año). En este sentido, la situación actual me retrotrae a mi adolescencia. Recuerdo el uso de las tablas de logaritmos, la búsqueda de la mantisa y la característica para alcanzar el valor buscado con cuatro o cinco cifras significati-



Juan Á. Casares.

vas. También recuerdo los acalorados debates acerca de si se debía permitir a los alumnos el uso de calculadoras portátiles para resolver los problemas de física o de química. Estamos viviendo una situación que dará lugar a cambios de contenidos y de enfoques mucho más profundos que aquellos y, sorprendentemente, se habla muy poco de ello. Parece como si la única preocupación de los docentes fuera evitar que los alumnos usen la IA para completar sus trabajos. Sin embargo, ya hay excelentes programas capaces de resolver muchos de los problemas semejantes a los que enseñamos

a resolver a nuestros alumnos, desde determinar estructuras moleculares a partir de datos espectroscópicos hasta diseñar rutas de síntesis de compuestos moderadamente complejos. A medida que la inteligencia artificial alcance distintas zonas de nuestra competencia más tareas podrán ser encomendadas a las máquinas, dejando obsoletos algunos contenidos de nuestros temarios. Por otra parte, el disponer de herramientas computacionales predictivas ha de cambiar nuestra forma de enseñar los contenidos conceptuales. Tendremos a nuestro alcance ejemplos más claros, podremos componer ejercicios más formativos y también los alumnos tendrán a mano herramientas con las que cuestionar y desafiar las enseñanzas de sus profesores.

Deberíamos hablar de esto. Anales es el lugar adecuado para establecer esa discusión y mantenerla abierta, para intercambiar ideas con pausa y reflexión y para buscar compañeros de discusión con criterio y experiencia. Todos estamos invitados, esperamos vuestras contribuciones en forma de artículos científicos, ensayos, artículos de docencia o cartas al director, vuestras experiencias y opiniones son bienvenidas y son necesarias.

En este número contamos con dos artículos de investigación. Uno de ellos sobre un tema de creciente actualidad: la reducción electroquímica del CO₂, el otro sobre un tipo de complejos con ligandos poco usuales que se han revelado extraordinariamente eficientes en algunos procesos catalíticos. En la sección "Enseñanza de la Química" incluimos artículos relativos a plantas luminiscentes, un experimento sencillo y advertencias para su correcta interpretación, y un muy interesante artículo acerca de cómo operan las mascarillas de oxígeno de emergencia. La portada es una adaptación de la representación esquemática del átomo de Bohr-Sommerfeld, relacionada con el siempre interesante artículo de Santiago Álvarez en "Imágenes de la Química".

Finalmente, y en otro orden de cosas, aprovecho esta carta para anunciar la incorporación, a partir del número 1 de 2025, de Bibiana Campos Seijo como Editora Ejecutiva de Anales. Sin duda su experiencia en el campo editorial de sociedades científicas nos ayudará a hacer de Anales de Química de la RSEQ una revista mejor. Sea bienvenida.

Materiales de un único átomo de hierro-nitrógeno-carbono para la reducción electroquímica de oxígeno y CO₂

Iron-nitrogen-carbon single atom materials for the electrochemical oxygen reduction and CO₂ reduction

Jorge Torrero Cámara¹, Jesús Barrio Hermida^{2*}

¹ Departamento de Tecnología de Energía Electroquímica. Centro Aeroespacial Alemán.

² Departamento de Ingeniería Química, Imperial College London.

PALABRAS CLAVE:

Materiales de un único átomo
 Electroquímica
 Electrocatalizadores
 Reacción de reducción de oxígeno
 Reducción de CO₂

RESUMEN:

Los materiales de un único átomo metal-nitrógeno-carbono son la mejor alternativa a los catalizadores de metales preciosos en las celdas de combustible de hidrógeno y los electrolizadores de CO₂. Sin embargo, su síntesis está limitada por la pirólisis a alta temperatura, lo que conlleva la formación de nanopartículas y resulta en un bajo número de sitios activos poco accesibles. Por lo tanto, las técnicas sintéticas que permiten la coordinación de átomos aislados en una matriz de carbono post-pirólisis han recibido mucha atención. En esta perspectiva, comentamos los trabajos más recientes en el campo de los electrocatalizadores Fe-N-C, y nos enfocamos en las técnicas sintéticas de reemplazo de cationes Zn y Mg para evitar la agregación de Fe.

KEYWORDS:

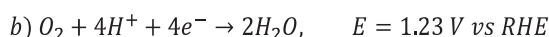
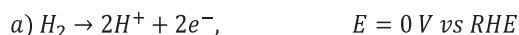
Single-atom catalysts
 Electrochemistry
 Electrocatalysts
 Oxygen reduction reaction
 CO₂ reduction

ABSTRACT:

Metal-nitrogen-carbon single-site electrocatalysts are one of the most promising alternatives to precious metals in proton exchange membrane fuel cells or CO₂ electrolyzers. Their synthesis, however, is hindered by the high temperature pyrolysis, which leads to the formation of nanoparticles and to low active site number and accessibility. Therefore, synthetic strategies that decouple high-temperature pyrolysis and single site loading in a porous nitrogen-doped scaffold, are sought after. In this perspective, we discuss the recent developments in the field of Fe-N-C materials, with a focus in decoupled synthetic techniques via Zn and Mg exchange to avoid Fe aggregation.

Introducción

Las celdas de combustible de hidrógeno/aire son una alternativa sostenible para la generación de electricidad y son ampliamente empleadas tanto en el transporte como en dispositivos estacionarios.^[1] En estos sistemas, el hidrógeno es oxidado en el ánodo (Ecuación 1a) en una reacción muy rápida con mínimo sobrepotencial (siendo el sobrepotencial la diferencia entre el potencial teórico para la oxidación de hidrógeno y el potencial real, que emerge de parámetros como la resistencia del sistema y las barreras cinéticas de la reacción) y en el cátodo, el oxígeno se combina con los protones y electrones derivados de la oxidación de hidrógeno en la superficie de un catalizador de platino y carbono (Pt/C) y se reduce a H₂O (Ecuación 1b, Figura 1). La reacción de reducción electroquímica de oxígeno (ORR) conlleva la transferencia de cuatro protones y cuatro electrones y tiene cinéticas más lentas, siendo la principal causa del sobrepotencial en las celdas de combustible.



Ecuación 1. Reacción de oxidación de hidrógeno con su potencial termodinámico en la escala de electrodo de hidrógeno (a), y reacción de reducción de oxígeno a agua con su potencial termodinámico en la escala de electrodo de hidrógeno.

Este sobrepotencial emerge de la relación en las energías de enlace entre los distintos intermedios de reacción, que escala de manera lineal.^[2]

Además, la necesidad de emplear materiales basados en platino tanto en el ánodo como en el cátodo complica su explotación industrial. El platino es el catalizador de referencia para estas reacciones ya que es capaz de interactuar con los intermedios de reacción de manera ni muy débil (ya que en ese caso la molécula no sería adsorbida en la superficie del catalizador) ni muy fuerte (dado que en ese caso la superficie

del catalizador se bloquearía). Estas características están descritas en el Principio de Sabatier, y se representan comúnmente en una gráfica volcán, donde en el eje x se añade la energía de enlace de un catalizador a un intermedio de reacción, y en el eje y un parámetro relacionado con la actividad catalítica (como por ejemplo el logaritmo de la densidad de corriente).^[3]

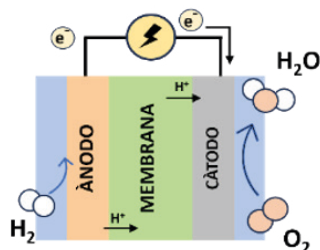


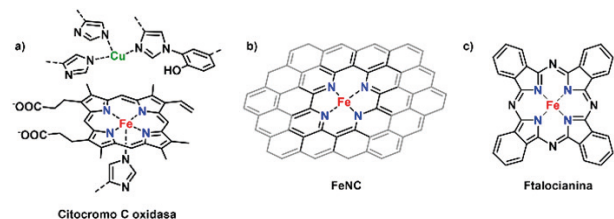
Figura 1. Representación esquemática de una celda de combustible de hidrógeno/aire.

Debido al alto precio y la escasez de platino en la corteza terrestre,^[4] desarrollar catalizadores sostenibles que puedan igualar su actividad catalítica en la reducción de oxígeno es de vital importancia para la comercialización a gran escala de este tipo de dispositivos. Los catalizadores diferentes al Pt, o metales del grupo del Pt (PGM-free), tienden a ser menos activos. Esto suele suplirse añadiendo mayor cantidad de catalizador en los electrodos ensamblado de membrana (MEA), lo que resulta en capas catalíticas gruesas que pueden suponer limitaciones por transferencia de masa. Se ha determinado no ser un problema siempre que la densidad volumétrica del catalizador no sea menos de 10 veces la ofrecida por el Pt.^[5]

Una alternativa son los catalizadores libres de PGM con un rendimiento ORR comparable al Pt, y actualmente los denominados catalizadores Metal-Nitrógeno-Carbono (MNC) son los catalizadores libres de PGM mejor posicionados para aplicaciones de pilas de combustible. En ese sentido, catalizadores de un único átomo basados en hierro y nitrógeno en una matriz de carbono (FeNC) se han posicionado durante la última década como una gran alternativa debido a su prometedora actividad catalítica, conductividad electrónica, estabilidad y carácter sostenible.^[6-8]

Materiales de un único átomo de hierro (FeNC)

El sitio activo de este tipo de materiales cuenta con un único átomo de hierro coordinado a cuatro nitrógenos, que pueden ser piridínicos o pirrólicos, y que están incrustados en una matriz de carbono. Este tipo de sitios activos se asemejan a aquellos presentes tanto en sistemas naturales como enzimas (citocromo C oxidasa, Esquema 1) o proteínas (hemoglobina) como a catalizadores moleculares (porfirinas y ftalocianinas).^[9-12]



Esquema 1. Estructura del sitio activo en el citocromo C oxidasa (a), FeNC (b) y una ftalocianina de hierro (c).

Entre otras ventajas frente a nanopartículas metálicas, los materiales de un único átomo ofrecen la posibilidad de utilizar

el 100% del sitio activo en procesos catalíticos debido a su dispersión atómica. De hecho, en los catalizadores comerciales basados en Pt/C, tan sólo el 50% de los átomos de platino se encuentran en la superficie.^[5]

Además, en lugar de presentar bandas electrónicas continuas (como es el caso de las partículas metálicas) los átomos aislados presentan una estructura electrónica con estados discretos que depende de la hibridación con el sustrato en el que se coordinen.^[13] Estas diferencias impactan considerablemente la reactividad en procesos electroquímicos; mientras que el hierro reacciona de manera muy fuerte con los intermedios de reacción (como *OOH, *OH o *O) en la reducción de oxígeno, encontrándose en el lado izquierdo del volcán,^[2] hierro coordinado a cuatro nitrógenos en una matriz de carbono se encuentra cerca de la cima, sugiriendo una actividad catalítica similar a la del platino y sus aleaciones (Figura 2).^[14]

A. Cook, en 1938 estudió el uso de las ftalocianinas para la descomposición del H₂O₂, y determinó que la ftalocianina de Fe era la más activa.^[15] Este trabajo inspiró el primer uso de estos materiales en la catálisis de la reducción de oxígeno en 1964, cuando Jasinski estudió por primera vez el comportamiento de diversos macrociclos con diferentes centros metálicos en medio ácido y alcalino.^[16] Sin embargo, este tipo de macrociclos presenta una baja estabilidad en las condiciones de reacción de las celdas de combustible, especialmente en medio ácido.^[17] Alt descubrió más adelante, que un tratamiento térmico mejoraba notablemente la actividad de estos materiales.^[18] Por lo tanto, la pirólisis a alta temperatura (> 500°C) ha sido empleada para mejorar la estabilidad de los catalizadores, aunque esto conlleve la degradación de los macrociclos y la formación de sitios activos en una matriz de carbono.

Desde entonces, la pirólisis de moléculas que contienen carbono y nitrógeno junto con una fuente de hierro a alta temperatura y en atmósfera inerte ha sido la técnica más ampliamente utilizada para producir materiales FeNC,^[19-21] presentando actividades altas para la ORR, especialmente en media alcalina.

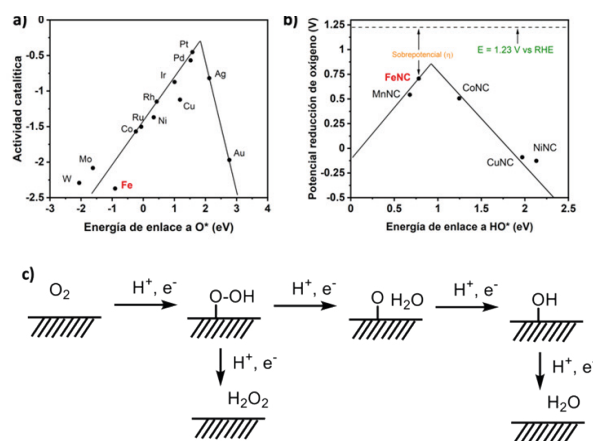


Figura 2. Gráfica volcán en metales (a) y metales coordinados en carbono dopado con nitrógeno (b). Reproducido de las referencias [2, 14]. Esquema de los intermedios de reacción en la reducción de oxígeno para producir agua oxigenada (mediante la transferencia de 2 electrones) o agua (mediante la transferencia de 4 electrones).

Durante el tratamiento a alta temperatura, inicialmente las moléculas se descomponen desprendiendo fragmentos de bajo peso molecular que dan lugar a polímeros, y a temperaturas sobre 700 °C se forma una matriz de carbono dopada con nitrógeno donde se coordinan los iones de hierro. La pirólisis debe realizarse a una temperatura suficientemente alta para

conseguir formar una matriz que posea una alta conductividad electrónica. Normalmente, la conductividad del material está relacionada con el grado de grafitización y la cantidad de nitrógeno presente, por lo tanto, el radio molar de las moléculas empleadas en la síntesis como la temperatura de la pirólisis influyen drásticamente las propiedades del catalizador y su actividad electrocatalítica.

Además de la conductividad electrónica, la porosidad y la densidad de sitios activos son los parámetros principales que determinan la actividad catalítica de los materiales FeNC. Una alta micro, y mesoporosidad (que corresponde a tamaños de poro < 2 nm y entre 2 y 50 nm, respectivamente) es ideal para conseguir un alto número de sitios activos accesibles. En particular, los microporos son cruciales para la formación de los sitios activos,^[22] mientras que los mesoporos determinan su accesibilidad y el transporte de los intermedios de reacción al sitio activo.^[23,24] Existen diversos métodos de síntesis mediante los cuales la porosidad puede modularse, uno de ellos es el uso de plantillas de sacrificio, como sílica, que produce materiales mesoporosos (con tamaño de poro entre 25 y 40 nm) con superficies específicas de $600 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$,^[25] e incluso $1500 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$.^[26] Otro método es la utilización de precursores porosos como redes metal-orgánicas (MOFs),^[27-29] redes orgánicas covalentes (COFs),^[30] o polímeros orgánicos porosos (POPs).^[31] Estos últimos, pueden utilizarse como excelente precursor para obtener electrocatalizadores de alta actividad sin la necesidad de incorporar plantillas de sacrificio. Existe una gran variedad de monómeros y reacciones de reticulación para obtener polímeros orgánicos de alta superficie que contienen diversos grupos funcionales. Cuando se emplea un compuesto macrocíclico de metal-nitrógeno, como las ftalocianinas o la estructura similar a la porfirina, en una polimerización 3D, el POP resultante mostraría una densa población de sitios de M-N₄. Luping Yu y sus colaboradores sintetizaron un catalizador POP Fe/N/C con alta actividad ORR a partir de una porfirina de hierro que se polimerizó a un complejo Fe-POP y se sometió a tratamientos térmicos para obtener el catalizador real.^[32]

De forma más reciente, se han usado marcos de triazina covalente que son polímeros orgánicos-porosos obtenidos por la trimerización de compuestos de nitrilos aromáticos. Los CTF son materiales ricos en N, térmicamente estables con una gran área.^[33] Los CTF se preparan mediante síntesis ionotermal en la que se mezcla un precursor de nitrilo aromático con ZnCl_2 en una ampolla que se sella al vacío y se trata térmicamente a $400\text{-}600 \text{ }^\circ\text{C}$. MOFs son materiales moleculares formados mediante enlaces de coordinación entre centros metálicos y ligandos orgánicos, y debido a su porosidad han sido ampliamente estudiados en campos como la catálisis, adsorción de gases o purificación de aguas entre otros.^[34-39] En particular, los MOFs más empleados como precursores en la síntesis de FeNC son los de la familia ZIF ("zeolitic imidazole framework"), cuya pirólisis (en presencia de una fuente de hierro y nitrógeno) permite obtener materiales de carbono dopados con nitrógeno con alta microporosidad. El trabajo publicado por Jaouen y colaboradores, donde se empleó una mezcla de ZIF (ZIF-8, $\text{ZnN}_4\text{C}_8\text{H}_{12}$) con una superficie específica de $1800 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$, fenantrolina y acetato de hierro demostró el impacto de la microporosidad inicial en la actividad catalítica, alcanzando 0.75 W cm^{-2} de potencia a un potencial de 0.6 V en una celda de combustible de hidrógeno/oxígeno (frente a 0.32 W cm^{-2} del material preparado empleando

un carbón comercial, Figura 3).^[28] Y más tarde, se confirmó que las propiedades físicas del ZIF empleado determinan su comportamiento en una celda de combustible, especialmente el área superficial y el tamaño de poro.^[40]

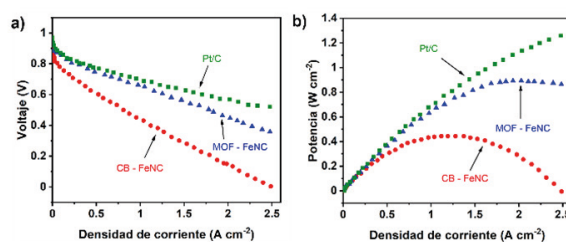


Figura 3. Curva de voltaje frente a densidad de corriente (a), y potencia frente a densidad de corriente de materiales (b) FeNC preparados con un carbón comercial (En rojo, "CB - FeNC"), un MOF (en azul "MOF - FeNC") y un catalizador comercial de Pt (en verde "Pt/C"). Adaptado de la referencia [28].

A pesar de los recientes avances en la síntesis de estos materiales, la pirólisis a altas temperaturas de sales inorgánicas resulta en la agregación de átomos metálicos en nanopartículas como carburos o nitruros debido a su alta energía superficial,^[29,41,42] lo que disminuye el número de centros activos así como su accesibilidad y complica su caracterización de manera rigurosa. Esta es la razón principal por la que comúnmente, la cantidad de metal en los materiales de un único átomo se limita a 1-2% en peso; de hecho, inicialmente se desconocía la naturaleza de los sitios activos que proporcionaban la actividad catalítica en la reducción de oxígeno, dado que los medios de caracterización disponibles no permitían la elucidación de sitios activos con tan poca cantidad en una matriz de carbono.

El trabajo desarrollado por Dodelet y colaboradores confirmó mediante espectrometría de masas de iones secundarios que con cantidades superiores a 2% en peso de Fe (usando una porfirina o acetato de hierro respectivamente) el material resultante de la pirólisis consistía principalmente en agregados de hierro catalíticamente inactivos.^[43] Kramm y colaboradores recientemente observaron resultados similares empleando espectroscopía Mössbauer, la cual es muy utilizada para investigar el estado de Fe en porfirinas, proteínas y electrocatalizadores FeNC ya que puede diferenciar entre diferentes estados de coordinación, estado de oxidación y espín.^[44] En este trabajo, se estudió un catalizador FeNC preparado por pirólisis de una porfirina de hierro (cloruro de tetra - metoxifenil) porfirina con un carbón comercial a $600 \text{ }^\circ\text{C}$ con una cantidad muy baja en Fe para asegurar la homogeneidad de átomos únicos, seguido por un lavado en ácido clorhídrico 1M (para eliminar especies agregadas de Fe).

Con el tiempo, los avances en microscopía electrónica y técnicas espectroscópicas permitieron confirmar que la naturaleza del sitio activo en estos materiales consta de un metal (comúnmente Fe o Co) coordinado a cuatro nitrógenos piridínicos.

¿Cómo evitar la agregación de hierro?

La durabilidad de los FeNC es una de las características a mejorar en este tipo de catalizadores para su comercialización. Diversas causas provocan su baja durabilidad como la desmetalación de los compuestos o la oxidación del carbón. Empleando espectroscopía Mössbauer, Jaouen y colaboradores observaron que en los catalizadores FeNC hay dos sitios activos diferentes, uno de alto espín en el que hierro se encuentra en estado de

oxidación 3+ (FeN₄C₁₂), que es más activo, pero menos estable y se degrada mediante agregación en óxidos férricos. Mientras que el otro es menos activo, pero más estable y es un sitio activo de bajo espín en el que hierro se encuentra en estado de oxidación 2+ (FeN₄C₁₀).^[45]

La agregación de átomos de hierro a altas temperaturas es la principal limitación para la obtención de altas cantidades de átomos de hierro aislados y accesibles (Figura 4). Aunque que las partículas metálicas de hierro pueden disolverse y eliminarse mediante un baño ácido, hierro metálico cataliza la grafitización de carbono creando una capa de carbono a su alrededor,^[46] lo que impide su disolución. Por lo tanto, para obtener átomos aislados y accesibles en cantidades superiores al 2-5% en peso, es necesario desarrollar técnicas sintéticas alternativas y emplear métodos sensibles de cuantificación de sitios activos. Los sitios activos compuestos por un metal coordinado a cuatro nitrógenos se pueden medir mediante la adsorción y desorción de moléculas como el monóxido de carbono (CO) o el nitrito (NO₂), lo que permite calcular parámetros que cuantifican la actividad catalítica como el *turnover number* (TON) y *turnover frequency* (TOF) o la accesibilidad electroquímica.^[47,48]

La accesibilidad electroquímica es un parámetro crucial, que se calcula comparando el número total de sitios activos con el contenido total de hierro, el cual puede medirse mediante espectrometría de masas (ICP, Ecuación 2). Entre ambas técnicas de cuantificación de sitios activos, la adsorción de nitrito es una técnica más sensible, ya que se lleva a cabo en un medio electroquímico similar a las condiciones de reacción y por lo tanto se usa para calcular la utilización electroquímica. Hoy en día y a pesar del progreso reciente en la síntesis de este tipo de catalizadores, la utilización electroquímica raramente supera el 10% debido a la reducción carbotermal de hierro y la falta de sustratos que combinen una adecuada micro y mesoporosidad.^[49]

$$\text{Utilización electroquímica} = \frac{\text{Número de sitios activos (NO}_2\text{)}}{\text{Número de átomos de Fe (ICP)}} \times 100$$

$$\text{Número de átomos de Fe} = \frac{(\% \text{ en peso de Fe}_{ICP}) \times N_t}{M_{Fe}}$$

Ecuación 2. Ecuaciones para calcular la utilización electroquímica de FeNC y el número de átomos de Fe basado en ICP. Reproducido de Ref. [49].

Para eludir la agregación de hierro mediante reducción carbotermal y a la vez obtener una alta cantidad de átomos aislados de hierro, Feller y colaboradores emplearon sales de ácidos de Lewis (Como Zn²⁺ o Mg²⁺) como efecto plantilla y prepararon FeNC mediante transmetalación.^[50,51] En esta técnica sintética, un metal alternativo al hierro con afinidad por el nitrógeno se carboniza a altas temperaturas en presencia de moléculas que contengan carbono y nitrógeno. El tipo de sales empleadas además resulta en una carbonización ionotermal que induce alta porosidad debido al efecto plantilla del óxido metálico resultante (ZnO, MgO etc.)^[52,53] y el carácter ácido de los cationes resulta en la formación de sitios activos con coordinación M-N₄ similares a porfirinas y ftalocianinas, lo cual se ha confirmado usando espectroscopía de absorción de rayos X.^[54] La transmetalación se lleva a cabo en general a bajas temperaturas para evitar la agregación de hierro (Figura 4). Inicialmente se llevó a cabo calentando una dispersión de MgNC en metanol donde se añade una disolución de FeCl₂·4H₂O y se calienta a reflujo durante 24 h. Durante los últimos 6 años, varios grupos han explorado diferentes combi-

naciones de ácidos de Lewis con bloques moleculares además de técnicas alternativas de intercambio de cationes que han resultado en la síntesis de átomos aislados en más de un 10% en peso, accesibilidad de más del 50% y la mayor actividad catalítica reportada hasta la fecha. Además, la síntesis por transmetalación permite obtener información exclusiva sobre la estabilidad y actividad intrínseca de los sitios activos FeN₄, en la que se pueden descartar la contribución de nanopartículas de hierro.^[55]

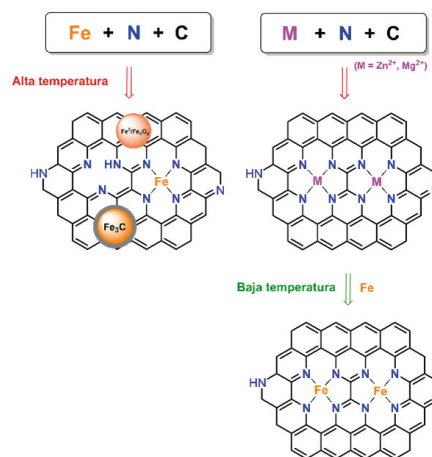


Figura 4. Comparación entre las técnicas sintéticas convencionales y la síntesis por transmetalación de Zn o Mg.

Debido a la alta cantidad de Zn coordinado a nitrógeno en la red metal-orgánica ZIF-8. Este material ha sido usado ampliamente para crear materiales ZnNC microporosos y reemplazar Zn por Fe (Figura 5). Jia y colaboradores emplearon deposición química de vapor para reemplazar Zn por Fe en un ZnNC derivado de un ZIF-8, obteniendo 1.92×10^{20} sitios activos por gramo de material y 33 mA cm^{-2} a 0.9 V , hasta la fecha la actividad catalítica más alta reportada con un electrodo de disco rotatorio.^[56] Kucernak y colaboradores emplearon un reflujo de metanol para reemplazar Zn por Fe y obtuvieron un 7% en peso de hierro atómicamente disperso que corresponde a 4.7×10^{19} y 7.8×10^{19} sitios por gramo calculado mediante adsorción de nitrito y monóxido de carbono, respectivamente, lo que equivale a una utilización electroquímica de un 6%.^[57] Esta utilización tan baja se debe a la microporosidad intrínseca de los ZIF; los ionómeros usados comúnmente para facilitar el transporte de protones y estabilizar el catalizador forman micelas de diámetros entre 2 y 20 nm, por lo que éstas no pueden penetrar en microporos menores de 2 nm y por lo tanto los reactivos no pueden ser transportados a los sitios activos que se encuentran en esos poros.^[58]

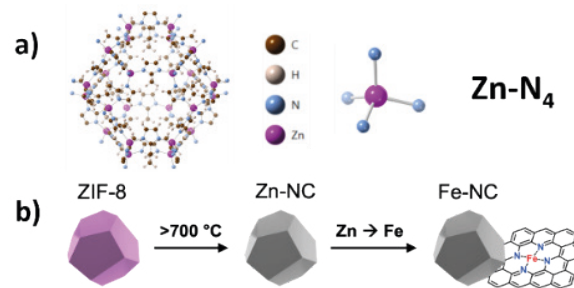


Figura 5. Estructura de ZIF-8 (a) y representación esquemática de su utilización como precursor en la síntesis de FeNC.

Para incrementar la utilización electroquímica, se necesitan sustratos que además de microporos, contengan un volumen sustancial de mesoporos que expongan los sitios activos en el electrolito. Titirici y colaboradores emplearon $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ como plantilla para obtener matrices carbonáceas de alta porosidad en combinación con 2,4,6 – Triaminopirimidina. Esta es una molécula similar a la melamina que posee tanto dadores como aceptores de enlaces hidrógeno que interactúa eficientemente con las moléculas de agua en la esfera de coordinación del $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ y que también muestra un punto de fusión a $235\text{ }^\circ\text{C}$, por lo tanto facilitando la polimerización en estado líquido.^[49] La pirólisis de la mezcla entre triaminopirimidina y $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ da lugar a un carbono dopado con nitrógeno con una superficie específica de más de $3200\text{ m}^2\text{ g}^{-1}$ y con un gran volumen de mesoporo, lo cual expone los sitios activos de Fe resultando en una utilización electroquímica de más de un 50 %, el valor más alto reportado hasta la fecha mediante adsorción de nitrito. Más tarde, Elbaz y colaboradores observaron que el gran tamaño de mesoporo de estos materiales requiere una cantidad más alta de ionómero para cubrir los sitios activos y facilitar el transporte de protones.^[58]

Barreras para la expansión industrial

Mientras el progreso reciente en la síntesis por transmetalación de materiales FeNC ha resultado en actividades catalíticas iniciales muy similares a la de Pt en una celda de combustible, todavía quedan muchos obstáculos que dificultan la expansión industrial de estos materiales, siendo la mayor barrera la baja estabilidad de estos catalizadores en las condiciones de operación de una celda de combustible.

Los materiales FeNC pueden degradarse a través de varios mecanismos dependiendo del electrolito empleado y el rango de potencial.^[59] a potenciales más positivos de 0.9 V vs RHE, la matriz de carbono se oxida en medio ácido lo que da lugar a su corrosión produciendo CO_2 .^[60] La matriz de carbono puede también ser dañada por la formación *in situ* de agua oxigenada mediante la reducción de oxígeno por transferencia de dos electrones (Figura 2c), que en combinación con hierro da lugar a reacciones tipo Fenton creando radicales oxidativos.^[61] En general, la selectividad de FeNC para la reducción de oxígeno por transferencia de 2 electrones es normalmente menor al 5%, sin embargo, el peróxido puede acumularse cuando se hacen medidas de estabilidad durante un periodo de tiempo prolongado, que mediante reacciones tipo Fenton catalizadas por partículas de hierro forman radicales $^{\circ}\text{OH}$ y HO_2° . Esto provoca que aun obteniendo catalizadores con buenos resultados en electrodo de disco rotatorio (RDE), la estabilidad se vea afectada cuando se mide en MEA. Para evitar la formación de radicales e incrementar la estabilidad, otros metales alternativos que no catalicen reacciones tipo Fenton han sido considerados durante los últimos años como el estaño o el cobalto.^[62,63]

Sin embargo, para mejorar la resistencia de FeNC a los ataques de radicales, Sun y colaboradores emplearon nanopartículas de CeO_2 , que, gracias a la química redox de Ce, son capaces de reaccionar con $\text{HO}_2^{\circ}(\text{Ce}^{4+})$ y $^{\circ}\text{OH}(\text{Ce}^{3+})$, y posteriormente regenerar el óxido en presencia de O_2 .^[64] Con CeO_2 , los cátodos de FeNC mostraron simplemente una caída del 28% en la actividad catalítica después de 30000 ciclos en una pila de combustible.

Finalmente, FeNC puede también degradarse mediante la disolución de iones Fe y su reprecipitación en forma de óxidos. Maillard y colaboradores demostraron mediante ICP acoplado a un electrodo de difusión de gas, que FeNC, en medio ácido

y a densidades de corriente de -15 mA cm^{-2} , sufre un cambio drástico en el pH local (a un pH 8-9) debido al consumo de protones, lo cual conduce a la agregación en óxidos de los iones disueltos en el electrolito.^[55]

Conversión electroquímica de dióxido de carbono

Los materiales FeNC pueden también ser usados para catalizar la conversión electroquímica de CO_2 (CO2RR). La reducción de CO_2 puede formar una gran variedad de productos; desde moléculas compuestas por un carbono como CO, CH_4 o CH_3OH a productos formados por varios (C2+) como etileno, etanol o propanol.^[65] Sin embargo, dado que normalmente se usa un electrolito acuoso, hidrógeno también puede ser producido mediante la reducción electroquímica del agua o reacción de evolución de hidrógeno (HER), lo que en ese caso es una reacción que compete con CO2RR y debe de ser minimizada.^[66]

Este proceso electroquímico tiene un sobrepotencial bastante alto debido a varios motivos, el primero siendo la transferencia de un electrón para crear un radical anión de CO_2^- que es estabilizado por los cationes en el electrolito y que conlleva la aplicación de un alto potencial.^[67] Y el resto emerge de la transferencia de varios protones y electrones, 8 en el caso de metano y 12 en el caso de etileno y de la relación lineal en las energías de adsorción de los intermedios de reacción (como en el caso de la ORR).

La selectividad de un catalizador frente a la CO2RR viene determinada por la energía de enlace a los intermedios de reacción relevantes, siendo estos el $^*\text{CO}$ y el $^*\text{H}$. Bagger y colaboradores demostraron empleando métodos teóricos y experimentales, que un catalizador con alta energía de enlace a $^*\text{CO}$ (como Fe, Pt, Ni o Pd) es incapaz de catalizar la subsecuente protonación y por lo tanto cataliza la HER (Figura 6a,b).^[68]

Un catalizador con una energía de enlace baja a $^*\text{CO}$ (como Ag o Au), resultará en la formación de CO con alta eficiencia faradaica (el ratio entre la corriente eléctrica utilizada para catalizar una reacción específica comparado con la carga eléctrica total utilizada para catalizar todas las reacciones).^[69] Finalmente, si un catalizador posee una energía de enlace ni muy fuerte ni muy débil hacia $^*\text{CO}$ y $^*\text{H}$, éste será capaz de acoplar dos moléculas de CO, o moléculas de CO con H y por lo tanto formar C2+. Sin embargo, hasta la fecha el único material capaz de realizar la formación de C2+ es Cu, que puede formar hasta 16 productos diferentes, aunque todos ellos con baja selectividad.^[70]

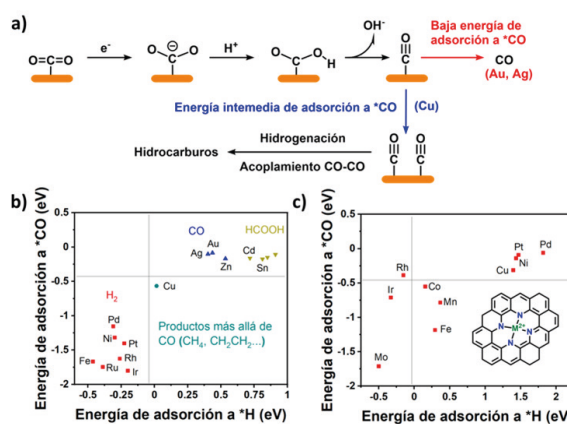


Figura 6. Representación del mecanismo de reacción en la conversión electroquímica de CO_2 (a) y de la actividad catalítica de metales (a) y MNC (b) dependiendo de sus energías de enlace a $^*\text{CO}$ y $^*\text{H}$. Reproducido de las referencias [68,71]

En comparación con los catalizadores metálicos como el Fe, Ni o Co, que en general son selectivos a la HER, los MNC muestran una selectividad muy diferente. FeNC por ejemplo tiene una energía de enlace a CO mucho menor que Fe metálico, lo que lo hace capaz de producir CO e incluso pequeñas cantidades de CH₄ como demostraron Varela y colaboradores.^[72] Entre todos los MNC, NiNC muestra la energía de enlace más baja a CO entre los metales abundantes (Figura 6b) y por lo tanto es el catalizador más selectivo y estable para la formación de CO,^[71] habiendo sido incluso utilizado a densidades de corrientes industriales por Strasser y colaboradores.^[73,74]

Debido a la pirólisis a alta temperatura requerida para sintetizar MNC, que conlleva la agregación de átomos metálicos en nanopartículas, los MNC siempre muestran cierta eficiencia faradaica hacia la reacción de evolución de hidrógeno, la cual emerge de partículas metálicas de Fe o Ni. Para evitar la agregación metálica y por lo tanto incrementar la producción de CO en lugar de H₂, Stephens y colaboradores emplearon la técnica sintética desarrollada por el grupo de Tiñirici, utilizando 2,4,6-Triaminopyrimidina y MgCl₂·6H₂O para formar FeNC y NiNC con superficie específica >3000 m² g⁻¹ y utilización electroquímica >60%. Los materiales mostraron una eficiencia faradaica para la producción de CO >90% en un amplio rango de potencial, y al calcular el TOF (asumiendo como número de sitios activos el obtenido mediante la adsorción y desorción de nitrito) observaron que la actividad catalítica intrínseca de dichos materiales, es tan alta como la de Ag y Au y que los materiales más activos del estado del arte se solapaban en términos de TOF como se muestra en la Figura 7.^[75] Esta figura contiene la actividad catalítica en términos de TOF_{CO₂RR} representado frente al potencial (vs RHE) de los materiales más activos del estado del arte en el momento de la publicación, como Fe³⁺NC desarrollado por Xile Hu y colaboradores,^[76] nanopartículas de Au derivadas de su óxido desarrollado por Kanan y colaboradores,^[77] nanohilos de Au desarrollados por Sun y colaboradores,^[78] o electrodos porosos de Ag desarrollados por Jiao y colaboradores, entre otros.^[79] El hecho de que la actividad catalítica intrínseca, en términos de TOF, de los materiales más activos del estado del arte, se solaparan, sugiere la existencia de una limitación fundamental en la reducción de CO₂. Su origen, al igual que

en el caso de ORR, puede emerger de la relación lineal de las energías de enlace entre los intermedios de reacción *COOH y *CO. Ya que la activación inicial de CO₂ a COOH es más sencilla en un sitio activo carbofílico (con mayor afinidad de enlace hacia el intermedio de reacción *COOH), mientras el segundo paso de la reacción, que conlleva la formación de *CO y su desorción, es más favorable en un sitio activo menos carbofílico (con una menor energía de enlace hacia *CO o *COOH). La relación lineal entre las energías de enlace entre los intermedios de reacción implica, que incluso los materiales más activos van a mostrar un cierto sobrepotencial necesario para catalizar la CO₂RR.^[80]

Conclusiones

Mientras Los materiales de un único átomo MNC se han posicionado como una gran alternativa sostenible al platino en celdas de combustible y al oro en electrolizadores de CO₂, su relativa baja estabilidad y la menor actividad catalítica comparados con metales nobles dificulta su expansión comercial. Con vistas a futuro, uno de los mayores obstáculos es ser capaz de sobrepasar la relación lineal de las energías de enlace entre intermedios de reacción, tanto en la reducción de oxígeno como en la de CO₂. Para ello, uno puede obtener inspiración de sistemas naturales como encima, las cuales poseen en general un sitio activo tridimensional con diferentes metales abundantes separados por distancias atómicas y que actúan de manera sinérgica.

Estos sistemas son capaces de romper las relaciones lineales y por lo tanto muestran un TOF substancialmente más alto que los catalizadores convencionales.^[80,81] Mientras que los estudios teóricos que han explorado sitios activos similares a encima (con más de un átomo metálico en proximidad atómica) sugieren una alta actividad catalítica,^[82-84] hoy en día no ha habido un trabajo experimental que demuestre sus ventajas frente a sistemas monoatómicos en términos de actividad intrínseca o selectividad.^[85-87]

Sin embargo, recientemente la combinación de sitios activos M-N₄ con electrodos de Ni o con nanopartículas de Cu, han resultado en la producción de productos C₂+ mediante métodos tandem,^[90-92] lo cual puede suponer la expansión de MNCs para satisfacer la producción de combustibles en la industria química y del transporte.^[93,94]

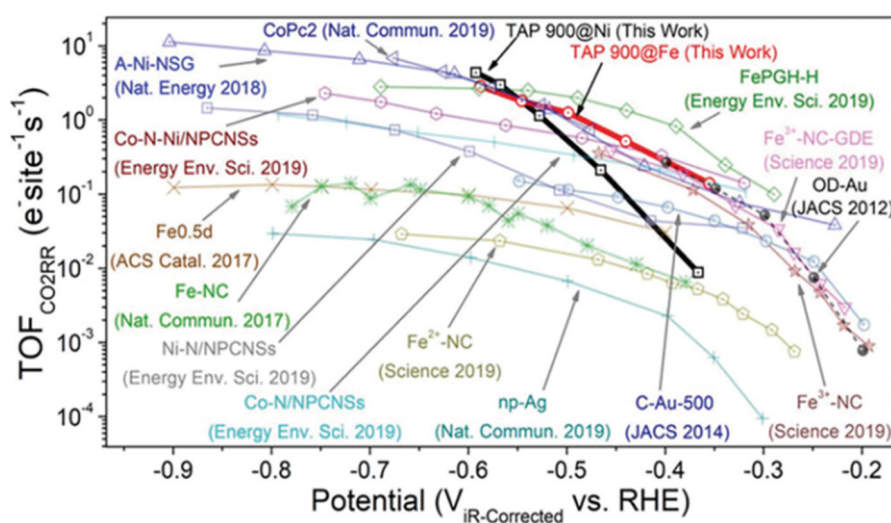


Figura 7. Comparación de la actividad catalítica de diferentes materiales basados en Au, Ag y MNC en términos de TOF. Obtenido de la referencia [75].

Agradecimientos

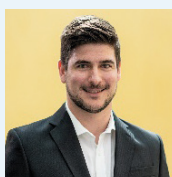
J.T. agradece el apoyo financiero a la beca DAAD 57540124. J.B. agradece el apoyo financiero al Imperial College London mediante el Proyecto ICRF.

Bibliografía

- [1] T. Wilberforce, A. Alaswad, A. Palumbo, M. Dassisi, A. G. Olabi, *Int. J. Hydrogen Energy* **2016**, *41*, 16509–16522. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.02.057>
- [2] J. K. Nørskov, J. Rossmeisl, A. Logadottir, L. Lindqvist, J. R. Kitchin, T. Bligaard, H. Jónsson, *J. Phys. Chem. B* **2004**, *108*, 17886–17892. <https://doi.org/10.1021/jp047349j>
- [3] A. J. Medford, A. Vojvodic, J. S. Hummelshøj, J. Voss, F. Abild-Pedersen, F. Studt, T. Bligaard, A. Nilsson, J. K. Nørskov, *J. Catal.* **2015**, *328*, 36–42. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2014.12.033>
- [4] P. C. K. Vesborg, T. F. Jaramillo, *RSC Adv.* **2012**, *2*, 7933–7947. <https://doi.org/10.1039/C2RA20839C>
- [5] H. A. Gasteiger, S. S. Kocha, B. Sompalli, F. T. Wagner, *Appl. Catal. B Environ.* **2005**, *56*, 9–35. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2004.06.021>
- [6] T. Asset, P. Atanassov, *Joule* **2020**, *4*, 33–44. <https://doi.org/10.1016/j.joule.2019.12.002>
- [7] T. Asset, F. Maillard, F. Jaouen, *Support. Met. Single Atom Catal.* **2022**, 531–582. <https://doi.org/10.1002/9783527830169.ch13>
- [8] A. Pedersen, A. Bagger, J. Barrio, F. Maillard, I. E. L. Stephens, M.-M. Titirici, *J. Mater. Chem. A* **2023**, *11*, 23211–23222. <https://doi.org/10.1039/D3TA04711C>
- [9] J. Barrio, A. Pedersen, S. Favero, H. Luo, M. Wang, S. C. Sarma, J. Feng, L. T. T. Ngoc, S. Kellner, A. Y. Li, A. B. Jorge Sobrido, M.-M. Titirici, *Chem. Rev.* **2023**, *123*, 2311–2348. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00429>
- [10] C. H. Kjaergaard, J. Rossmeisl, J. K. Nørskov, *Inorg. Chem.* **2010**, *49*, 3567–3572. <https://doi.org/10.1021/ic900798q>
- [11] A. Y. Li, A. Pedersen, J. Feng, H. Luo, J. Barrio, J. Roman, K. K. M. Hii, M.-M. Titirici, *Green Chem.* **2022**, *24*, 7574–7583. <https://doi.org/10.1039/D2GC02344J>
- [12] C. G. Claessens, U. Hahn, T. Torres, *Chem. Rec.* **2008**, *8*, 75–97. <https://doi.org/10.1002/tcr.20139>
- [13] L. Liu, A. Corma, *Chem. Rev.* **2018**, *118*, 4981–5079. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.7b00776>
- [14] Y. Sun, L. Silviali, N. R. Sahraie, W. Ju, J. Li, A. Zitolo, S. Li, A. Bagger, L. Arnarson, X. Wang, T. Moeller, D. Bernsmeier, J. Rossmeisl, F. Jaouen, P. Strasser, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 12372–12381. <https://doi.org/10.1021/jacs.9b05576>
- [15] A. H. Cook, *J. Chem. Soc.* **1938**, 1761–1768. <https://doi.org/10.1039/JR9380001761>
- [16] R. Jasinski, *Nature* **1964**, *201*, 1212–1213. <https://doi.org/10.1038/2011212a0>
- [17] S. Baranton, C. Coutanceau, C. Roux, F. Hahn, J.-M. Léger, *J. Electroanal. Chem.* **2005**, *577*, 223–234. <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2004.11.034>
- [18] H. Alt, H. Binder, G. Sandstede, *J. Catal.* **1973**, *28*, 8–19. [https://doi.org/10.1016/0021-9517\(73\)90173-5](https://doi.org/10.1016/0021-9517(73)90173-5)
- [19] S. Gupta, D. Tryk, I. Bae, W. Aldred, E. Yeager, *J. Appl. Electrochem.* **1989**, *19*, 19–27. <https://doi.org/10.1007/BF01039385>
- [20] M. Lefèvre, E. Proietti, F. Jaouen, J.-P. Dodelet, *Science (80-.)* **2009**, *324*, 71 LP – 74. DOI: 10.1126/science.1170051
- [21] G. Wu, K. L. More, C. M. Johnston, P. Zelenay, *Science (80-.)* **2011**, *332*, 443 LP – 447. DOI: 10.1126/science.120083
- [22] F. Jaouen, M. Lefèvre, J.-P. Dodelet, M. Cai, *J. Phys. Chem. B* **2006**, *110*, 5553–5558. <https://doi.org/10.1021/jp057135h>
- [23] X. Wan, X. Liu, Y. Li, R. Yu, L. Zheng, W. Yan, H. Wang, M. Xu, J. Shui, *Nat. Catal.* **2019**, *2*, 259–268. <https://doi.org/10.1038/s41929-019-0237-3>
- [24] E. Antolini, *Appl. Catal. B Environ.* **2009**, *88*, 1–24. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2008.09.030>
- [25] A. Serov, M. H. Robson, M. Smolnik, P. Atanassov, *Electrochim. Acta* **2012**, *80*, 213–218. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2012.07.008>
- [26] J. Y. Cheon, T. Kim, Y. Choi, H. Y. Jeong, M. G. Kim, Y. J. Sa, J. Kim, Z. Lee, T.-H. Yang, K. Kwon, O. Terasaki, G.-G. Park, R. R. Adzic, S. H. Joo, *Sci. Rep.* **2013**, *3*, 2715. <https://doi.org/10.1038/srep02715>
- [27] A. Han, B. Wang, A. Kumar, Y. Qin, J. Jin, X. Wang, C. Yang, B. Dong, Y. Jia, J. Liu, X. Sun, *Small Methods* **2019**, *3*, 1800471. <https://doi.org/10.1002/smt.201800471>
- [28] E. Proietti, F. Jaouen, M. Lefèvre, N. Larouche, J. Tian, J. Herranz, J.-P. Dodelet, *Nat. Commun.* **2011**, *2*, 416. <https://doi.org/10.1038/ncomms1427>
- [29] S. Ma, G. A. Goenaga, A. V Call, D. Liu, *Chem. Eur. J.* **2011**, *17*, 2063–2067. <https://doi.org/10.1002/chem.201003080>
- [30] C. Li, W. Ju, S. Vijay, J. Timoshenko, K. Mou, D. A. Cullen, J. Yang, X. Wang, P. Pachfule, S. Brückner, H. S. Jeon, F. T. Haase, S.-C. Tsang, C. Rettenmaier, K. Chan, B. R. Cuenya, A. Thomas, P. Strasser, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2022**, *61*, e202114707. <https://doi.org/10.1002/anie.202114707>
- [31] Á. Tolosana-Moranchel, Á. García, Á. García-Corral, J. F. Marco, L. Pascual, D. Liuzzi, M. A. Salam, P. Ferrer, J. Torrero, D. C. Grinter, G. Held, D. García Sánchez, K. A. Friedrich, M. Retuerto, S. Rojas, *J. Power Sources* **2023**, *578*, 233223. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2023.233223>
- [32] S. Yuan, J. Shui, L. Grabstanowicz, C. Chen, S. Commet, B. Repogle, T. Xu, L. Yu, D. Liu, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2013**, *52*. <https://doi.org/10.1002/anie.201302924>
- [33] Á. García, M. Retuerto, C. Dominguez, L. Pascual, P. Ferrer, D. Gianolio, A. Serrano, P. Assmann, D. G. Sanchez, M. A. Pena, *Appl. Catal. B Environ.* **2020**, *264*, 118507. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2019.118507>
- [34] P. Horcajada, T. Chalati, C. Serre, B. Gillet, C. Sebrie, T. Baati, J. F. Eubank, D. Heurtaux, P. Clayette, C. Kreuz, J.-S. Chang, Y. K. Hwang, V. Marsaud, P.-N. Bories, L. Cynober, S. Gil, G. Férey, P. Couvreur, R. Gref, *Nat. Mater.* **2010**, *9*, 172–178. <https://doi.org/10.1038/nmat2608>
- [35] S. Rojas, P. Horcajada, *Chem. Rev.* **2020**, *120*, 8378–8415. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00797>
- [36] L. J. Murray, M. Dincă, J. R. Long, *Chem. Soc. Rev.* **2009**, *38*, 1294–1314. <https://doi.org/10.1039/B802256A>
- [37] R. Ifraimov, R. Shimoni, W. He, G. Peng, I. Hod, *J. Mater. Chem. A* **2019**, *7*, 3046–3053. <https://doi.org/10.1039/C8TA10483B>
- [38] S. Couck, J. F. M. Denayer, G. V. Baron, T. Rémy, J. Gascon, F. Kapteijn, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 6326–6327. <https://doi.org/10.1021/ja900555r>
- [39] A. Corma, H. García, F. X. Llabrés i Xamena, *Chem. Rev.* **2010**, *110*, 4606–4655. <https://doi.org/10.1021/cr9003924>
- [40] V. Armel, S. Hindocha, F. Salles, S. Bennett, D. Jones, F. Jaouen, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 453–464. <https://doi.org/10.1021/jacs.6b11248>
- [41] J. López-Cabrelles, J. Romero, G. Abellán, M. Giménez-Marqués, M. Palomino, S. Valencia, F. Rey, G. Mínguez Espallargas, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 7173–7180. <https://doi.org/10.1021/jacs.9b02686>
- [42] L. Mazzoli, A. Pedersen, S. Kellner, R. D. Hunter, R. Cai, M. Wang, K. Sivula, S. J. Haigh, J. Barrio, *Green Chem.* **2024**, *26*, 3271–3280. <https://doi.org/10.1039/D3GC04645A>
- [43] M. Lefèvre, J. P. Dodelet, P. Bertrand, *J. Phys. Chem. B* **2000**, *104*, 11238–11247. <https://doi.org/10.1021/jp002444n>

- [44] U. I. Kramm, L. Ni, S. Wagner, *Adv. Mater.* **2019**, *31*, 1805623. <https://doi.org/10.1002/adma.201805623>
- [45] J. Li, M. T. Sougrati, A. Zitolo, J. M. Ablett, I. C. Oğuz, T. Mineva, I. Matanovic, P. Atanasov, Y. Huang, I. Zenyuk, A. Di Cicco, K. Kumar, L. Dubau, F. Maillard, G. Dražić, F. Jaouen, *Nat. Catal.* **2021**, *4*, 10–19. <https://doi.org/10.1038/s41929-020-00545-2>
- [46] R. D. Hunter, J. Ramírez-Rico, Z. Schnepf, *J. Mater. Chem. A* **2022**, *10*, 4489–4516. <https://doi.org/10.1039/D1TA09654K>
- [47] N. R. Sahráie, U. I. Kramm, J. Steinberg, Y. Zhang, A. Thomas, T. Reier, J.-P. Paraknowitsch, P. Strasser, *Nat. Commun.* **2015**, *6*, 8618. <https://doi.org/10.1038/ncomms9618>
- [48] D. Malko, A. Kucernak, T. Lopes, *Nat. Commun.* **2016**, *7*, 13285. <https://doi.org/10.1038/ncomms13285>
- [49] J. Barrio, A. Pedersen, S. C. Sarma, A. Bagger, M. Gong, S. Favero, C.-X. Zhao, R. Garcia-Serres, A. Y. Li, Q. Zhang, F. Jaouen, F. Maillard, A. Kucernak, I. E. L. Stephens, M.-M. Titirici, *Adv. Mater.* **2023**, *35*, 2211022. <https://doi.org/10.1002/adma.202211022>
- [50] A. Mehmood, J. Pampel, G. Ali, H. Y. Ha, F. Ruiz-Zepeda, T.-P. Fellingner, *Adv. Energy Mater.* **2018**, *8*, 1701771. <https://doi.org/10.1002/aenm.201701771>
- [51] D. Menga, F. Ruiz-Zepeda, L. Moriau, M. Šala, F. Wagner, B. Koyutürk, M. Bele, U. Petek, N. Hodnik, M. Gaberšček, T. Fellingner, *Adv. Energy Mater.* **2019**, *9*, 1902412. <https://doi.org/10.1002/aenm.201902412>
- [52] J. Pampel, A. Mehmood, M. Antonietti, T.-P. Fellingner, *Mater. Horizons* **2017**, *4*, 493–501. <https://doi.org/10.1039/C6MH00592F>
- [53] J. Pampel, C. Denton, T.-P. Fellingner, *Carbon N. Y.* **2016**, *107*, 288–296. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2016.06.009>
- [54] D. Menga, J. L. Low, A. G. Buzanich, B. Paulus, T.-P. Fellingner, *Adv. Energy Mater.* **2024**, *14*, 2400482. <https://doi.org/10.1002/aenm.202400482>
- [55] A. Pedersen, K. Kumar, Y.-P. Ku, V. Martin, L. Dubau, K. T. Santos, J. Barrio, V. A. Saveleva, P. Glatzel, V. K. Paidi, X. Li, A. Hutzler, M.-M. Titirici, A. Bonnefont, S. Cherevko, I. E. L. Stephens, F. Maillard, *Energy Environ. Sci.* **2024**, *17*, 6323–6337. <https://doi.org/10.1039/D4EE01995D>
- [56] L. Jiao, J. Li, L. L. Richard, Q. Sun, T. Stracensky, E. Liu, M. T. Sougrati, Z. Zhao, F. Yang, S. Zhong, H. Xu, S. Mukerjee, Y. Huang, D. A. Cullen, J. H. Park, M. Ferrandon, D. J. Myers, F. Jaouen, Q. Jia, *Nat. Mater.* **2021**, *20*, 1385–1391. <https://doi.org/10.1038/s41563-021-01030-2>
- [57] A. Mehmood, M. Gong, F. Jaouen, A. Roy, A. Zitolo, A. Khan, M. Sougrati, M. Primbs, A. M. Bonastre, D. Fongalland, G. Dražić, P. Strasser, A. Kucernak, *Nat. Catal.* **2022**, *5*, 311–323. <https://doi.org/10.1038/s41929-022-00772-9>
- [58] A. Pedersen, R. Z. Snitkoff-Sol, Y. Presman, J. Barrio, R. Cai, T. Suter, G. Yang, S. J. Haigh, D. Brett, R. Jervis, M.-M. Titirici, I. E. L. Stephens, L. Elbaz, *J. Power Sources* **2024**, *609*, 234683. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2024.234683>
- [59] K. Kumar, L. Dubau, F. Jaouen, F. Maillard, *Chem. Rev.* **2023**, *123*, 9265–9326. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00685>
- [60] C. H. Choi, C. Baldizzone, J.-P. Grote, A. K. Schuppert, F. Jaouen, K. J. J. Mayrhofer, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2015**, *54*, 12753–12757. <https://doi.org/10.1002/anie.201504903>
- [61] D. Meyerstein, *Nat. Rev. Chem.* **2021**, *5*, 595–597. <https://doi.org/10.1038/s41570-021-00310-4>
- [62] A. Zitolo, N. Ranjbar-Sahráie, T. Mineva, J. Li, Q. Jia, S. Stamatini, G. F. Harrington, S. M. Lyth, P. Krtil, S. Mukerjee, E. Fonda, F. Jaouen, *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 957. <https://doi.org/10.1038/s41467-017-01100-7>
- [63] F. Luo, A. Roy, L. Silvioli, D. A. Cullen, A. Zitolo, M. T. Sougrati, I. C. Oğuz, T. Mineva, D. Teschner, S. Wagner, J. Wen, F. Dionigi, U. I. Kramm, J. Rossmeisl, F. Jaouen, P. Strasser, *Nat. Mater.* **2020**, *19*, 1215–1223. <https://doi.org/10.1038/s41563-020-0717-5>
- [64] X. Cheng, X. Jiang, S. Yin, L. Ji, Y. Yan, G. Li, R. Huang, C. Wang, H. Liao, Y. Jiang, S. Sun, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2023**, *62*, e202306166. <https://doi.org/10.1002/anie.202306166>
- [65] R. Kortlever, J. Shen, K. J. P. Schouten, F. Calle-Vallejo, M. T. M. Koper, *J. Phys. Chem. Lett.* **2015**, *6*, 4073–4082. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.5b01559>
- [66] I. E. L. Stephens, K. Chan, A. Bagger, S. W. Boettcher, J. Bonin, E. Boutin, A. K. Buckley, R. Buonsanti, E. R. Cave, X. Chang, S. W. Chee, A. H. M. da Silva, P. de Luna, O. Einsle, B. Endrődi, M. Escudero-Escribano, J. V. Ferreira de Araujo, M. C. Figueiredo, C. Hahn, K. U. Hansen, S. Haussener, S. Huneğnar, Z. Huo, Y. J. Hwang, C. Janáky, B. S. Jayathilake, F. Jiao, Z. P. Jovanov, P. Karimi, M. T. M. Koper, K. P. Kuhl, W. H. Lee, Z. Liang, X. Liu, S. Ma, M. Ma, H.-S. Oh, M. Robert, B. R. Cuenya, J. Rossmeisl, C. Roy, M. P. Ryan, E. H. Sargent, P. Sebastián-Pascual, B. Seger, L. Steier, P. Strasser, A. S. Varela, R. E. Vos, X. Wang, B. Xu, H. Yadegari, Y. Zhou, *J. Phys. Energy* **2022**, *4*, 42003. <https://dx.doi.org/10.1088/2515-7655/ac7823>
- [67] M. C. O. Monteiro, F. Dattila, B. Hagedoorn, R. García-Muelas, N. López, M. T. M. Koper, *Nat. Catal.* **2021**, *4*, 654–662. <https://doi.org/10.1038/s41929-021-00655-5>
- [68] A. Bagger, W. Ju, A. S. Varela, P. Strasser, J. Rossmeisl, *ChemPhysChem* **2017**, *18*, 3266–3273. <https://doi.org/10.1002/cphc.201700736>
- [69] S. Mezzavilla, S. Horch, I. E. L. Stephens, B. Seger, I. Chorkendorff, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2019**, *58*, 3774–3778. <https://doi.org/10.1002/anie.201811422>
- [70] S. Nitopi, E. Bertheussen, S. B. Scott, X. Liu, A. K. Engstfeld, S. Horch, B. Seger, I. E. L. Stephens, K. Chan, C. Hahn, J. K. Nørskov, T. F. Jaramillo, I. Chorkendorff, *Chem. Rev.* **2019**, *119*, 7610–7672. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00705>
- [71] H. Wan, Y. Jiao, A. Bagger, J. Rossmeisl, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 533–541. <https://doi.org/10.1021/acscatal.0c04878>
- [72] A. S. Varela, N. Ranjbar Sahráie, J. Steinberg, W. Ju, H.-S. Oh, P. Strasser, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2015**, *54*, 10758–10762. <https://doi.org/10.1002/anie.201502099>
- [73] T. Möller, W. Ju, A. Bagger, X. Wang, F. Luo, T. Ngo Thanh, A. S. Varela, J. Rossmeisl, P. Strasser, *Energy Environ. Sci.* **2019**, *12*, 640–647. <https://doi.org/10.1039/C8EE02662A>
- [74] S. Brückner, Q. Feng, W. Ju, D. Galliani, A. Testolin, M. Klingenhof, S. Ott, P. Strasser, *Nat. Chem. Eng.* **2024**, *1*, 229–239. <https://doi.org/10.1038/s44286-024-00035-3>
- [75] S. C. Sarma, J. Barrio, A. Bagger, A. Pedersen, M. Gong, H. Luo, M. Wang, S. Favero, C.-X. Zhao, Q. Zhang, A. Kucernak, M.-M. Titirici, I. E. L. Stephens, *Adv. Funct. Mater.* **2023**, *33*, 2302468. <https://doi.org/10.1002/adfm.202302468>
- [76] G. Jun, H. Chia-Shuo, B. Lichen, C. H. Ming, H. Xile, *Science (80-.)* **2019**, *364*, 1091–1094. DOI: 10.1126/science.aaw7515
- [77] Y. Chen, C. W. Li, M. W. Kanan, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 19969–19972. <https://doi.org/10.1021/ja309317u>
- [78] W. Zhu, Y.-J. Zhang, H. Zhang, H. Lv, Q. Li, R. Michalsky, A. A. Peterson, S. Sun, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 16132–16135. <https://doi.org/10.1021/ja5095099>
- [79] Q. Lu, J. Rosen, Y. Zhou, G. S. Hutchings, Y. C. Kimmel, J. G. Chen, F. Jiao, *Nat. Commun.* **2014**, *5*, 3242. <https://doi.org/10.1038/ncomms4242>
- [80] H. A. Hansen, J. B. Varley, A. A. Peterson, J. K. Nørskov, *J. Phys. Chem. Lett.* **2013**, *4*, 388–392. <https://doi.org/10.1021/jz3021155>
- [81] C. H. Kjaergaard, J. Rossmeisl, J. K. Nørskov, *Inorg. Chem.* **2010**, *49*, 3567–3572. <https://doi.org/10.1021/ic900798q>

- [82] A. Pedersen, J. Barrio, A. Li, R. Jervis, D. J. L. Brett, M. M. Titirici, I. E. L. Stephens, *Adv. Energy Mater.* **2022**, *12*, 2102715. <https://doi.org/10.1002/aenm.202102715>
- [83] Y. Ouyang, L. Shi, X. Bai, Q. Li, J. Wang, *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 1807–1813. <https://doi.org/10.1039/C9SC05236D>
- [84] N. Karmodak, J. K. Nørskov, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2023**, *62*, e202311113. <https://doi.org/10.1002/anie.202311113>
- [85] S. C. Sarma, J. Barrio, M. Gong, A. Pedersen, A. Kucernak, M. Titirici, I. E. L. Stephens, *Electrochim. Acta* **2023**, 142855. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2023.142855>
- [86] Q. Hao, H. Zhong, J. Wang, K. Liu, J. Yan, Z. Ren, N. Zhou, X. Zhao, H. Zhang, D. Liu, X. Liu, L. Chen, J. Luo, X. Zhang, *Nat. Synth.* **2022**, *1*, 719–728. <https://doi.org/10.1038/s44160-022-00138-w>
- [87] J. Barrio, A. Pedersen, J. Feng, S. C. Sarma, M. Wang, A. Y. Li, H. Yadegari, H. Luo, M. P. Ryan, M.-M. Titirici, I. E. L. Stephens, *J. Mater. Chem. A* **2022**, *10*, 6023–6030. <https://doi.org/10.1039/D1TA09560A>
- [88] D. Hursán, J. Timoshenko, E. Ortega, H. S. Jeon, M. Rüscher, A. Herzog, C. Rettenmaier, S. W. Chee, A. Martini, D. Koshy, B. Roldán Cuenya, *Adv. Mater.* **2024**, *36*, 2307809. <https://doi.org/10.1002/adma.202307809>
- [89] D. Karapinar, N. T. Huan, N. Ranjbar Sahræie, J. Li, D. Wakerley, N. Touati, S. Zanna, D. Taverna, L. H. Galvão Tizei, A. Zitolo, F. Jaouen, V. Mougel, M. Fontecave, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2019**, *58*, 15098–15103. <https://doi.org/10.1002/anie.201907994>
- [90] M. Abdinejad, A. Farzi, R. Möller-Gulland, F. Mulder, C. Liu, J. Shao, J. Biemolt, M. Robert, A. Seifitokaldani, T. Burdyny, *Nat. Catal.* **2024**, *7*, 1109–1119. <https://doi.org/10.1038/s41929-024-01225-1>
- [91] N. Hongrutai, S. C. Sarma, Y. Zhou, S. Kellner, A. Pedersen, K. Adourian, H. Tyrrell, M. P. Ryan, J. Panpranot, J. Barrio, *J. Phys. Mater.* **2024**, *7*, 015007. <https://doi.org/10.1088/2515-7639/ad0d7c>
- [92] M. Wang, A. Loiudice, V. Okatenko, I. D. Sharp, R. Buonsanti, *Chem. Sci.* **2023**, *14*, 1097–1104. <https://doi.org/10.1039/D2SC06359J>
- [93] B. Belsa, L. Xia, F. P. García de Arquer, *ACS Energy Lett.* **2024**, *9*, 4293–4305. <https://doi.org/10.1021/acsenergylett.4c00955>
- [94] B. Belsa, L. Xia, V. Golovanova, B. Polesso, A. Pinilla-Sánchez, L. San Martín, J. Ye, C.-T. Dinh, F. P. García de Arquer, *Nat. Rev. Mater.* **2024**, *9*, 535–549. <https://doi.org/10.1038/s41578-024-00696-9>



Jorge F. Torrero

Departamento de Tecnología de Energía Electroquímica. Centro Aeroespacial Alemán

C-e: jorge.torrero@dlr.de
ORCID: 0000-0003-1277-5746

Nacido en Madrid (España). Doctor en electroquímica por la Universidad Autónoma de Madrid (UAM). Realizó su tesis doctoral en el Instituto de catálisis y petroquímica (ICP) del Consejo superior de investigaciones científicas (CSIC) con experiencia en el desarrollo y caracterización de catalizadores para pilas de combustible. Obtuvo una beca alemana (Beca DLR-DAAD) y empecé su carrera investigadora en la electrolisis en el centro aeroespacial alemán (DLR). Ha participado en diversos proyectos europeos, lo que se refleja en 15 artículos científicos en revistas de alto impacto y la participación en conferencias nacionales e internacionales.



Jesús Barrio Hermida

Departamento de Ingeniería Química, Imperial College London

C-e: j.barrio-hermida@imperial.ac.uk
ORCID: 0000-0002-4147-2667

Jesús obtuvo en la Universidad Autónoma de Madrid su grado en Química (2009) y Máster en Nanociencia y Nanotecnología Molecular (2014). Luego se trasladó al Instituto Max Planck (Alemania) para investigar sistemas fotocatalíticos basados en nitruro de carbono y posteriormente llevó a cabo su tesis doctoral en la Universidad de Ben Gurion del Negev (Israel). En 2020, empezó un postdoc en Imperial College London (UK) donde desarrolló electrocatalizadores basados en hierro, carbono y nitrógeno. En 2023, empezó su grupo de investigación en el Departamento de Ingeniería Química de Imperial College, donde trabaja en el diseño de materiales para dispositivos electroquímicos.

Complejos con ligandos sililo polidentados como catalizadores homogéneos en reacciones de hidrogenación e hidrosililación

Complexes with polydentate silyl ligands as homogeneous catalysts in hydrogenation and hydrosilylation reactions

Francisco José Fernández Álvarez

Departamento de Química Inorgánica – Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH).
Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza.

PALABRAS CLAVE:

Catálisis homogénea
Ligandos polidentados
Complejos metal-sililo
Hidrogenación
Hidrosililación

RESUMEN:

La química de los complejos de metales de transición con ligandos monoaniónicos bidentados $\kappa^2\text{-Si}_i\text{L}$ y/o tridentados $\kappa^3\text{-Si}_i\text{L}_2$ —donde Si_i simboliza un grupo sililo y L ligandos con grupos neutros dadores σ de un par de electrones—ha despertado un interés creciente en los últimos años. Esta revisión presenta los principales avances logrados en la aplicación de estos complejos como catalizadores en procesos clave, como son la hidrogenación y la hidrosililación de moléculas insaturadas.

KEYWORDS:

Homogeneous Catalysis
Polydentate Ligands
Metal-Silyl Complexes
Hydrogenation
Hydrosilylation

ABSTRACT:

The chemistry of transition metal complexes with monoanionic bidentate ligands $\kappa^2\text{-Si}_i\text{L}$ and/or tridentate $\kappa^3\text{-Si}_i\text{L}_2$ —where Si_i represents a silyl group and L ligands with neutral σ -donor groups—has gained increasing interest in recent years. This review highlights the advances achieved through the application of these complexes as catalysts in essential processes, such as the hydrogenation and hydrosilylation of unsaturated molecules.

Introducción

La actividad y selectividad de un catalizador homogéneo están íntimamente relacionadas con las propiedades estéricas y electrónicas del centro activo, por ello, el diseño y desarrollo de nuevos ligandos puede considerarse una de las temáticas más importantes dentro del marco de la catálisis homogénea.^[1] En dicho contexto, este artículo pretende ilustrar el desarrollo que, durante la última década, ha experimentado la química de los complejos de metales de transición con ligandos polidentados de tipo organosililo (Figura 1). Para ello, se han seleccionado procesos catalíticos de hidrogenación e hidrosililación de moléculas insaturadas, que emplean catalizadores organometálicos con este tipo de ligandos. Los ejemplos incluidos en este trabajo se refieren a complejos con ligandos de tipo $\kappa^2\text{-Si}_i\text{L}$ ^[2,3a] y $\kappa^3\text{-Si}_i\text{L}_2$ ^[3,4,5] En lo que respecta a catalizadores con ligandos tetradentados ($\kappa^4\text{-Si}_i\text{L}_3$)^[6] solo mencionar que hasta el momento su química está poco desarrollada.

En los complejos de tipo $\text{M}-(\kappa^2\text{-Si}_i\text{L})$ y $\text{M}-(\kappa^3\text{-Si}_i\text{L}_2)$ (M = metal de transición) incluidos en este trabajo, el grupo sililo (Si_i) y los grupos dadores (L = fosfano, amina, N-heterociclos, carbenos N-heterociclos, éteres, tioéteres, etc.) se encuentran unidos por una cadena de átomos de carbono y/o de átomos de carbono y heteroátomos. Este tipo de ligandos se caracteri-

zan por el fuerte carácter σ -dador del grupo sililo, que además ejerce un gran efecto (e influencia) "trans". Esto se traduce en el fortalecimiento del enlace M-Si_i , y el debilitamiento del enlace situado en posición "trans" al silicio, facilitando la generación de intermedios de reacción insaturados electrónica y coordinativamente.^[2-6] Además, se trata de ligandos muy versátiles ya que es sencillo ajustar tanto sus propiedades electrónicas como estéricas mediante la selección de los sustituyentes del átomo de silicio y la modificación de la naturaleza de los grupos dadores L .

Catalizadores homogéneos con ligandos de tipo $\kappa^n\text{-Si}_i\text{L}_{(n-1)}$ ($n = 2, 3$)

Hidrogenación de alquenos y alquinos

Uno de los primeros ejemplos de la aplicación de complejos de metales de transición con ligandos polidentados de tipo organosililo como catalizadores en procesos de hidrogenación de olefinas fue publicado por Tobita y colaboradores en 2014. Los complejos $[\text{Ir}(\text{Cl})(\kappa^3\text{-Si}_i\text{O}_2\text{-Si-xantsil})(\text{PCy}_3)]$ (**1**) y $[\text{Ir}(\text{Cl})(\kappa^2\text{-Si}_i\text{-Si-xantsil})(\text{PCy}_3)]$ (**2**), que se encuentran en equilibrio en disolución, reaccionan con H_2 para dar el complejo de $\text{Ir}(\text{V})$ $[\text{Ir}(\text{Cl})(\text{H})_2(\kappa^2\text{-Si}_i\text{-Si-xantsil})(\text{PCy}_3)]$ (**3**).^[7] La reacción de la especie **3** con 2,2-dimetilbut-1-eno produce el alcano correspondiente y regenera el complejo **1** (Esquema 1).

CÓMO CITAR: F.J. Fernández. *An. Quím. RSEQ* 2024, 120, 192-198, DOI: 10.62534/rseq.aq.2005

* Ce: paco@unizar.es

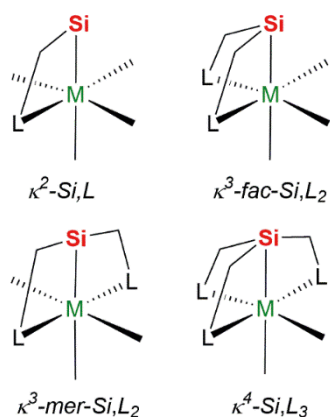
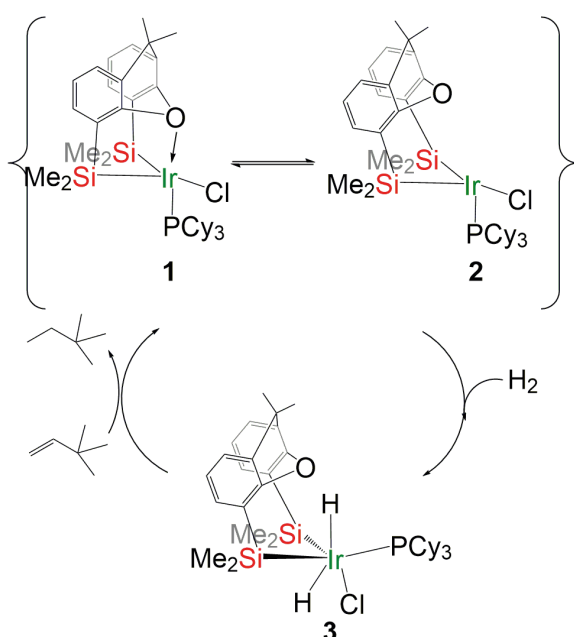
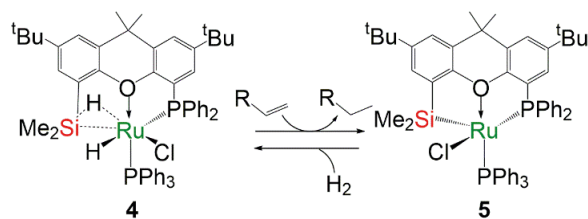


Figura 1. Modos de coordinación de ligandos monoaniónicos de tipo $\kappa^n\text{-Si}_n\text{L}_{(n-1)}$ ($n = 2, 3, 4$) a metales de transición.



Esquema 1. Hidrogenación de 2,2-dimetilbut-1-eno catalizada por especies de tipo $\text{Ir}-(\kappa^3\text{-Si}_2\text{O}_2\text{Si}) \rightleftharpoons \text{Ir}-(\kappa^2\text{-Si}_2\text{Si})$.

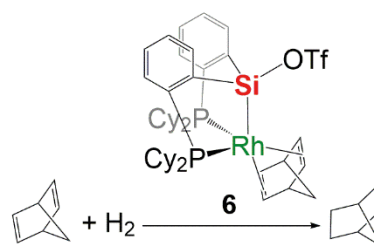
En 2015, el mismo grupo publicó la preparación del complejo $[\text{Ru}(\text{Cl})(\text{H})\{\kappa^4\text{-}(\text{Si}, \text{H}, \text{O}, \text{P})\text{-Bu}_2\text{xantSi}(\text{H})\text{P}\}(\text{PPh}_3)]$ (**4**) cuya reacción con estireno libera etilbenceno y da lugar a la formación de $[\text{Ru}(\text{Cl})\{\kappa^3\text{-}(\text{Si}, \text{O}, \text{P})\text{-Bu}_2\text{xantSiP}\}(\text{PPh}_3)]$ (**5**) (Esquema 2). El sistema **4** \rightleftharpoons **5** ha sido utilizado con éxito como catalizador de hidrogenación de α -olefinas.^[8]



Esquema 2. Reacción de $[\text{Ru}(\text{Cl})(\text{H})\{\kappa^4\text{-}(\text{Si}, \text{H}, \text{O}, \text{P})\text{-Bu}_2\text{xantSi}(\text{H})\text{P}\}(\text{PPh}_3)]$ (**4**) con α -olefinas.

En 2016, Whited y colaboradores demostraron que la especie $[\text{Rh}(\text{OTf})(\text{fac-}\kappa^3\text{-P}, \text{Si}, \text{P})(\eta^4\text{-norborneno})]$ (OTf = triflato; **6**) puede ser empleada como catalizador para la hidrogenación

de norborneno (Esquema 3).^[9] Estudios mecanísticos demostraron que este proceso transcurre a través de un mecanismo que involucra la adición oxidante de H_2 al Rh(I) para dar intermedios de Rh(III).^[9b]



Esquema 3. Reacción de hidrogenación de norborneno catalizada por el complejo **6**.

En 2018, el grupo de Turculet demostró que el complejo de Co(I) $[\text{Co}(\text{fac-}\kappa^3\text{-P}, \text{Si}, \text{P})(\text{N}_2)_2(\text{PMe}_3)]$ (**7**) (Figura 2) es moderadamente activo en procesos de hidrogenación de olefinas.^[10] Ese mismo año, también publicaron la síntesis de una familia de compuestos de Fe(II) del tipo $\text{Fe}-(\kappa^3\text{-P}, \text{Si}, \text{P})$ entre los que la especie $[\text{Fe}(\text{H})(\text{mer-}\kappa^3\text{-P}, \text{Si}, \text{P})(\text{N}_2)_2]$ (**8**) (Figura 2) destaca por ser un catalizador activo para la hidrogenación de una gran variedad de alquenos (terminales e internos).^[11] Posteriormente, el grupo de Turculet extendió sus estudios a complejos de Ni(I). En concreto el complejo $[\text{Ni}(\text{H})(\text{mer-}\kappa^3\text{-P}, \text{Si}, \text{P})]$ (**9**) demostró ser un catalizador selectivo en procesos de semihidrogenación de alquenos internos para dar el correspondiente *Z*-alqueno que posteriormente es isomerizado al *E*-alqueno. Este sistema catalítico puede ser utilizado con una amplia variedad de sustratos y opera en condiciones de trabajo suaves (1 atm de H_2 y 298 K) lo que lo convierte en uno de los más eficaces publicados hasta la fecha.^[12] En este caso el proceso de hidrogenación transcurre en dos etapas consistentes en (i) inserción del alqueno en el enlace Ni-H, y (ii) un proceso de metátesis de enlace sigma.

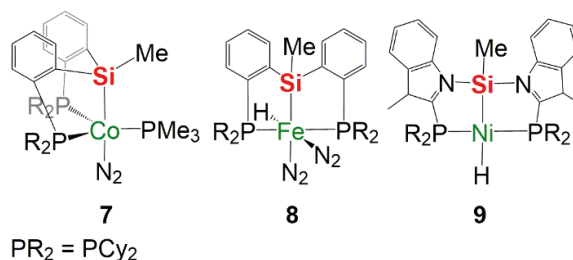


Figura 2. Catalizadores de tipo $\text{Co}-(\text{fac-}\kappa^3\text{-P}, \text{Si}, \text{P})$, $\text{Fe}-(\text{mer-}\kappa^3\text{-P}, \text{Si}, \text{P})$, y $\text{Ni}-(\text{mer-}\kappa^3\text{-P}, \text{Si}, \text{P})$ descritos por el grupo de Turculet.

Nagashima *et al.* publicaron en 2013 la síntesis y caracterización del complejo de Fe(II) $[\text{Fe}(\kappa^2\text{-Si}, \text{Si})(\kappa^4\text{-Si}, \text{H}, \text{Si}, \text{H})(\text{CO})_2]$ (**10**) (Figura 3) que mostró un buen desempeño catalítico en procesos de hidrogenación de alquenos tri- y tetrasustituídos.^[13] Recientemente, Komuro, Hashimoto y colaboradores, han preparado el precursor de Ir(III) $[\text{Ir}(\text{H})(\text{Me})(\kappa^2\text{-Si}, \text{N})(\text{coe})]$ (**11**) con un ligando monoaniónico bidentado de tipo sililo-1,8-naftiridina (Figura 3). El complejo **11** ha sido empleado como catalizador efectivo para la hidrogenación de alquenos terminales y cicloalquenos.^[14] En ese sentido, cabe mencionar que nuestro grupo de investigación ha publicado recientemente la síntesis del complejo $[\text{Rh}(\text{H})(\text{OTf})(\kappa^2\text{-Si}, \text{N})(\text{PCy}_3)]$ (**12**) (Figura 3) que

también demostró ser un catalizador activo en procesos de hidrogenación de alquenos funcionalizados.^[15]

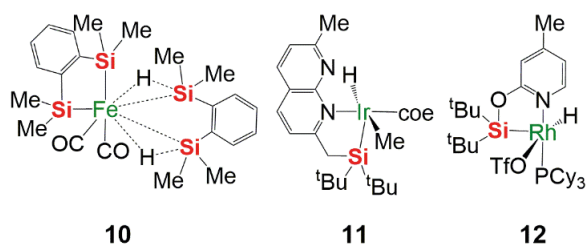
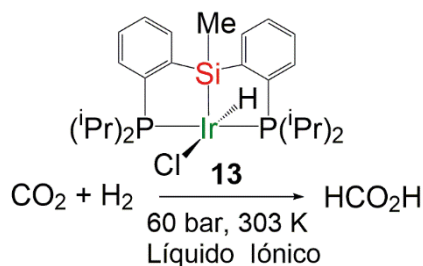


Figura 3. Ejemplos de catalizadores de tipo $M-(\kappa^2\text{-Si},L)$ efectivos en procesos de hidrogenación de olefinas.

Hidrogenación de CO_2

En 2020, Sola *et al.* publicaron que el sistema formado por el complejo $[\text{Ir}(\text{H})(\text{Cl})(\text{mer-}\kappa^3\text{-P,Si,P})]$ (**13**) y una mezcla de disolventes compuesta por acetato de 1,2-dimetil-3-butilimidazolio, DMSO y agua que cataliza la hidrogenación de CO_2 para producir ácido fórmico (Esquema 4).^[16] La actividad de dicho sistema catalítico es elevada y comparable a la obtenida para otros sistemas que emplean DMSO y agua como disolvente. En ausencia de 1,2-dimetil-3-butilimidazolio y/o de DMSO no se observa reacción catalítica.



Esquema 4. Reacción de hidrogenación de CO_2 catalizada por el complejo $[\text{Ir}(\text{H})(\text{Cl})(\text{mer-}\kappa^3\text{-P,Si,P})]$ (**13**).

Hidrosililación de alquenos

La hidrosililación de alquenos es una metodología sencilla y de gran economía atómica para la preparación de organosilanos, que son productos químicos de gran interés debido a su aplicación en diferentes industrias como, por ejemplo, las de siliconas, lubricantes y revestimientos repelentes al agua, entre otras. Uno de los desafíos a la hora de diseñar un catalizador de hidrosililación de alquenos es el control de la selectividad. Esto se debe a que además de los correspondientes productos de adición *anti*-Markovnikov y/o Markovnikov, en algunas ocasiones, tienen lugar reacciones de sililación deshidrogenante, hidrogenación e isomerización.

En 2013, el grupo Deng publicó que los complejos de $\text{Co}(\text{II})$ $[\text{Co}(\kappa^2\text{-Si,C-Si}(\text{Ph})(\text{R})\text{-IMes}')(\kappa^2\text{-C,C-IMes}')]$ (R = H, **14**; Me, **15**; Ph, **16**) (Figura 4) catalizan la reacción de 1-octeno con H_3SiR para dar una mezcla de compuestos que contiene el producto de adición *anti*-Markovnikov como producto mayoritario. La actividad de este tipo de catalizadores es moderada y depende de la naturaleza del sustituyente R, siendo el orden de actividad el siguiente **14** > **15** > **16**.^[17]

Posteriormente, Huertos *et al.* demostraron que los complejos catiónicos de tipo $\text{Rh}-(\kappa^2\text{-Si,S})$ (**17**, **18** y **19**)^[18] y $\text{Rh}-(\kappa^2\text{-Si,N})$ (**20**)^[19] (Figura 4) catalizan la isomerización de olefinas internas y la posterior hidrosililación de la olefina terminal resultante para

obtener de modo selectivo el producto de hidrosililación lineal. El sustituyente presente en el átomo de azufre del ligando influye en la actividad catalítica, siendo los complejos **18** y **19** más activos que el precursor **17**. El mismo grupo demostró que el complejo $[\text{Rh}(\text{H})(\text{fac-}\kappa^3\text{-S,Si,S})(\text{PPh}_3)]$ (**21**) (Figura 4), con un ligando monoaniónico tridentado, también es activo en procesos de isomerización y posterior hidrosililación de alquenos internos para dar el correspondiente organosilano lineal. Es interesante mencionar que la especie análoga $[\text{Ir}(\text{H})(\text{fac-}\kappa^3\text{-S,Si,S})(\text{PPh}_3)(\text{THF})]$ (**22**) (Figura 4), cataliza la isomerización de olefinas terminales pero no cataliza la hidrosililación de estas últimas, sino que promueve la reacción de sililación deshidrogenante de estas para dar lugar al correspondiente vinilsilano.^[20]

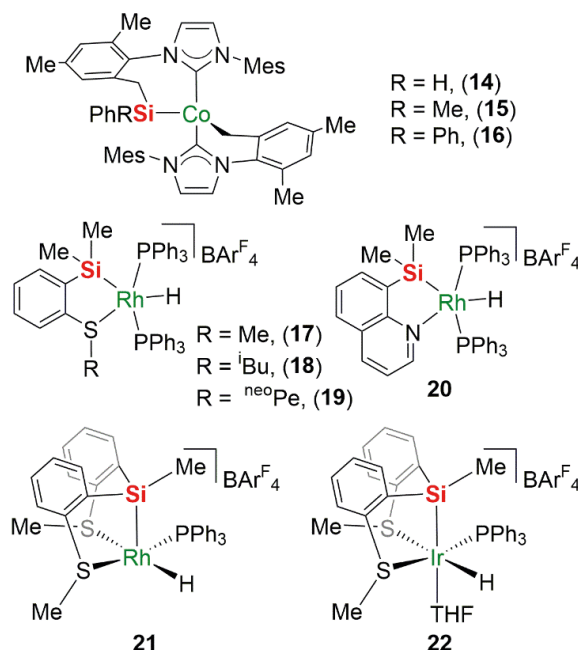


Figura 4. Ejemplos de catalizadores de hidrosililación de alquenos con ligandos $\kappa^2\text{-Si,L}$ y $\kappa^3\text{-Si,L}_2$.

En 2020, el grupo de Li demostró que el complejo de $\text{Co}(\text{II})$ $[\text{Co}(\text{fac-}\kappa^3\text{-P,Si,P})(\text{PMe}_3)_2]$ (**23**) (Figura 5) es un precursor catalítico eficaz para la hidrosililación de alquenos. La selectividad de este proceso depende en gran medida de la naturaleza de la olefina. Así, mientras que durante la hidrosililación de olefinas alifáticas se favorece la formación del producto *anti*-Markovnikov, la hidrosililación de derivados de estireno llevada a cabo en las mismas condiciones conduce a la formación del producto Markovnikov.^[21a] Un año más tarde, el mismo grupo publicó la síntesis del complejo de $\text{Co}(\text{III})$ $[\text{Co}(\text{H})(\text{Cl})(\text{fac-}\kappa^3\text{-P,Si,P})(\text{PPh}_3)_2]$ (**24**) (Figura 5) que demostró ser un catalizador efectivo en procesos de hidrosililación de olefinas.^[21b] A diferencia de lo observado cuando se utiliza **23**, las reacciones catalizadas por **24** conducen, independientemente de la naturaleza de la olefina, a la obtención del correspondiente producto *anti*-Markovnikov. Es destacable que en presencia de *N*-óxido de piridina el precursor **24** tiene un comportamiento análogo a **23**.

Hidrosililación de aldehídos, cetonas y amidas

Sun, Li y colaboradores han desarrollado la química de $\text{Fe}(\text{III})$ con ligandos de tipo $\kappa^3\text{-P,Si,P}$.^[22] Los complejos $[\text{Fe}(\text{H})(\text{mer-}\kappa^3\text{-P,Si,P})(\text{PPh}_3)_2]$ (**25**)^[22a] y $[\text{Fe}(\text{H})(\text{mer-}\kappa^3\text{-P,Si,P})(\text{PMe}_3)]$ (**26**)^[22b] (Figura 6) han demostrado ser precursores catalíticos activos en procesos de reducción de aldehídos y cetonas con $\text{HSi}(\text{OEt})_3$

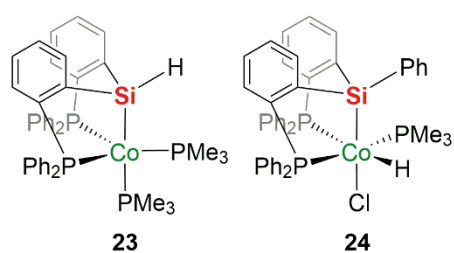


Figura 5. Ejemplos de catalizadores de hidrosililación de alquenos con ligandos de tipo $\kappa^3\text{-P,Si,P}$.

para, después del tratamiento con disoluciones acuosas de NaOH al 10 mol%, generar el alcohol correspondiente. En el caso del complejo **26** la adición de *N*-óxido de piridina permite la sustitución del ligando PMe_3 por piridina dando lugar a intermedios mucho más activos.^[22b] Posteriormente, el mismo grupo preparó el complejo $[\text{Fe}(\text{H})(\kappa^2\text{-Si,P})(\text{PMe}_3)_3]$ (**27**) (Figura 6), con un ligando bidentado, que también ha demostrado ser un catalizador activo en procesos de reducción de cetonas y aldehídos con $\text{HSi}(\text{OEt})_3$.^[23]

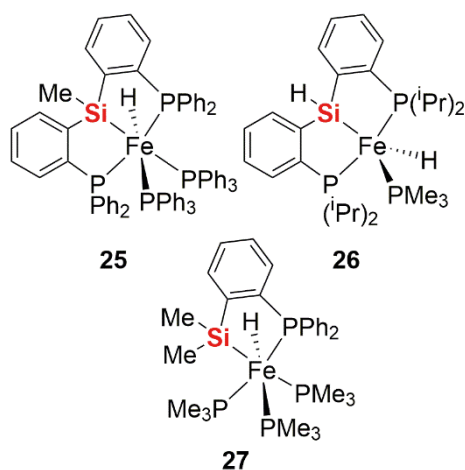
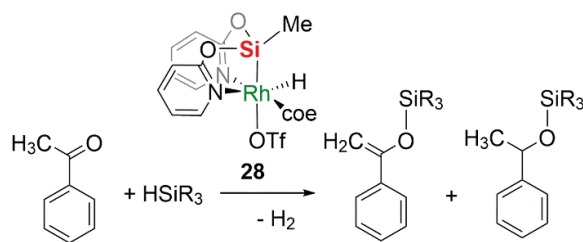


Figura 6. Ejemplos de catalizadores de Fe(III) efectivos en la reducción de aldehídos y cetonas con $\text{HSi}(\text{OEt})_3$.

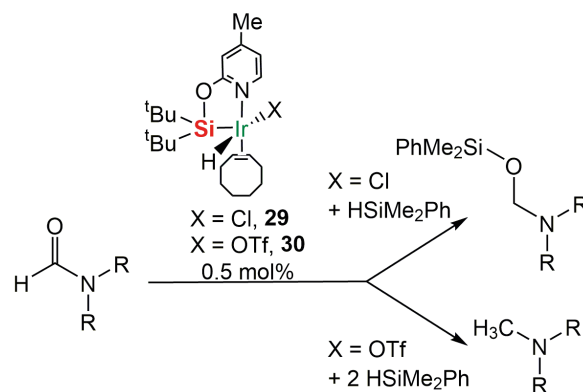
En ese contexto, nuestro grupo de investigación demostró que la reacción de diferentes derivados de acetofenona con silanos terciarios realizada en presencia del complejo de Rh(III) $[\text{Rh}(\text{H})(\text{OTf})(\text{fac-}\kappa^3\text{-N,Si,N})(\text{coe})]$ (**28**) conduce, cuando se realiza en un sistema abierto, a la formación del correspondiente silileno-éter como producto mayoritario de la reacción (>90%) junto con el sililéter (Esquema 5). Es interesante mencionar que cuando la reacción se realiza en un sistema cerrado la relación de los productos cambia siendo el sililéter el producto mayoritario. Este estudio propone que el silileno-éter es el producto cinético de la reacción y que la formación del correspondiente sililéter tiene lugar por la hidrogenación posterior del silileno-éter.^[24]

Recientemente, Huertos *et al.* han demostrado que el complejo de Ir(III) $[\text{Ir}(\text{H})(\text{fac-}\kappa^3\text{-S,Si,S})(\text{PPh}_3)(\text{THF})][\text{BARf}_4]$ (**22**) que previamente había sido utilizado como catalizador en procesos de isomerización/hidrosililación de alquenos internos, también es un catalizador activo en procesos de hidrosililación de aldehídos para dar el correspondiente sililéter.^[25]



Esquema 5. Reacción de acetofenona con silanos terciarios catalizada por el complejo $\text{Rh}(\text{fac-}\kappa^3\text{-N,Si,N})$ (**28**).

Finalmente, mencionar que nuestro grupo demostró que la naturaleza del ligando auxiliar (Cl vs OTf) condiciona la selectividad de los complejos de Ir(III) $[\text{Ir}(\text{H})(\text{X})(\kappa^2\text{-Si,N})(\text{coe})]$ (X = Cl, **29**; OTf, **30**) cuando actúan como catalizadores en procesos de reducción de formamidas con HSiMe_2Ph . Así, **29** con un ligando cloruro permite la preparación selectiva de hemiaminales *O*-sililados, mientras que en el caso del complejo **30** con un ligando triflato la reacción conduce a la correspondiente metilamina (Esquema 6).^[26]



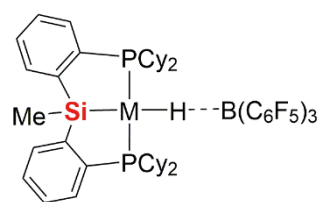
Esquema 6. Reducción de formamidas con HSiMe_2Ph catalizada por los complejos $[\text{Ir}(\text{H})(\text{X})(\kappa^2\text{-Si,N})(\text{coe})]$ (X = Cl, **29**; OTf, **30**).

Hidrosililación de CO_2

La reacción de CO_2 con hidrosilanos es un método termodinámicamente favorable y de gran economía atómica que permite su reducción a sililformiato. Sin embargo, se trata de un proceso cinéticamente impedido y por ello requiere el empleo de catalizadores. La selectividad de este tipo de reacciones representa un reto debido a que en las condiciones de reacción es frecuente la formación de mezclas de los correspondientes sililformiato, bis(sililacetal), metoxisilano, metilsililcarbonato y metano.^[27]

En 2012, el grupo de Turculet publicó que mediante el empleo de complejos de tipo $[\text{M}(\text{HB}(\text{C}_6\text{F}_5)_3)(\kappa^3\text{-P,Si,P})]$ (M = Pt, **31**; Pd, **32**) (Figura 7) como catalizadores es posible la reducción de CO_2 a metano empleando HSiMe_2Ph como reductor.^[28]

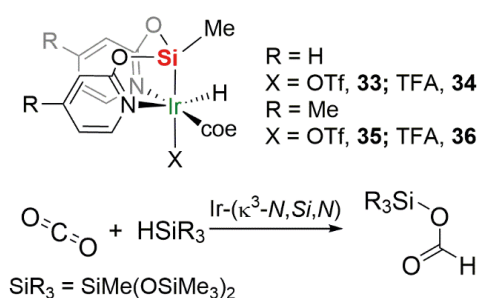
Ese mismo año, nuestro grupo de investigación publicó que mediante el empleo de complejos de Ir(III) de tipo $\text{Ir}(\text{fac-}\kappa^3\text{-N,Si,N})$ es posible la reducción selectiva de CO_2 a sililformiato en ausencia de disolvente empleando $\text{HSiMe}(\text{OSiMe}_3)_2$ como reductor y medio de reacción (Esquema 7).^[29a] Estudios posteriores demostraron que la naturaleza del ligando ($\kappa^3\text{-N,Si,N}$) y del ligando auxiliar influye notablemente en la actividad catalítica de este tipo de complejos, siendo el complejo **36** con un sustituyente 4-Me en los anillos piridona y un ligando trifluoroacetato (TFA) el precursor catalítico más activo (Esquema 7).^[29b,c]



M = Pt, **31**; Pd, **32**

Figura 7. Precursores de tipo $[M(HB(C_6F_5)_3)(\kappa^3-P,Si,N)]$ (M = Pt, **31**; Pd, **32**).

Posteriormente, nuestro grupo demostró que utilizando el complejo de Ir(III) $[Ir(\kappa^2-O_2CCF_3)(\kappa^2-Si,N)_2]$ (**37**), con dos ligandos bidentados de tipo κ^2-Si,N en vez de uno tridentado de tipo κ^3-N,Si,N , como precursor catalítico es posible llevar a cabo la reducción selectiva de CO_2 con $HSiMe(OSiMe_3)_2$ al correspondiente metoxisilano, $CH_3OSiMe(OSiMe_3)_2$, o si-



Esquema 7. Reacción de reducción de CO_2 con $HSiMe(OSiMe_3)_2$ catalizada por complejos de tipo $Ir-(\kappa^3-N,Si,N)$. TFA = O_2CCF_3 , trifluoroacetato.

lilformiato, $HCO_2SiMe(OSiMe_3)_2$ (Figura 8). La selectividad de este sistema catalítico se puede modular fácilmente mediante el control de la presión de CO_2 : a baja presión (1 bar) se obtiene el metoxisilano, mientras que a 4 bares de presión se obtiene el correspondiente sililformiato.^[30a] Cuando al sistema catalítico **37** / $HSiMe(OSiMe_3)_2$ se le añade $B(C_6F_5)_3$ la selectividad cambia y la reacción conduce a la formación del correspondiente bis(sililacetal). En este sentido, cabe mencionar que el complejo **37** reacciona instantáneamente con $B(C_6F_5)_3$ para dar lugar a la formación de la especie $[Ir(\kappa^1-O\{OB(C_6F_5)_3\}CCF_3)(\kappa^2-Si,N)_2]$ (**38**), que ha podido ser caracterizada mediante RMN y rayos-X y que en este caso actúa como el precursor catalítico (Figura 8).^[30b]

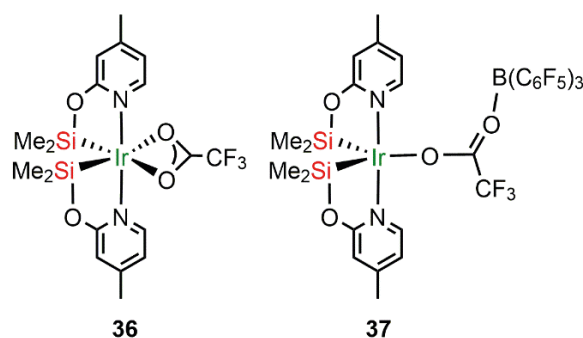
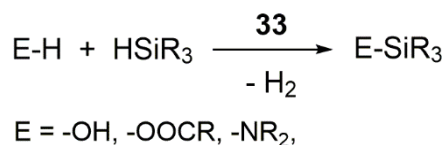


Figura 8. Especies $[Ir(\kappa^2-O_2CCF_3)(\kappa^2-Si,N)_2]$ (**37**) y $[Ir(\kappa^1-O\{OB(C_6F_5)_3\}CCF_3)(\kappa^2-Si,N)_2]$ (**38**) empleadas como precursores catalíticos en la reducción de CO_2 con $HSiMe(OSiMe_3)_2$.

Sililación deshidrogenante de enlaces OH y NH

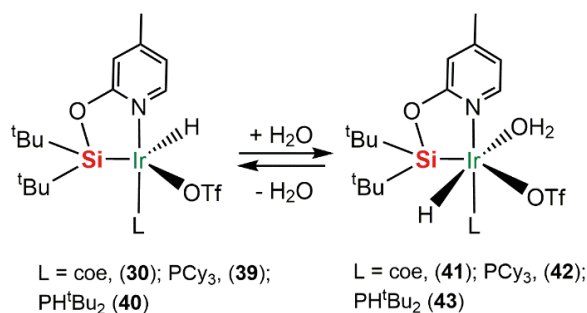
Nuestro grupo de investigación ha demostrado que el complejo $[Ir(H)(OTf)(\kappa^3-N,Si,N)(coe)]$ (**33**) es, además, un precursor catalítico activo en procesos de hidrólisis de silanos,^[31] sililación deshidrogenante de ácidos carboxílicos^[32] y sililación deshidrogenante de aminas^[33] para generar el correspondiente silanol, sililéster o sililamina, respectivamente (Esquema 8).



Esquema 8. Sililación deshidrogenante de enlaces OH y NH catalizada por el complejo **33**.

Posteriormente, Freixa, Huertos *et al.* demostraron que el complejo catiónico $[Ir(H)(\kappa^3-S,Si,S)(PPh_3)(THF)][BA^+]$ (**22**) cataliza procesos de hidrólisis de hidrosilanos. Siendo destacable el gran efecto isotópico (KIE = 346) que ha sido asociado a un efecto de túnel cuántico.^[34]

Recientemente, nuestro grupo ha demostrado que complejos insaturados de tipo $[Ir(H)(OTf)(\kappa^2-Si,N)(L)]$ (L = coe, **30**; PCy_3 , **39**; PH^tBu_2 , **40**) también son activos en procesos de hidrólisis selectiva de silanos para generar el correspondiente silanol. Estudios de RMN de 1H demostraron que estas especies coordinan una molécula de agua dando lugar a la formación del correspondiente complejo $[Ir(H)(OTf)(\kappa^2-Si,N)(OH_2)(L)]$ (L = coe, **41**; PCy_3 , **42**; PH^tBu_2 , **43**), dichos acuo complejos han sido caracterizados mediante RMN y rayos-X (Esquema 9).^[35] El complejo de Rh(III) $[Rh(H)(OTf)(\kappa^2-Si,N)(PCy_3)]$ (**12**) análogo a **39** no es activo en procesos de hidrólisis de silanos lo que prueba que el centro metálico juega un papel en este tipo de reacciones.



Esquema 9. Coordinación reversible de agua a los complejos $[Ir(H)(OTf)(\kappa^2-Si,N)(L)]$ (L = coe, **30**; PCy_3 , **39**; PH^tBu_2 , **40**).

Naturaleza del enlace M-Si en complejos $M(\kappa^n-Si,N_{(n-1)})$ (n = 2, 3)

Hasta la fecha, se han publicado pocos estudios sobre la naturaleza del enlace M-Si en este tipo de complejos. Por ello, es difícil establecer una tendencia general de comportamiento. En el caso de los complejos de rodio e iridio con ligandos κ^3-N,Si,N ^[5] y κ^2-Si,N ^[2a] las distancias de enlace M-Si se encuentran entre 2,23-2,29 Å para Rh y 2,25-2,29 Å para Ir, siendo más cortas de lo que cabría esperar para un enlace metal-sililo.

Estudios teóricos basados en el Análisis de Descomposición Energética (EDA) en combinación con otros métodos realizados para complejos de tipo $Ir-(\kappa^3-N,Si,N)$,^[36] $Ir-(\kappa^2-Si,N)$ ^[35] y $Rh-(\kappa^2-Si,N)$ ^[15] mostraron la naturaleza covalente del enlace M-Si

y que la retrodonación desde los orbitales d del metal a los orbitales σ^* del silicio es muy pequeña, por lo que no puede ser el origen de la fortaleza de este tipo de enlaces. Lo más remarkable de estos estudios, es que se encontró que la contribución de la componente electrostática del enlace es casi el doble que la suma de las interacciones orbitales. Este hecho indica que en estos complejos el enlace M–Si puede entenderse como un enlace covalente altamente polarizado, lo que explica tanto el acortamiento de las distancias de enlace M–Si ($M = \text{Rh}, \text{Ir}$) en este tipo de complejos como su inercia química. El acortamiento del enlace se debe principalmente a la contribución de la componente electrostática, ya que la retrodonación de densidad electrónica desde los orbitales d del metal a los orbitales σ^* del silicio es considerablemente baja.

Conclusiones

La química de los complejos de metales de transición con ligandos monoaniónicos de tipo $\kappa^2\text{-Si}, \text{L}$ y $\kappa^3\text{-Si}, \text{L}_2$, ha experimentado un gran desarrollo durante la última década, parte importante del mismo protagonizado por grupos de investigación españoles. Entre las propiedades de este tipo de ligandos se encuentran el fuerte carácter σ -dador y el gran efecto e influencia *trans* del grupo sililo que en su conjunto facilitan la generación de especies metálicas electrónicas y coordinativamente insaturadas. En cuanto a las aplicaciones de este tipo de complejos, cabe mencionar que han demostrado ser catalizadores eficaces en procesos de hidrosililación catalítica de alquenos, amidas y CO_2 , procesos de hidrogenación selectiva de olefinas y procesos de hidrólisis de silanos entre otros. Curiosamente, algunas especies $M-(\kappa^2\text{-Si}, \text{L})$ han resultado ser más activas que sus contrapartes $M-(\kappa^3\text{-L}, \text{Si}, \text{L})$, lo que ha sido atribuido a efectos estéricos. El mecanismo de este tipo de procesos depende de la naturaleza del grupo dador, en procesos catalizados por complejos con ligandos de tipo $\kappa^2\text{-Si}, \text{N}$ o $\kappa^3\text{-N}, \text{Si}, \text{N}$ son habituales los mecanismos de metátesis de enlace sigma mientras que en el caso de catalizadores con ligandos $\kappa^2\text{-Si}, \text{P}$ o $\kappa^3\text{-P}, \text{Si}, \text{P}$ los mecanismos clásicos de adición oxidante/eliminación reductora son igualmente posibles.

Las distancias de enlace M–Si en este tipo de compuestos suelen ser más cortas de lo que cabría esperar para un enlace metal–sililo. En el caso de complejos de $M-(\kappa^3\text{-N}, \text{Si}, \text{N})$ y $M-(\kappa^2\text{-Si}, \text{N})$ ($M = \text{Rh}, \text{Ir}$) este acortamiento es consecuencia del papel significativo de las atracciones electrostáticas entre el fragmento metálico y el ligando.

La química de los complejos de metales de transición con ligandos sililados polidentados se encuentra aún en una etapa de crecimiento. En este momento, la química de este tipo de ligandos está dominada por Rh e Ir, aunque se conocen algunos ejemplos de complejos de Fe, Co y Ni. Es de esperar que en los próximos años se amplíe no solo el número de procesos catalíticos en los que este tipo de complejos puedan ser aplicados, sino que además se extienda su empleo a metales del primer periodo de transición.

Agradecimientos

El autor agradece la financiación de los proyectos PID2021-126212OB-I00 por parte de la Agencia Estatal de Investigación Española y E42_23R del Gobierno de Aragón.

Bibliografía

[1] R. J. Lundgren, M. Stradiotto, Key Concepts in Ligand Design. In Ligand Design in Metal Chemistry: Reactivity and Catalysis (Eds: M. Stradiotto, R. J. Lundgren). Wiley, Weinheim, 2016, <https://doi.org/10.1002/9781118839621.ch1>.

- [2] a) M. Batuecas, A. Gómez-España, F. J. Fernández-Álvarez, *Chem-PlusChem* **2024**, 89, e202400162, <https://doi.org/10.1002/cplu.202400162>, b) M. Okazaki, S. Ohshitani, M. Iwata, H. Tobita, H. Ogino, *Coord. Chem. Rev.* **2002**, 226, 167–178, [https://doi.org/10.1016/S0010-8545\(01\)00422-2](https://doi.org/10.1016/S0010-8545(01)00422-2).
- [3] a) J. Gao, Y. Ge, C. He, *Chem. Soc. Rev.* **2024**, 53, 4648–4673, <https://doi.org/10.1039/D3CS00893B>; b) J. A. Cabeza, P. García-Álvarez, *Chem. Eur. J.* **2023**, 29, e202203096, <https://doi.org/10.1002/chem.202203096>; c) T. Komuro, Y. Nakajima, J. Takaya, H. Hashimoto, *Coord. Chem. Rev.* **2022**, 473, 214837; <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2022.214837>; d) M. T. Whited, *Dalton Trans.* **2021**, 50, 16443–16450, <https://doi.org/10.1039/D1DT02739E>; e) M. Simon, F. Breher, *Dalton Trans.* **2017**, 46, 7976–7997, <https://doi.org/10.1039/C7DT02085F>.
- [4] a) M. Tanabe, K. Osakada, *Transition Metal Complexes of Silicon (Excluding Silylene Complexes)*, Chapter 2, in *Organosilicon Compounds, Theory and Experiment (Synthesis)* (Ed.: V. Y. Lee), Academic Press, London, 2017, <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-801981-8.00002-2>; b) E. Sola, *Silicon-based pincers: trans influence and functionality*. Chapter 19, in *Pincer Compounds: Chemistry and Applications*, (Ed.: D. Morales-Morales) Elsevier, 2018, <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-812931-9.00019-0>.
- [5] F. J. Fernández-Álvarez, R. Lalrempuia, L. A. Oro, *Coord. Chem. Rev.* **2017**, 350, 49–60, <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2017.04.011>.
- [6] a) J. Wagler, R. Gericke, *Polyhedron* **2023**, 245, 116663, <https://doi.org/10.1016/j.poly.2023.116663>; b) P. Zhang, S. Xu, X. Li, X. Qi, H. Sun, O. Fuhr, D. Fenske, *Polyhedron* **2018**, 143, 165–170, <https://doi.org/10.1016/j.poly.2017.09.043>.
- [7] T. Komuro, K. Furuyama, T. Kitano, H. Tobita, *J. Organomet. Chem.* **2014**, 751, 686–694, <https://doi.org/10.1016/j.jorganchem.2013.09.009>.
- [8] T. Komuro, T. Arai, K. Kikuchi, H. Tobita, *Organometallics* **2015**, 34, 1211–1217, <https://doi.org/10.1021/om5011885>.
- [9] a) M. T. Whited, A. M. Deetz, T. M. Donnell, D. E. Janzen, *Dalton Trans.* **2016**, 45, 9758–9761, <https://doi.org/10.1039/C6DT00027D>; b) M. T. Whited, M. J. Trenery, K. E. DeMeulenaere, B. L. H. Taylor, *Organometallics* **2019**, 38, 1493–1501, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.8b00922>.
- [10] L. J. Murphy, A. J. Ruddy, R. McDonald, M. J. Ferguson, L. Turculet, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2018**, 4481–4493, <https://doi.org/10.1002/ejic.201800915>.
- [11] L. J. Murphy, M. J. Ferguson, R. McDonald, M. D. Lumsden, L. Turculet, *Organometallics* **2018**, 37, 4814–4826, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.8b00807>.
- [12] D. J. Hale, M. J. Ferguson, L. Turculet, *ACS Catal.* **2022**, 12, 146–155, <https://doi.org/10.1021/acscatal.1c04537>.
- [13] Y. Sunada, H. Tsutsumi, K. Shigeta, R. Yoshida, T. Hashimoto, H. Nagashima, *Dalton Trans.* **2013**, 42, 16687–16692, <https://doi.org/10.1039/C3DT52598H>.
- [14] K. Sato, T. Komuro, T. Osawa, H. Hashimoto, H. Tobita, *Organometallics* **2022**, 41, 2612–2621, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.2c00373>.
- [15] A. Gómez-España, P. García-Orduña, F. J. Lahoz, I. Fernández, F. J. Fernández-Álvarez, *Organometallics* **2024**, 43, 402–413, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.3c00498>.
- [16] R. Webber, M. I. Qadir, E. Sola, M. Martín, E. Suárez, J. Dupont, *Catal. Commun.* **2020**, 146, 106125, <https://doi.org/10.1016/j.catcom.2020.106125>.
- [17] Z. Mo, Y. Liu, L. Deng, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, 52, 10845–10849, <https://doi.org/10.1002/anie.201304596>.
- [18] U. Prieto, S. Azpeitia, E. San Sebastián, Z. Freixa, M. A. Garralda, M. A. Huertos, *ChemCatChem* **2021**, 13, 1403–1409, <https://doi.org/10.1002/cctc.202001699>.

- [19] U. Prieto-Pascual, A. Martínez de Morentín, D. Choquesillo-Lazarte, A. Rodríguez-Diéguez, Z. Freixa, M. A. Huertos, *Dalton Trans.* **2023**, 52, 9090–9096, <https://doi.org/10.1039/D3DT00624G>.
- [20] S. Azpeitia, A. Rodríguez-Diéguez, M. A. Garralda, M. A. Huertos, *ChemCatChem* **2018**, 10, 2210–2213, <https://doi.org/10.1002/cctc.201800159>.
- [21] a) Y. Dong, P. Zhang, Q. Fan, X. Du, S. Xie, H. Sun, X. Li, O. Fuhr, D. Fenske, *Inorg. Chem.* **2020**, 59, 16489–16499, <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c02332>; b) Y. Dong, S. Xie, P. Zhang, Q. Fan, X. Du, H. Sun, X. Li, O. Fuhr, D. Fenske, *Inorg. Chem.* **2021**, 60, 4551–4562, <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c03483>.
- [22] a) S. Wu, X. Li, Z. Xiong, W. Xu, Y. Lu, H. Sun, *Organometallics* **2013**, 32, 3227–3237, <https://doi.org/10.1021/om400047j>; b) G. Chang, P. Zhang, W. Yang, S. Xie, H. Sun, X. Li, O. Fuhr, D. Fenske, *Dalton Trans.* **2020**, 49, 9349–9354, <https://doi.org/10.1039/D0DT00392A>.
- [23] S. Ren, S. Xie, T. Zheng, Y. Wang, S. Xu, B. Xue, X. Li, H. Sun, O. Fuhr, D. Fenske, *Dalton Trans.* **2018**, 47, 4352–4359, <https://doi.org/10.1039/C8DT00289D>.
- [24] K. Garcés, R. Lalrempuia, V. Polo, F. J. Fernández-Alvarez, P. García-Orduña, F. J. Lahoz, J. J. Pérez-Torrente, L. A. Oro, *Chem. Eur. J.* **2016**, 22, 14717–14729, <https://doi.org/10.1002/chem.201602760>.
- [25] I. Bustos, C. Mendicutie-Fierro, M. A. Huertos, *Organometallics* **2024**, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.4c00234>.
- [26] J. Guzmán, A. M. Bernal, P. García-Orduña, F. J. Lahoz, L. A. Oro, F. J. Fernández-Alvarez, *Dalton Trans.* **2019**, 48, 4255–4262, <https://doi.org/10.1039/C8DT05070H>.
- [27] F. J. Fernández-Alvarez, L. A. Oro, *ChemCatChem* **2018**, 10, 4783–4796, <https://doi.org/10.1002/cctc.201800699>.
- [28] S. J. Mitton, L. Turculet, *Chem. Eur. J.* **2012**, 18, 15258–15262, <https://doi.org/10.1002/chem.201203226>.
- [29] a) R. Lalrempuia, M. Iglesias, V. Polo, P. J. San Miguel, F. J. Fernández-Alvarez, J. J. Pérez-Torrente, L. A. Oro, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, 51, 12824–12827, <https://doi.org/10.1002/anie.201206165>; b) A. Julián, E. A. Jaseer, K. Garcés, F. J. Fernández-Alvarez, P. García-Orduña, F. J. Lahoz, L. A. Oro, *Catal. Sci. Technol.* **2016**, 6, 4410–4417, <https://doi.org/10.1039/C5CY02139A>; c) A. Julián, J. Guzmán, E. A. Jaseer, F. J. Fernández-Alvarez, R. Royo, V. Polo, P. García-Orduña, F. J. Lahoz, L. A. Oro, *Chem. Eur. J.* **2017**, 23, 11898–11907, <https://doi.org/10.1002/chem.201702246>.
- [30] a) J. Guzmán, P. García-Orduña, V. Polo, F. J. Lahoz, L. A. Oro, F. J. Fernández-Alvarez, *Catal. Sci. Technol.* **2019**, 9, 2858–2867, <https://doi.org/10.1039/C8CY02353K>; b) J. Guzmán, A. Urriolabeitia, M. Padilla, P. García-Orduña, V. Polo, F. J. Fernández-Alvarez, *Inorg. Chem.* **2022**, 61, 20216–20221, <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.2c03330>.
- [31] K. Garcés, F. J. Fernández-Alvarez, V. Polo, R. Lalrempuia, J. J. Pérez-Torrente, L. A. Oro, *ChemCatChem* **2014**, 6, 1691–1697, <https://doi.org/10.1002/cctc.201301107>.
- [32] A. Julián, K. Garcés, R. Lalrempuia, E. A. Jaseer, P. García-Orduña, F. J. Fernández-Alvarez, F. J. Lahoz, L. A. Oro, *ChemCatChem* **2018**, 10, 1027–1034, <https://doi.org/10.1002/cctc.201701488>.
- [33] A. Julián, V. Polo, E. A. Jaseer, F. J. Fernández-Alvarez, L. A. Oro, *ChemCatChem* **2015**, 7, 3895–3902, <https://doi.org/10.1002/cctc.201500651>.
- [34] N. Almenara, M. A. Garralda, X. Lopez, J. M. Matxain, Z. Freixa, M. A. Huertos, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, 61, e202204558, <https://doi.org/10.1002/anie.202204558>.
- [35] A. Gómez-España, P. García-Orduña, J. Guzmán, I. Fernández, F. J. Fernández-Alvarez, *Inorg. Chem.* **2022**, 61, 16282–16294, <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.2c01973>.
- [36] P. García-Orduña, I. Fernández, L. A. Oro, F. J. Fernández-Alvarez, *Dalton Trans.* **2021**, 50, 5951–5959, <https://doi.org/10.1039/D1DT00473E>.



Francisco José Fernández Álvarez

Departamento de Química Inorgánica, Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea, Universidad de Zaragoza

C-e: paco@unizar.es

ORCID: 0000-0002-0497-1969

Profesor Titular en la Universidad de Zaragoza acreditado como catedrático. Doctor en Química por la Universidad de Alcalá (1999). Realizó estancias postdoctorales en las Universidades de Zúrich y Zaragoza y en el ICMA-CSIC. Desde 2012, sus investigaciones se han centrado en la química de complejos de rodio e iridio con ligandos organosililo tri- y bidentados, así como en el estudio de su potencial como catalizadores homogéneos para la activación de CO₂ y otras moléculas pequeñas.

Breve introducción a las plantas luminiscentes

Brief introduction to glowing plants

Otilia Val Castillo

IES Lluís Simarro Lacabra, Xàtiva, Valencia.

PALABRAS CLAVE:

Plantas luminiscentes
 Bioluminiscencia
 Proteína verde
 fluorescente (GFP)
 Aplicación de la química
 Desarrollo sostenible
 Agenda 2030

RESUMEN:

A pesar de que los primeros intentos por crear plantas luminiscentes fracasaron, en abril de 2024 se pusieron a la venta petunias luminiscentes en Estados Unidos. Las reacciones químicas con emisión de luz constituyen una parte de la asignatura de química poco conocida por los alumnos, puesto que los procesos fotoquímicos no se abordan en los niveles preuniversitarios más allá de las reacciones de fotosíntesis. Introducir las plantas luminiscentes como aplicación práctica de la química y la biotecnología puede suponer un atractivo más en la didáctica de la asignatura, además de un intento de acercarse al objetivo 7 del desarrollo sostenible: energía accesible y no contaminante, propuesto como parte de la Agenda 2030 por las Naciones Unidas.

KEYWORDS:

Glowing plants
 Bioluminescence
 Green Fluorescent Protein (GFP)
 Application of chemistry
 Sustainable development
 2030 Agenda

ABSTRACT:

Despite the fact that the first attempts to create luminescent plants failed, luminescent petunias went on sale in the USA in April 2024. Light emitting chemical reactions are a little-known part of the chemistry subject for students, as photochemical processes are not covered at pre-university level beyond photosynthesis reactions. By introducing luminescent plants as a practical application of chemistry and biotechnology, this could be a further attraction in the didactics of the subject, as well as an attempt to approach sustainable development goal 7: accessible and clean energy, proposed as part of the 2030 Agenda by the United Nations.

Introducción

En las reacciones químicas, unas sustancias iniciales, los reactivos, se transforman en sustancias diferentes, los productos. En las reacciones también hay implicada una cierta cantidad de energía que se puede absorber o emitir en forma de calor, o incluso de luz: por incandescencia o luminiscencia.

Las reacciones luminiscentes son reacciones que emiten energía en forma de luz.

La emisión de luz o luminiscencia está relacionada con la existencia de dos tipos diferentes de procesos, fotoluminiscencia y quimioluminiscencia.^[1]

La fotoluminiscencia es un fenómeno físico en el cual un material absorbe energía en forma de fotones (luz) y luego reemite esa energía en forma de luz también. Puede ser provocada por la excitación de electrones en un material cuando se expone a la luz. Hay dos tipos principales de fotoluminiscencia:

1. Fluorescencia: donde la luz reemitida cesa casi instantáneamente (en nanosegundos) tras la excitación.
2. Fosforescencia: donde la luz reemitida dura más tiempo (microsegundos a horas) debido a una transición de estado metaestable.

La quimioluminiscencia es el fenómeno por el cual se produce luz como resultado de una reacción química, sin necesitar absorción previa de luz.

Este tipo de reacciones se denomina bioluminiscencia^[1] cuando se observa en diversos organismos, como en las luciérnagas y ciertos tipos de medusas (ver Figura 1).

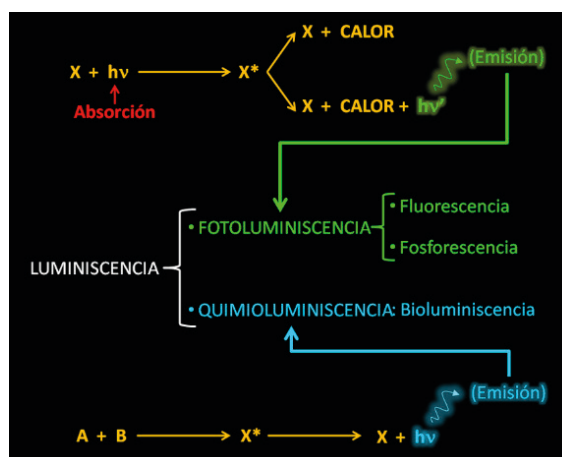


Figura 1. La emisión de luz o luminiscencia está relacionada con la existencia de dos tipos diferentes de procesos, fotoluminiscencia y quimioluminiscencia. Reproducido de Ref. [1]. © con permiso de A. Santos.

Entre las aplicaciones de la bioluminiscencia, se encuentran la biología (sensores de ATP, control de higiene, análisis la contaminación en ecosistemas, detección de interacciones proteína-proteína, cribado de alto rendimiento e imágenes in vivo en pequeños mamíferos), la medicina (ensayos genéticos, terapia de enfermedades, neurología, investigación de fármacos), la química analítica (detección de pH, iones metálicos, especies reactivas del oxígeno, enzimas, moléculas de fármacos y potencial de membrana...). También se utiliza en biotecnología, por ejemplo, en la ingeniería de varias plantas emisoras de luz.^[2]

Aristóteles (350 a. C.) ya abordó el fenómeno de la luz emitida por ciertos materiales en su obra *Sobre el alma* (Libro II, Capítulo 7), por lo que su observación es una de las primeras descripciones documentadas de este fenómeno.

No todo lo que se ve es visible a la luz, sino solamente el color característico de cada cosa: ciertas cosas, desde luego, no se ven a la luz, y, sin embargo, producen sensaciones en la oscuridad, por ejemplo, todas aquellas que aparecen ígneas y brillantes, no hay en nuestra lengua un término único para designarlas, como son los hongos, el asta y las cabezas, escamas y ojos de los peces (p.192).^[3]

Cayo Plinio Segundo el Viejo (23-79 d.C.) también describió, en su *Historia Natural*, la existencia de unas medusas en la bahía de Nápoles que resplandecían con una tonalidad verdosa al ser expuestas a la luz solar.^[4]

El mar de ardora o *milky seas* es un fenómeno bioluminiscente que se presenta en ciertas costas de algunas regiones del mundo, como la bahía de Mosquito Bay, en Vieques (Puerto Rico), las Maldivas, las Bahamas, las Islas Vírgenes, la isla de Palawan, en Filipinas, ciertas playas californianas y algunas playas de Tailandia, donde se encuentran altas concentraciones de dinoflagelados, organismos microscópicos que emiten luz al ser perturbados. Este fenómeno crea un espectáculo visual impresionante (ver Figura 2), ya que las olas del mar brillan en la oscuridad y crean la ilusión de que el agua está iluminada por miles de pequeñas luces.



Figura 2. Fenómeno conocido como mar de ardora. Reproducido de Ref. [5].

Químicamente, en 1885, Raphaël Dubois, profesor de la Universidad de Lyon, había descubierto que esta «luz de origen animal» aparece gracias a dos sustancias: una que actúa como combustible, a la que llamó luciferina (en alusión al nombre Lucifer, que significa «portador de luz»), que se oxida con la ayuda de una enzima, que actúa como catalizador, la luciferasa, para emitir luz.^[6] Raphael Dubois recibió en 1887 el Gran

Premio de las Ciencias Físicas por «sus investigaciones sobre la luz biológica».^[7]

Varios factores determinan el color de las emisiones, como la secuencia de aminoácidos de la luciferasa o la presencia de proteínas accesorias, en particular la proteína verde fluorescente, GFP.^[8]

La proteína verde fluorescente

En 1955, el profesor Yoshimasa Hirata, de la Universidad de Nagoya, le mostró la luz del crustáceo *Cypridina hilgendorffii* a su nuevo asistente, Osamu Shimomura, de 27 años, y le dijo: «No sabemos nada de esto, solo que resplandece. ¿Le interesa averiguar por qué?».^[6]

En 1962, Osamu Shimomura, químico y biólogo marino japonés (ver Figura 3.a), encontró dos proteínas responsables de la bioluminiscencia de la medusa *Aequorea victoria* (ver Figura 3.b), la aequorina, que contiene una luciferina y otra a la que llamó proteína verde fluorescente, (GFP, por sus siglas en inglés). La GFP emite luz verde cuando se expone a la luz ultravioleta y ha revolucionado la biología molecular y la biotecnología, ya que se utiliza como marcador en diversas técnicas de visualización celular.^[9,11]



Figura 3. a) Osamu Shimomura. Reproducido de Ref. [12], © con permiso de Marine Biological Laboratory /Tom Kleindinst. b) *Aequorea victoria*. Reproducido de Ref. [13], © con permiso de Sierra Blakely.

Martin Chalfie, neurobiólogo (ver Figura 4.a), demostró que la GFP (ver Figura 4.b), originalmente aislada de la medusa *Aequorea victoria*, podía utilizarse como un marcador en organismos vivos, como el nematodo *Caenorhabditis elegans*. Esto permitió a los investigadores seguir el desarrollo de células específicas y trazar la línea celular durante la embriogénesis en tiempo real.^[9,11]

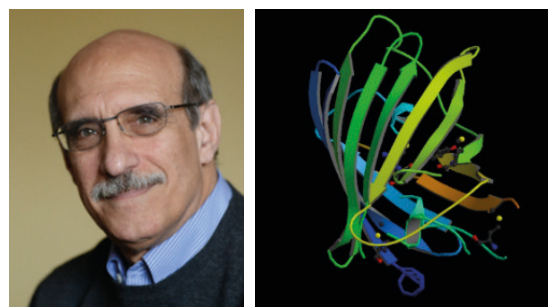


Figura 4. a) Martin Chalfie. Reproducido de Ref. [14], © con permiso de Eileen Barroso, Columbia University Photographer, y M. Chalfie. b) Diagrama de cinta de la estructura cristalina de GFP. Reproducido de Ref. [15], © GFP_1EMA by Ygonaar.

Por su parte, Roger Y. Tsien, bioquímico (ver Figura 5.a), trabajó en la modificación de la GFP para crear variantes con diferentes colores de fluorescencia (ver Figura 5.b). Las proteínas fluorescentes desarrolladas y mejoradas por Tsien tienen diversas aplicaciones en la investigación biomédica, como en la identificación de células cancerosas, el seguimiento de procesos celulares en tiempo real y la visualización de interacciones biomoleculares.

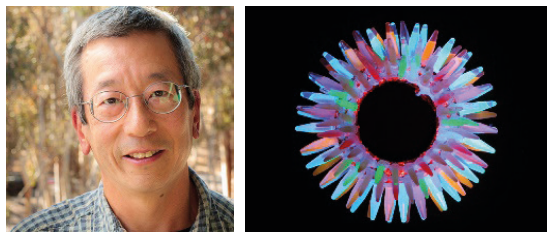


Figura 5. a) Roger Tsien. b) Colores producidos por Tsien a partir de la GFP. Reproducido de Ref. [16]. © ambas con permiso de University of California - San Diego.

Su trabajo facilitó el desarrollo de técnicas avanzadas de microscopía de fluorescencia, que permiten una resolución de imagen sin precedentes en biología celular y molecular.

Estas proteínas se han convertido en herramientas fundamentales en la biología molecular, ya que permiten a los científicos visualizar y rastrear procesos biológicos en células y organismos vivos, hacer un seguimiento de la actividad genética y crear nuevos métodos de diagnóstico en medicina, entre otros campos.^[9,10]

Recibieron el Premio Nobel de Química en el año 2008, "por el descubrimiento y desarrollo de la proteína verde fluorescente, GFP".^[9-11]

En 2007 el conocimiento de las proteínas que daban lugar a la bioluminiscencia permitió al equipo de Jeff W. Litchman de la Universidad de Harvard desarrollar la tecnología *Brainbow*. Se trata de una técnica innovadora utilizada en el campo de la neurociencia para visualizar y rastrear las conexiones neuronales en el cerebro.^[17]

En la tecnología *Brainbow* se modifican genéticamente neuronas para que expresen diferentes colores de fluorescencia. De esta forma, cada neurona puede etiquetarse con un color único, lo que permite a los científicos ver cómo se conectan entre sí en una red cerebral compleja. Esto se logra mediante la expresión de múltiples combinaciones de proteínas fluorescentes en las neuronas, lo que produce una amplia variedad de colores únicos. La tecnología *Brainbow* ha permitido a los investigadores estudiar la estructura del cerebro con un nivel de detalle sin precedentes, lo que facilita la comprensión de cómo las neuronas se conectan y se comunican entre sí. Permite investigar aspectos del desarrollo neuronal, la plasticidad sináptica y diversas patologías neurológicas, contribuyendo significativamente al avance de la neurociencia.

Plantas luminiscentes

La bioluminiscencia en plantas es un campo de estudio relativamente nuevo que ha cobrado relevancia en las últimas décadas, principalmente debido a su aplicación en la evaluación del estado fisiológico de las plantas, la detección de estrés ambiental, y su potencial en la agricultura.

En la actualidad, no existen de forma natural las plantas luminiscentes, ya que no pueden producir la luciferina necesaria para una reacción bioluminiscente. No obstante, los estudios

sobre la producción de plantas luminiscentes han cobrado un interés creciente en el ámbito de la biotecnología y la biología sintética. Estos esfuerzos buscan integrar capacidades luminiscentes en las plantas, no solo transcribiendo la luciferasa, sino también toda la ruta biosintética de la luciferina. Para ello, utilizan principalmente la bioluminiscencia natural de organismos como las luciérnagas y algunos hongos, donde el proceso es mucho más sencillo, puesto que el ácido cafeico, una importante molécula precursora de la luciferina, ya está presente en una gran variedad de plantas diferentes.^[18]

A continuación, se muestra un resumen de algunos de los últimos enfoques y descubrimientos en este campo.

Bioglow

Alexander Krichevsky, biotecnólogo (ver figura 6.a), fundador de la empresa *Bioglow LLC*, que estuvo funcionando desde 2011 hasta 2015, realizó investigaciones relacionadas con la fluorescencia en plantas, enfocándose en aspectos como la fotosíntesis, el estrés ambiental y la salud de las plantas. Sus estudios utilizaban técnicas de fluorescencia para evaluar la actividad fotosintética, la distribución de pigmentos y la respuesta de las plantas a diversas condiciones, como la luz, la temperatura y la disponibilidad de agua y nutrientes.

Sus investigaciones llevaron a la creación de lo que se considera la primera planta autoluminiscente del mundo, que emite una luz claramente visible para el ojo humano.^[19]

Para conseguirlo, utilizó técnicas de ingeniería genética incorporando así genes de bacterias bioluminiscentes, lo que le permitió emitir luz durante su ciclo de vida. Se la llamó *Starlight Avatar*, en referencia a la película *Avatar*, en la que la vegetación bioluminiscente es parte importante de la trama. La planta resultante, *Nicotiana glauca*, es una especie de tabaco ornamental que fue elegida por sus características adecuadas para la modificación genética. Se lanzó al mercado en diciembre de 2013, pero no resultó rentable, ya que las plantas emitían muy poca luz (ver Figura 6.b).



Figura 6. a) Alexander Krichevsky Reproducido de Ref. [20]. b) Detección visual de autoluminiscencia en LUX-Trnl/Tina Plantas. Fotografía tomada en la oscuridad con una cámara Nikon D200; AF-S Micro Nikkor 105,0 mm 1:2,8 G ED lente; expuesta 5 min a f/4,5, distancia focal de 105 mm, ISO 3200). © ambas con permiso de A. Krichevsky.

Glowing Plant

El proyecto *Glowing Plant* (ver Figura 7.a),^[21] lanzado en 2013 por un equipo de científicos y diseñadores dirigidos por Antony Evans, bioingeniero (ver Figura 7.b) y Kyle Taylor, fue otra iniciativa de biotecnología que buscaba crear plantas que emitieran luz brillante mediante la modificación genética.

El objetivo del proyecto era diseñar plantas que no solo fueran visualmente atractivas, sino que también pudieran ofrecer

una alternativa sostenible a las luces eléctricas, contribuyendo a la iluminación ambiental en espacios interiores y exteriores. Se planteaban varios usos potenciales, desde la decoración hasta su uso en jardines y paisajismo.^[22]

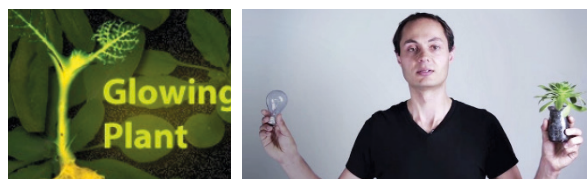


Figura 7. a) Logo de la empresa. Reproducido de Ref. [21].
b) Anthony Evans Reproducido de Ref. [23]. © con permiso de Kickstarter

La idea era utilizar técnicas de edición genética para incorporar un gen de una bacteria capaz de producir luminiscencia (*Vibrio fischeri*) e integrarlo en la *Arabidopsis thaliana*, cuyo crecimiento limitado motivó su sustitución por *Nicotiana tabacum* con el fin de obtener una planta bioluminiscente.^[24] Mediante una campaña de financiación colectiva en Kickstarter, 8.433 patrocinadores contribuyeron con 484.013 dólares (unos 400.000 euros) para que este proyecto se pudiera realizar.^[23] Quienes pagaran unos 36 € recibirían una planta al cabo de 12 meses, por unos 135 € un rosal luminoso.

A pesar del entusiasmo inicial y de la recaudación exitosa de fondos, el proyecto se enfrentó a varios desafíos técnicos y regulatorios. Grupos ambientalistas como *Friends of the Earth*, presionaron al Departamento de Agricultura de Estados Unidos para cerrar el proyecto.

En marzo de 2016 se pronosticó la entrega de semillas. La empresa no logró que las plantas emitieran luz en cantidades significativas y de manera consistente. También tuvo dificultades para obtener los permisos necesarios con los que llevar a cabo la producción y comercialización de estas plantas modificadas genéticamente.

Finalmente, el proyecto *Glowing Plant* se paralizó, anunciándose en diciembre de 2017 que dejarían de operar de forma permanente.

Empresa Planta

El equipo científico de la empresa de biotecnología Planta LLC (ver Figura 8.a), fundada en 2017 y con laboratorios en Moscú y Pushchino, está formado por más de 20 investigadores con experiencia en química orgánica e ingeniería metabólica.^[25] Estos científicos identificaron por primera vez los genes clave que permiten la bioluminiscencia de los hongos.^[26] Descubrieron que estos hongos sintetizan luciferina a partir de un compuesto llamado ácido cafeico, afectado por cuatro enzimas. Dos enzimas trabajan para transformar el ácido cafeico en un precursor luminiscente; una tercera enzima oxida este precursor para producir un fotón. Luego, la cuarta enzima convierte de nuevo la molécula en ácido cafeico, que puede reciclarse mediante el mismo proceso.^[27]

A partir de estos hechos, el equipo de científicos utilizó ADN de hongos bioluminiscentes para diseñar plantas de tabaco con un brillo autosostenible que dura todo el ciclo vital de la planta, diez veces más brillante que otras plantas brillantes genéticamente modificadas^[28] (ver Figura 8.b). Desde su fundación Planta ha creado más de 4000 líneas de plantas editadas con genoma.^[25]



Figura 8. a) Logo de la empresa planta. b) Imagen de una secuencia del crecimiento plantas luminiscentes. Ambas reproducidas de Ref. [25].

El objetivo de las plantas luminiscentes es tanto estético como funcional, ya que podrían aportar beneficios en términos de sostenibilidad, como la reducción de iluminación artificial en entornos urbanos.

En la actualidad se han identificado 122 hongos bioluminiscentes en todo el mundo.^[29]

Glow Plant

Glow Plant (ver Figura 9) es una empresa canadiense, con sede en Toronto, fundada en 2019 por James Wight, que comenzó sus investigaciones en 2016. Tiene instalaciones para investigación, producción, almacenamiento y cultivo.^[30]



Figura 9. Logos de la empresa Glow Plant Inc. Reproducido de Ref. [30].

En el caso de las Glow Plants, la reacción química que produce la luz es desencadenada por un recubrimiento de nanopartículas sintetizadas que se aplica sobre las hojas de la planta. Este recubrimiento está formado por pequeñas partículas diseñadas para absorber la luz ultravioleta (UV), presente en la luz solar durante el día, y liberar después luz visible cuando se exponen a la oscuridad por la noche, es decir, por fotoluminiscencia. Una breve exposición de 15 segundos a la luz UV enciende un brillo que puede durar hasta 3 horas. El recubrimiento, se conserva vivo durante más de 5 años.^[30]

La empresa tiene intención de expandirse a mercados europeos y occidentales.

Glowleaf

En el año 2020, Keun Amani fundó Glowleaf (ver Figura 10), una *start-up* biotecnológica con sede en Toronto. Durante tres años investigaron y perfeccionaron su enfoque para crear plantas que brillaran en la oscuridad.

El proceso consistía en introducir, en una muestra de células vegetales de la planta escogida, los genes de bioluminiscencia y de integrarlo en sus genomas. Las células vegetales modificadas se cultivaban en tubos de ensayo y se controlaban para comprobar que habían asimilado los genes correctamente. Las plantas sanas se transferían a una maceta y se cultivaban durante generaciones sucesivas para asegurarse de que eran estables.

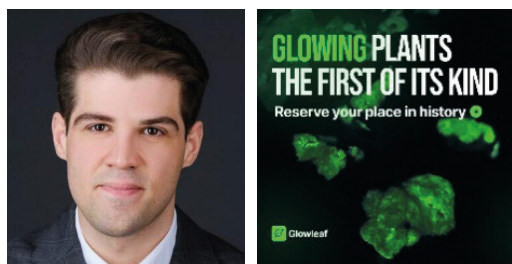


Figura 10. Keaun Amani, fundador de Glowleaf y logo. Reproducido de Ref. [31]. © ambas con permiso de K. Amani.

Su proyecto puso de manifiesto las ineficiencias de la bioluminiscencia natural y los retos que plantea la optimización de las enzimas productoras de luz. Los métodos tradicionales, como el escaneo mutacional profundo (DMS), resultaron costosos y lentos, lo que impulsó a Amani a desarrollar en 2023 NeuroFold, un innovador modelo de diseño de enzimas con inteligencia artificial.

MIT

En 2021, los estudios sobre plantas luminiscentes de Michael S. Strano (ver Figura 11) y sus colaboradores de la Universidad de California y el Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT), en Estados Unidos, exploraron la posibilidad de que las plantas emitiesen luz de manera similar a los organismos bioluminiscentes.



Figura 11. Michael Strano. DISTAP Lead Principal Investigator. Reproducido de Ref. [32], © con permiso de M. Strano.

Para ello utilizaron una técnica llamada nanobiónica de plantas, creando una planta muy brillante que podría tener aplicaciones en áreas como la iluminación sostenible y la reducción del uso de energía eléctrica (objetivo 7 del desarrollo sostenible: energía accesible y no contaminante, propuesto como parte de la Agenda 2030 por las Naciones Unidas).^[33]

Los científicos utilizaron cuatro nanopartículas que interactúan químicamente entre sí: sílice conjugada con luciferasa de luciérnaga, poli(ácido láctico-co-glicólico) liberador de d-luciferina, quitosano funcionalizado con coenzima A y nanocristales semiconductores de fósforo, que permiten una modulación de la longitud de onda más larga.^[34] Estas nanopartículas viajaban a destinos específicos dentro de las plantas sin dañar sus funciones normales, como la fotosíntesis y la evaporación de agua a través de las hojas.

Usando carga superficial y por tamaño para controlar dónde podrían ir los conjuntos de nanopartículas dentro de los tejidos vegetales, los investigadores pudieron optimizar la cantidad de luz emitida. Después de exponerse a la iluminación LED o a la propia luz solar, las plantas se vuelven brillantes, y resplandecen de color verde.

La planta utilizada fue un berro de agua (*Nasturtium officinale*), que produjo un brillo de alrededor de un billón de

fotones por segundo, la mitad de brillante que un LED comercial de un microvatio y cien mil veces más brillante que las plantas de tabaco genéticamente modificadas. Además, la planta se podía desactivar al agregar un compuesto que bloquea la luciferasa y, por tanto, que no active el brillo de la luciérnaga.^[35]

Conseguieron que las plantas brillaran durante cuatro horas, aunque la intensidad del brillo es mayor durante los primeros minutos (ver Figura 12).

El MIT también probó con éxito la técnica en plantas tan variadas como rúcula, col rizada y espinacas.^[36-38]



Figura 12. Imagen de una secuencia del crecimiento plantas luminiscentes del MIT. Reproducido de Ref. [38]. © con permiso de M. Strano.

Light Bio

La introducción de sistemas bioluminiscentes en plantas es difícil, ya que estas plantas no pueden producir la luciferina necesaria para la reacción bioluminiscente.^[19] Por lo tanto, no solo se debe transcribir la luciferasa en sí, sino también toda la ruta biosintética de la luciferina. En el caso de la bioluminiscencia de los hongos, este proceso es mucho más sencillo, ya que el ácido cafeico, una importante molécula precursora de la luciferina, ya está presente en una gran variedad de plantas diferentes.^[18,39]

La empresa Light Bio (ver Figura 13),^[40] fundada en 2019, con sede en Idaho (EE.UU.) y de la que Karen Sarkisyan experta en biología sintética es cofundadora, ha producido plantas con flores genéticamente modificadas, como el crisantemo, el álamo, la *Arabidopsis thaliana* y la petunia, con el objetivo de producir un brillo aún mayor y diferentes colores. “Estamos creando plantas bioluminiscentes para el hogar y el jardín. Nuestras plantas brillan con luz orgánica perpetua, brindando una experiencia mágica de asombro y deleite.”^[40]

En abril de 2024, la empresa distribuyó por Estados Unidos 50.000 petunias *Firefly* (luciérnaga), que contienen genes de hongos bioluminiscentes que las hacen brillar constantemente, a un precio de 53 dólares (29 por la planta y 24 por el envío)^[41] (Figura 14.a).

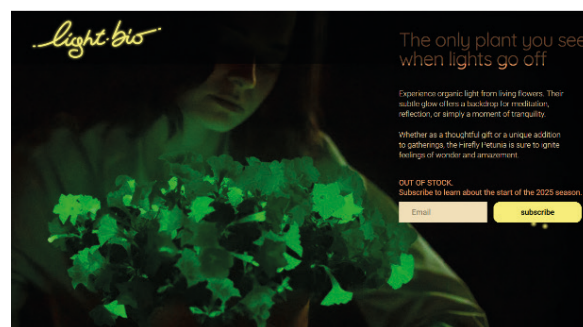


Figura 13. Imagen de la página web de la empresa Light Bio. Reproducido de Ref. [40], © Light Bio con permiso de K. Sarkisyan.

El Dr. Karen Sarkisyan (Figura 14.b), ha sido distinguido en el año 2024, como uno de los «35 innovadores menores de 35 años» por MIT Technology Review.^[43]



Figura 14. a) Petunia Firefly Reproducido de Ref. [41]. b) Dr. Karen Sarkisyan. Reproducido de Ref. [42]. © ambas con permiso de K. Sarkisyan.

Actualmente, solo la petunia bioluminiscente es lo suficientemente brillante como para ser observada a simple vista. Las plantas de tabaco bioluminiscentes requieren algo de oscuridad y adaptación antes de poder observarse.^[40]

Varios compradores de estas petunias han compartido sus impresiones en vídeos que se pueden visualizar en YouTube.

Resumiendo

La modificación genética de plantas para introducir bioluminiscencia es un campo fascinante e innovador que combina diversas disciplinas científicas.

Las tecnologías utilizadas han sido:

- Ingeniería genética.
- Cribado de genes.
- Asociación simbiótica.
- Edición genómica (CRISPR-Cas9).
- Biología sintética.

Sus principales aplicaciones son:

- Iluminación de jardines y espacios urbanos de manera sostenible.
- Reducción del consumo energético y de la huella de carbono.
- Monitorización ambiental.
- Investigación biológica.
- Agricultura.
- Estudios interdisciplinares.

Conclusión

El campo de la bioluminiscencia en plantas es prometedor y está en constante evolución. A pesar de los primeros fracasos, la creciente investigación y colaboración interdisciplinares indican que es probable que se logren avances significativos en los próximos años, lo que podría llevar a una adopción más amplia de estas tecnologías innovadoras en múltiples sectores.

En la actualidad, las limitaciones y los desafíos están relacionados con la eficiencia lumínica, con desafíos regulatorios para la implementación de estas tecnologías, con problemas éticos derivados de la percepción pública sobre los organismos genéticamente modificados y con los posibles efectos secundarios que puedan ejercer sobre polinizadores y herbívoros.

Comentar estos brillantes avances a los alumnos, junto con la secuencia de la investigación, sus pros y sus contras, puede hacerles comprender que la Química es una ciencia en constante evolución, en la que siempre hay lugar para nuevas investigaciones.

Los experimentos para conseguir plantas luminiscentes son otro ejemplo más de la aplicación del método científico.

Conflicto de intereses

En este artículo se ha intentado ofrecer una visión cronológica de las investigaciones realizadas para crear plantas luminiscentes. La persona que suscribe el artículo no tiene ninguna vinculación con las empresas que aparecen en el mismo ni pretende hacer publicidad de las mismas.

Bibliografía

- [1] A. Martín, S. Serrano, A. Santos, D. Marquina, C. Vázquez, *Reduca* **2010**, 3(5), 75-86.
- [2] A.J. Syed, J.C. Anderson. *Chem. Soc. Rev.* **2021**, 50(9), 5668-5705, <https://doi.org/10.1039/DOC501492C>.
- [3] Aristóteles, *Acerca del alma*, Gredos, Madrid, **2003**, p. 192.
- [4] Harvey, E.N. *Bioluminescence*, Academic Press, New York, USA, **1952**, pp. 371-372.
- [5] "Pixabay", disponible en <https://pixabay.com/es/>, (consultado: 12/10/2024).
- [6] García, A. "Bioluminiscencia: hágase la luz (en la naturaleza)", disponible en <https://ethic.es/2024/06/bioluminiscencia-hagase-la-luz-en-la-naturaleza/>, **2024** (consultado: 09/10/2024).
- [7] J. Poisson. *Rev. Hist. Pharm.* **2010**, 58(365), 51-56, <https://doi.org/10.3406/pharm.2010.22136>.
- [8] T. Wilson, J.W. Hastings. *Annu. Rev. Cell. Dev. Bio.* **1998**, 14(1), 197-230, <https://doi.org/10.1146/annurev.cellbio.14.1.197>.
- [9] A. Garriz. *Educ. quim.* **2009**, 20(1), 75-76, [https://doi.org/10.1016/S0187-893X\(18\)30010-7](https://doi.org/10.1016/S0187-893X(18)30010-7).
- [10] J. C. Ferrer. *An.Quim.* **2020**, 104(4), 276-279.
- [11] The Nobel Prize, "The Nobel Prize in Chemistry 2008", disponible en <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2008/summary/>, (consultado: 09/10/2024).
- [12] The University of Chicago, Marine Biological Laboratory, "Osamu Shimomura" disponible en <https://www.mbl.edu/news/obituaries/osamu-shimomura>, **2018** (consultado: 09/10/2024).
- [13] "Aequorea victoria", disponible en https://es.wikipedia.org/wiki/Aequorea_victoria, act. **2019** (consultado: 01/10/2024).
- [14] Columbia University Biological Sciences, "Martin Chalfie", disponible en <https://biology.columbia.edu/content/martin-chalfie>, (consultado: 15/10/2024).
- [15] "Proteína verde fluorescente", disponible en https://es.wikipedia.org/wiki/Proteína_verde_fluorescente, act. **2024** (consultado: 08/10/2024).
- [16] UC-San Diego, "People", disponible en <https://tsienlab.ucsd.edu/People.htm>, (consultado: 29/10/2024).
- [17] J. Livet, T. A. Weissman, H. Kang, R. W. Draft, J. Lu, R. A. Bennis, J. R. Sanes, J. W. Lichtman. *Nature*, **2007**, 450, 56-62, <https://doi.org/10.1038/nature06293>.
- [18] S. Schramm, D. Weiß. *ChemBioChem* **2024**, 25, 1-40, <https://doi.org/10.1002/cbic.202400106>.
- [19] A. Krichevsky, B. Meyers, A. Vainstein, P. Maliga, V. Citovsky, *PLoS ONE* **2010**, 5(11), <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0015461>.
- [20] "Alexander Krichevsky", disponible en <https://www.linkedin.com/in/akrichevsky>, (consultado: 18/10/2024).
- [21] "Glowing plant", disponible en <https://gust.com/companies/glowing-plant>, **2022** (consultado: 21/10/2024).
- [22] WSL Branded Content, "Árboles que brillan para sustituir a las farolas. ¿Y si el mundo sostenible pasa por la biotecnología?", disponible en <https://www.xataka.com/n/arboles-que-brillan-para-sustituir-a-las-farolas-y-si-el-mundo-sostenible-pasa-por-la-biotecnologia>, **2016** (consultado: 09/10/2024).

- [23] A. Evans, "Glowing Plants: Natural Lighting with no Electricity", disponible en <https://www.kickstarter.com/projects/antonyevans/glowing-plants-natural-lighting-with-no-electricity-description>, act. **2017** (consultado: 12/10/2024).
- [24] A. Regalado, "El fiasco de la planta brillante que arrasó en Kickstarter pone freno a la biología DIY", consultado en <https://www.technologyreview.es/s/6097/el-fiasco-de-la-planta-brillante-que-arraso-en-kickstarter-pone-freno-la-biologia-diy>, **2016** (consultado: 09/10/2024).
- [25] "Planta", disponible en <https://www.planta.bio>, (consultado: 10/10/2024).
- [26] A. A. Kotlobay, K. S. Sarkisyan, Y. A. Mokrushina, I. V. Yampolsky. *PNAS Biochemistry* **2018**, 115(50), 12728-12732, <https://doi.org/10.1073/pnas.1803615115>.
- [27] T. Mitiouchkina, A.S. Mishin, L.G. Somermeyer, N.M. Markina, T.V. Chepurnyh, E.B. Guglya, T.A. Karataeva, K.A. Palkina, E.S. Shakhova, L.I. Fakhranurova, S.V. Chekova, A.S. Tsarkova, Y.V. Golubev, V.V. Negrebetsky, S.A. Dolgushin, P.V. Shalaev, D. Shlykov, O.A. Melnik, V.O. Shipunova, S.M. Deyev, A.I. Bubyrev, A.S. Pushin, V.V. Choob, S.V. Dolgov, F.A. Kondrashov, I.V. Yampolsky, K.S. Sarkisyan. *Nat. Biotechnol.* **2020**, 38(8), 944-946. <https://doi.org/10.1038/s41587-020-0500-9>.
- [28] V. Zaviálova, "Russia Beyond. Negocio fosforescente: científicos rusos crean plantas luminosas modificadas genéticamente", disponible en <https://es.rbth.com/tecnologias/82206-negocio-fosforescente-cientificos-rusos-crean>, **2018** (consultado: 09/10/2024).
- [29] W. Lu, A.K.H. Priyashantha, M.C.A. Galappaththi, S. Tibpromma, D.-Q. Dai, N.M. Patabendige, B.M. Premarathne, D.M. Kulasuriya, A.N. Ediriweera, T.S. Nimalrathna, N. Suwannarach, S. Lumyong, A.Tang, S.-C. Shao, S.C. Karunarathna. *Diversity* **2024**, 16, 539, <https://doi.org/10.3390/d16090539>.
- [30] "Glow plant", disponible en <https://glowplant.ca/collections/frontpage> y <https://glowplant.ca/pages/projects>, (consultado: 09/10/2024).
- [31] "Glowleaf", disponible en <https://glowleaf.bio/>, (consultado: 30/10/2024).
- [32] SMART DiSTAP, "Engineering plants is now a breeze", disponible en <https://www.youtube.com/watch?v=KT8b2qJnQTY>, **2019** (consultado: 09/10/2024).
- [33] ONU, "La Agenda para el Desarrollo Sostenible" disponible en <https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/development-agenda/>, (consultado: 09/10/2024).
- [34] Y. Liu, F. Xu, Z. Zhang, E. S. Penev, B. I. Yakobson, *Nano Lett.* **2014**, 14(12), 6782-6786, <https://doi.org/10.1021/nl5021393>.
- [35] M. Starr, "Freaking Cool Glowing Plants Could One Day Replace Your Desk Lamp", disponible en <https://www.sciencealert.com/plant-nanobionics-bioluminescent-glowing-watercress-mit>, **2017** (consultado: 09/10/2024).
- [36] S.-Y. Kwak, J. P. Giraldo, M. H. Wong, V. B. Koman, T. T. Salim Lew, J. Ell, M. C. Weidman, R. M. Sinclair, M. P. Landry, W. A. Tisdale, M.S. Strano. *Nano Lett.* **2017**, 17(12) 7951-7961, <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b04369>.
- [37] "MIT: plantas que brillan podrían sustituir a las farolas", disponible en <https://n-economia.com/noticias/mit-plantas-que-brillan-podrian-sustituir-a-las-farolas/>, **2021** (consultado: 09/10/2024).
- [38] MIT, "Glowing plants", disponible en <https://www.youtube.com/watch?v=hpvqd8zJM4>, **2017** (consultado: 09/10/2024).
- [39] P. Zheng, J. Ge, J. Ji, J. Zhong, H. Chen, D. Luo, W. Li, B. Bi, Y. Ma, W. Tong, L. Han, S. Ma, Y. Zhang, J. Wu, Y. Zhao, R. Pan, P. Fan, M. Lu, H. Du. *Plant Biotechnol J.* **2023**, 21, 1671-1681, <https://doi.org/10.1111/pbi.14068>.
- [40] "Light bio", disponible en <https://light.bio/>, (consultado: 09/10/2024).
- [41] R. Ehrenberg, "Lo que una petunia bioluminiscente me enseñó", disponible en <https://es.knowablemagazine.org/content/articulo/sociedad/2024/como-brilla-una-petunia-bioluminiscente>, **2024** (consultado: 09/10/2024).
- [42] L. Keith. "Dr Karen Sarkisyan named as one of MIT's "Innovators Under 35" 2024" disponible en <https://www.imperial.ac.uk/news/256094/dr-karen-sarkisyan-named-mits-innovators/>, **2024** (consultado: 20/10/2024).



Otilia Val Castillo

Departamento de Física y Química, IES Lluís Simarro, Xàtiva, Valencia

C-e: o.valcastillo@edu.gva.es
ORCID: 0000-0003-0335-3162

Licenciada en Ciencias Químicas por la Universidad de Murcia en 1990 y doctorada cum laude en 1993. Funcionaria de carrera del cuerpo de Profesores de Enseñanza Secundaria desde 1995. Actualmente es catedrática y jefa del departamento de Física y Química en el IES Lluís Simarro de Xàtiva. Ha participado con alumnos en diversos certámenes, obteniendo premios y reconocimientos. En 2021 le fue concedido el Premio Tarea Educativa y Divulgativa a Profesores de Enseñanza Secundaria, otorgado por la RSEQ-STVAL. Ha publicado artículos, impartido conferencias y participado en congresos y mesas redondas sobre las dificultades a las que se enfrentan las mujeres dedicadas a las ciencias, así como sobre la química y su didáctica.

Un experimento sencillo para comprobar que la llama de una vela, cubierta con un vaso, se apaga antes de consumir la totalidad del oxígeno disponible

A simple experiment to verify that the flame of a candle, covered with a glass, goes out before consuming all the available oxygen

Antonio Tomás-Serrano

Profesor jubilado de Enseñanza Secundaria

PALABRAS CLAVE:

Combustión en un recinto cerrado
Vaso que cubre una vela
Lana de acero
Fracción molar del oxígeno

RESUMEN:

Es bien conocido que, si se cubre con un vaso una vela encendida, la llama se debilita rápidamente y al cabo de unos segundos se apaga. Como esto ocurre al limitar la cantidad de aire disponible para la combustión, la mayoría de las personas que observan este experimento concluyen que la vela se apaga debido al agotamiento del oxígeno encerrado en el vaso. Las investigaciones llevadas a cabo por numerosos autores han revelado el arraigo de esta idea en estudiantes de diferentes niveles educativos e, incluso, entre posgraduados y profesores de ciencias. En este artículo se expone un método sencillo y fiable con el que se demuestra que la combustión en un recinto cerrado cesa antes de que se consuma el oxígeno disponible.

KEYWORDS:

Combustion in a closed space
Glass that covers a candle
Steel wool
Mole fraction of oxygen

ABSTRACT:

It is well known that if a lit candle is covered with a glass, the flame quickly weakens and, after a few seconds goes out. Since this occurs by limiting the amount of air available for combustion, most people who observe this experiment conclude that the candle goes out due to the depletion of the oxygen trapped in the glass. Research conducted by numerous authors has revealed that this idea is deeply ingrained in students at various educational levels, and even among postgraduates and science teachers. This article presents a simple and reliable method that effectively demonstrates that combustion in a closed space always ceases before all the available oxygen is consumed.

Introducción

Uno de los procedimientos que suelen utilizarse para explorar las ideas de los estudiantes acerca de la combustión, consiste en cubrir una vela encendida con un vaso, o un recipiente similar, y preguntarles a continuación por qué se apaga la llama tras cubrir la vela con el vaso.

Las investigaciones llevadas a cabo por diferentes autores han mostrado que los estudiantes más jóvenes, con edades comprendidas entre 8 y 13 años, no distinguen claramente entre cambios físicos y cambios químicos y emplean un modelo para explicar la combustión que varía en función de la naturaleza del combustible. En general, sus ideas acerca de la combustión son confusas, incompletas e inconsistentes.^[1-4]

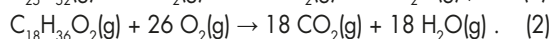
Los estudiantes de 13 a 15 años tampoco tienen un concepto preciso acerca de la combustión. No obstante, la mayoría de este alumnado reconoce la importancia del oxígeno en el proceso y, a pesar de que no comprenden bien qué papel desempeña este elemento, concluyen que, cuando se cubre la vela con el vaso, la llama se apaga por el agotamiento

del oxígeno encerrado en el recipiente.^[5-8] Teniendo en cuenta que el grado de conocimiento de estos estudiantes acerca de las reacciones químicas es bastante limitado, no debería sorprendernos que justifiquen el apagado de la vela por el agotamiento de uno de los reactivos. De hecho, la llama de la vela comienza a debilitarse a los pocos segundos de cubrirla con el vaso.

Lo que sí resulta sorprendente es que estudiantes de cursos superiores, estudiantes universitarios, profesores de ciencias en formación y algunas páginas web, vinculadas a instituciones universitarias, también justifiquen el apagado de la vela por el agotamiento del oxígeno atrapado en el vaso.^[9-15]

Si bien es cierto que la vela se apaga tras cubrirla con el vaso y limitar la cantidad de oxígeno disponible para la combustión, la razón por la que acaba extinguiéndose la llama no es el agotamiento del oxígeno, sino la acumulación, en las proximidades de la llama, de los productos de combustión de los componentes de la vela, parafina $C_{25}H_{52}$ y ácido esteárico $C_{18}H_{36}O_2$:

CÓMO CITAR: A. Tomás-Serrano, *An. Quím. RSEQ* 2024, 120, 206-211, DOI: 10.62534/rseq.aq.2004



La acumulación de dióxido de carbono y de vapor de agua, así como otros productos de combustión minoritarios, que se forman a medida que la atmósfera del interior del vaso se va empobreciendo en oxígeno,^[16] tales como carbono y monóxido de carbono, ocasiona una disminución de la concentración de oxígeno en el entorno de la llama. Al disminuir el aporte de oxígeno, disminuye la velocidad de la reacción de combustión y la llama reduce progresivamente su tamaño hasta que llega un momento en el que la reacción no puede automantenerse y la llama se extingue.^[17-21]

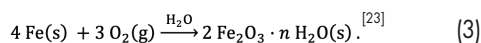
Los experimentos llevados a cabo con velas ardiendo en recintos cerrados han mostrado que la combustión no puede sostenerse cuando la fracción molar del oxígeno (que es, aproximadamente, igual a 0,21 en el aire atmosférico) desciende por debajo de 0,15.^[22]

El objetivo de este artículo es presentar un procedimiento simple con el que, además de demostrar fácilmente que la vela se apaga mucho antes de que se agote el oxígeno encerrado bajo el vaso, se puede determinar con una exactitud aceptable la fracción de oxígeno que se consume en la combustión.

La base de esta demostración es una combinación del método clásico, que utiliza lana de acero para determinar el porcentaje en volumen de oxígeno en el aire, esto es, su fracción molar y el ya citado experimento del vaso que cubre una vela. En los apartados que siguen se da una breve descripción de cada uno de ellos.

Determinación de la fracción molar del oxígeno en el aire utilizando lana de acero

El procedimiento más sencillo para hallar la concentración de oxígeno en el aire se basa en la eliminación del oxígeno de la fase gaseosa, haciéndolo reaccionar con lana de acero húmeda, para formar una mezcla de óxidos de hierro hidratados que, de forma simplificada, se puede representar mediante la ecuación



Para llevar a cabo esta determinación, se introduce la lana de acero, humedecida ligeramente con una disolución salina diluida,^[24,25] en el fondo de una probeta que se coloca invertida sobre un recipiente con agua (Figura 1). A medida que el oxígeno del aire contenido en la probeta reacciona con el hierro y va desapareciendo de la fase gaseosa, disminuye la presión en el interior de la probeta y comienza a entrar agua, desde el recipiente, impulsada por la presión atmosférica. Este proceso continúa hasta que reacciona la práctica totalidad del oxígeno y se igualan las presiones interna y externa, lo que sucede entre 12 y 24 horas desde que se inicia el experimento, dependiendo de la temperatura ambiente.

La relación entre la concentración del oxígeno y la altura de la columna de agua que entra a la probeta se puede deducir considerando que, en las condiciones en las que se lleva a cabo el experimento, es aplicable la ecuación de estado del gas ideal.^[25]

Inicialmente, la probeta, de volumen V_0 y altura L , contendrá n_0 de moles de aire (húmedo) a la presión atmosférica $p_{0,1}$ y temperatura ambiente $T_{0,1}$, cumpliéndose que

$$n_0 = \frac{p_{0,1}V_0}{RT_{0,1}}, \quad (4)$$

donde R es la constante de los gases.

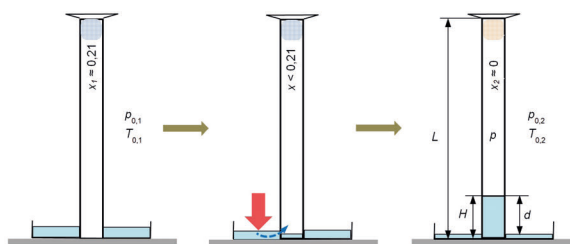


Figura 1. (Izqda.): Situación inicial del experimento tras colocar la probeta, con la lana de acero, sobre un recipiente con agua. (Centro): A medida que reacciona el oxígeno con el hierro, disminuye la presión interior por debajo de la presión atmosférica y entra agua a la probeta. (Dcha.): Situación final de equilibrio, una vez que ha reaccionado todo el oxígeno.

Si se llama n_{O_2} al número de moles de oxígeno que contiene inicialmente el aire de la probeta y n_{H_2O} al número de moles de agua que se evaporan en el interior de la probeta, el número de moles de gas n al finalizar el experimento valdrá

$$n = n_0 - n_{O_2} + n_{H_2O} \cong n_0 - n_{O_2}, \quad (5)$$

donde se ha supuesto que $n_{H_2O} \cong 0$ dado que, en las condiciones en las que se lleva a cabo el experimento, el aire que contiene la probeta inicialmente está prácticamente saturado en vapor de agua.

En función de la fracción molar x del oxígeno ($x = \frac{n_{O_2}}{n_0}$) y de la ec. (4), la ec. (5) puede escribirse como

$$n \cong n_0 - n_{O_2} = (1 - x)n_0 = (1 - x) \frac{p_{0,1}V_0}{RT_{0,1}}. \quad (6)$$

Tras la entrada a la probeta de un volumen de agua V_H , se alcanza el equilibrio a la presión atmosférica $p_{0,2}$ y temperatura ambiente final $T_{0,2}$, cumpliéndose que

$$pV = nRT_{0,2}, \quad (7)$$

donde p es la presión que ejerce el gas remanente en la probeta y V el volumen que ocupa.

El valor de la presión p y del volumen V en el equilibrio, vienen dados, respectivamente, por

$$p = p_{0,2} - \rho g d, \quad (8)$$

$$V = V_0 - V_H, \quad (9)$$

siendo ρ la densidad del agua y g la aceleración de la gravedad.

Sustituyendo las ecs. (6), (8) y (9) en la ec. (7) se obtiene

$$(p_{0,2} - \rho g d) \cdot (V_0 - V_H) \cong (1 - x) \frac{p_{0,1}V_0}{RT_{0,1}} RT_{0,2}, \quad (10)$$

de la que se deduce la relación entre la fracción molar del oxígeno x y el volumen de agua V_H que entra a la probeta

$$x \cong 1 - \frac{(p_{0,2} - \rho g d) \cdot T_{0,1}}{p_{0,1} \cdot T_{0,2}} \cdot \left(1 - \frac{V_H}{V_0}\right). \quad (11)$$

En el caso de que el recipiente utilizado tenga una sección transversal constante (como es el caso de una probeta), la ec. (11) se puede escribir como

$$x \cong 1 - \frac{(p_{0,2} - \rho g d) \cdot T_{0,1}}{p_{0,1} \cdot T_{0,2}} \cdot \left(1 - \frac{H}{L}\right), \quad (12)$$

siendo H la altura final de la columna de agua dentro de la probeta y L la altura de la probeta.

Como se verá más adelante, generalmente se cumple que $T_{0,1} \cong T_{0,2}$ y que $p_{0,1} \cong p_{0,2} - \rho g d$, por lo que en la mayoría de los casos se puede hallar la fracción molar x del oxígeno midiendo únicamente la altura de la columna de aire, L , y de la columna de agua, H , es decir,

$$x \approx \frac{H}{L}. \quad (13)$$

A pesar de su simplicidad, este procedimiento permite determinar la fracción molar del oxígeno en el aire con un error inferior al 5 %.^[24,25]

El experimento del vaso que cubre una vela parcialmente sumergida en agua

El experimento del vaso que se coloca sobre una vela encendida es otro experimento clásico del que hay numerosas referencias históricas^[16] y que, desafortunadamente, ha sido propuesto por algunos autores como un método adecuado para medir el contenido en oxígeno del aire.^[20]

Este experimento consiste en cubrir con un vaso una vela encendida cuya base está parcialmente sumergida en el agua de un plato o una cubeta. Transcurridos unos segundos, se observa que la llama se apaga y el agua asciende por el interior del vaso hasta alcanzar una altura que, dependiendo de las condiciones experimentales, suele estar comprendida entre el 15 % y el 30 % de la altura total del vaso (Figura 2).



Figura 2. Tras apagarse la vela, el aire que contiene el vaso comienza a enfriarse y el agua de la cubeta asciende por el interior del vaso hasta que se equilibran las presiones interna y externa. Cuando se utiliza un vaso cilíndrico y una vela delgada como los de la figura, el agua que entra al vaso ocupa entre un 20 % y un 25 % de la capacidad del vaso. El volumen de agua que entra al vaso ($\approx 80 \text{ cm}^3$) es mucho mayor que el volumen ocupado por la vela y su base ($\approx 2 \text{ cm}^3$).

El ascenso del agua se debe, fundamentalmente, a que al colocar el vaso sobre la vela encendida se calienta el aire que contiene y se expande, escapando una parte del mismo hacia la atmósfera. Cuando se apaga la llama y la temperatura del in-

terior del vaso comienza a descender hasta alcanzar la temperatura ambiente, el número de moles de gas dentro del vaso es inferior al inicial; en consecuencia, la presión interior disminuye por debajo de la presión atmosférica y el agua del recipiente entra al vaso, hasta que se equilibran la presión interior y la exterior a temperatura ambiente,^[9, 12] lo que suele ocurrir transcurridos unos 15 minutos desde el inicio del experimento (Figura 2).

El número de moles de gas dentro del vaso y, por tanto, la presión también puede disminuir debido a la combustión de la vela. No obstante, el análisis de la estequiometría de este proceso (ecuaciones 1 y 2) revela que la caída de presión debida a la combustión es notablemente inferior a la originada por el escape de aire, ya que el consumo de oxígeno se compensa parcialmente con la formación de dióxido de carbono.^[16,20]

En efecto, en el caso extremo de que la vela estuviese constituida únicamente por parafina $\text{C}_{25}\text{H}_{52}$ y se consumiera todo el oxígeno atrapado en el vaso y, además, condensara la totalidad del vapor de agua formado en la combustión, la variación en el número de moles de gas n dentro del vaso, de acuerdo con la estequiometría de la ec. (1), sería igual a la diferencia entre el número de moles de dióxido de carbono formados en la combustión, n_{CO_2} , y el número de moles de oxígeno consumidos en dicho proceso, $n_{\text{O}_2, \text{con}}$ (que es igual a $0,21n$, en el supuesto de que se agote el oxígeno):

$$\begin{aligned} \Delta n &= n_{\text{CO}_2} - n_{\text{O}_2, \text{con}} = \frac{25}{38} n_{\text{O}_2, \text{con}} - n_{\text{O}_2, \text{con}} = \\ &= (25/38 - 1)n_{\text{O}_2, \text{con}} = (25/38 - 1) \times 0,21n = -0,072n \end{aligned} \quad (14)$$

Si se realiza el cálculo suponiendo que la vela está constituida únicamente por ácido esteárico, ec. (2), se obtiene un resultado similar ($\Delta n = (18/26 - 1) \times 0,21n = -0,065n$).

Así pues, en el supuesto de que la reducción del número de moles de gas se debiera únicamente a la combustión de la parafina, la presión disminuiría en un máximo del 7 % respecto de la presión atmosférica y el volumen de agua que entraría al vaso (un 7 % de su capacidad) sería significativamente menor al que entra normalmente en este experimento.

Determinación de la fracción molar del oxígeno una vez que se ha apagado la vela

En líneas generales, se trata de utilizar lana de acero para hallar el valor final de la fracción molar del oxígeno en el interior de un vaso con el que se ha cubierto una vela encendida. La base de la vela estará rodeada de agua para garantizar que no entra aire al vaso cuando disminuya la presión en su interior.

Idealmente, la lana de acero debería comenzar a oxidarse una vez que la llama se haya apagado y la temperatura del interior del vaso haya descendido hasta igualarse a la temperatura ambiente, pero dada la dificultad que supone introducir la lana de acero en el vaso, sin modificar la composición de la mezcla gaseosa que contiene tras apagarse la llama, en la práctica se ha optado por introducir la lana en el vaso al inicio del experimento, esto es, antes de cubrir la vela con él. En una primera aproximación, se considerará que la lana de acero no se oxida durante los aproximadamente 15 minutos en los que la temperatura del interior del vaso está por encima de la temperatura ambiente.

Una vez que la llama se apague, y la temperatura del interior del vaso se iguale a la temperatura exterior, el agua habrá alcanzado una cierta altura H_1 en el vaso. En el supuesto de que la combustión de los componentes de la vela haya agotado el oxígeno encerrado bajo el vaso, la lana de acero no se oxidará

y la altura de la columna de agua dentro del vaso permanecerá estable, salvo ligeras fluctuaciones (generalmente, inferiores a 1 mm) ocasionadas por las variaciones de la temperatura ambiente y de la presión atmosférica.

Ahora bien, si cuando se apaga la llama queda todavía oxígeno dentro del vaso, la lana de acero comenzará a oxidarse y el nivel del agua continuará ascendiendo, desde su valor inicial H_1 , hasta un valor final H_2 cuando haya reaccionado la totalidad del oxígeno que no consumió la vela (Figura 3). Como la altura de la columna de aire, una vez que la temperatura interior se ha igualado a la exterior, es $L-H_1$, de acuerdo con la ec. (13) la fracción molar del oxígeno en la mezcla gaseosa dentro del vaso valdrá, aproximadamente,

$$x \approx \frac{H_2 - H_1}{L - H_1} \quad (15)$$

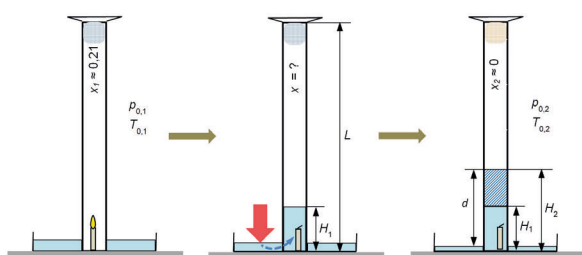


Figura 3. (Izqda.): Situación inicial del experimento tras cubrir con la probeta (en cuyo interior hay una pequeña cantidad de lana de acero) una vela encendida situada en un plato con agua. (Centro): Tras apagarse la llama, disminuye la presión dentro de la probeta y esta absorbe agua hasta una determinada altura H_1 . (Dcha.): Situación final de equilibrio, en la que todo el oxígeno no consumido en la combustión ha reaccionado con la lana de acero y el agua alcanza una altura H_2 .

En la práctica, el resultado que se obtiene con este método para la fracción molar del oxígeno está afectado de un pequeño error debido a que la lana de acero, en contra de la suposición que se hizo anteriormente, sí se oxida durante el período de tiempo que tarda el interior del vaso en alcanzar la temperatura ambiente y, en consecuencia, también contribuye al ascenso del agua (aunque en mucha menor medida que el escape de aire), por lo que el valor de H_1 es ligeramente superior (generalmente, en menos de 1 mm) al que tendría si no se oxidara la lana de acero en los primeros minutos del experimento, cuando todavía no se ha alcanzado el equilibrio térmico.

Este error se puede minimizar acortando el período de tiempo que tarda el interior del vaso en enfriarse hasta alcanzar la temperatura ambiente, lo que puede conseguirse fácilmente refrigerando las paredes del vaso con agua.

Procedimiento experimental

Para llevar a cabo este experimento se necesitará una cubeta o un plato, con agua, una vela delgada (como las utilizadas en las tartas de cumpleaños), un vaso cilíndrico de unos 16 cm de altura que no contenga restos de experimentos anteriores (también puede usarse una probeta de 250 cm³ de capacidad), lana de acero de grano fino y un pequeño pulverizador con disolución de NaCl al 5 %, aproximadamente. Además, se necesitará una jeringa, un rotulador de punta delgada, un termómetro y una regla. A continuación, se describe la secuencia de operaciones necesarias para realizar el experimento.

En primer lugar, se vierten unos 120 cm³ de agua en la cubeta, se coloca la vela en el centro y se mantiene encendida hasta que arda en régimen estable. Seguidamente, se toma una cantidad de lana de acero, cuya masa esté comprendida entre 1 g y 2 g (una cantidad que supera ampliamente la cantidad estequiométrica, aproximadamente 0,20 g de hierro, requerida para que reaccione todo el oxígeno contenido en el vaso), se rocía ligeramente con la disolución de cloruro de sodio, se introduce en el fondo del vaso y se cubre con él la vela. En caso de ser necesario, se retiene la lana en su posición mediante un imán colocado en el exterior de la pared del vaso.

Utilizando la jeringa, se vierten suavemente pequeños volúmenes de agua sobre las paredes del vaso. Tras dos o tres minutos de refrigeración, una vez que la temperatura del interior del vaso esté cercana a la temperatura ambiente, se procede a marcar con el rotulador el nivel del agua H_1 sobre la pared del vaso.

Al cabo de 24 horas habrá reaccionado con el hierro todo el oxígeno que no se consumió en la combustión de la vela y se habrá estabilizado la altura de la columna de agua. Este tiempo es menor si la temperatura ambiente supera los 20 °C. Se marca la posición final H_2 del agua, se saca el vaso de la cubeta, se miden los valores de $L-H_1$ y de H_2-H_1 , y, a partir de la ec. (15), se calcula el valor aproximado de la fracción molar del oxígeno en el momento en el que se apagó la vela.

En el caso de que se desee obtener un valor más exacto de dicha fracción molar, se utilizará la ec. (12) sustituyendo el término $(1 - \frac{H}{L})$ por $(1 - \frac{H_2 - H_1}{L - H_1})$, esto es,

$$x \cong 1 - \frac{(p_{0,2} - p_{0,1}) \cdot T_{0,1}}{p_{0,1} \cdot T_{0,2}} \cdot \left(1 - \frac{H_2 - H_1}{L - H_1}\right) \quad (16)$$

Para efectuar dicho cálculo será necesario medir, además de L , H_1 y H_2 , la diferencia d de alturas entre el nivel exterior y el interior del agua, la temperatura ambiente T_0 y la presión atmosférica p_0 al principio y al final del experimento; los valores de la presión atmosférica se pueden obtener consultando la información meteorológica correspondiente a la localidad y horas en que se inicia y se acaba el experimento.

No obstante, si el experimento se plantea como una simple demostración de que la vela no agota la totalidad del oxígeno disponible, no será necesario efectuar ninguna medida; bastará con marcar la altura H_1 de la columna de agua a los 15 minutos de apagarse la vela (tampoco será necesario refrigerar el recipiente) y la altura final H_2 a las 24 h de iniciado el experimento. En este caso, es conveniente sustituir el vaso por una probeta de 250 cm³ porque, al ser más estrecha que el vaso, los valores de H_1 y de $H_2 - H_1$ son notablemente mayores que los correspondientes al vaso y se aprecia mejor el ascenso de la columna de agua.

Resultados obtenidos

Siguiendo el procedimiento descrito en el apartado anterior, se han llevado a cabo las correspondientes medidas para determinar la fracción molar del oxígeno en la mezcla de gases que queda en el interior de un recipiente con el que se ha cubierto la vela encendida. En la Tabla 1 se muestran las medidas realizadas y los resultados obtenidos en una de las series de experimentos realizados por el autor, utilizando un vaso cilíndrico de vidrio de 15,8 cm de altura interior, lana de acero de grano fino y velas de 4 mm de diámetro y longitud comprendida entre 3 cm y 5 cm.

Tabla 1. Resultados obtenidos en la determinación de la fracción molar del oxígeno en el interior de un vaso cilíndrico, de 15,8 cm de altura (L) y 320 cm³ de capacidad, tras apagarse la vela.

H_1 ±0,001 m	H_2-H_1 ±0,001 m	$T_{0,1}$ ±0,5 K	$P_{0,1}$ ±100 Pa	$T_{0,2}$ ±0,5 K	$P_{0,2}$ ±100 Pa	d ±0,001 m	H_1/L ±0,01	$H_2-H_1/L-H_1$ ±0,01	$x \pm 0,01$ (ec. 16)
0,035	0,020	299,3	100110	299,4	100620	0,047	0,22	0,16	0,16
0,032	0,020	299,4	100110	299,2	100620	0,049	0,20	0,16	0,16
0,041	0,018	299,9	100410	300,3	100500	0,048	0,26	0,15	0,16
0,033	0,020	300,0	100410	300,4	100500	0,050	0,21	0,16	0,16
0,033	0,020	299,8	100460	300,9	100180	0,049	0,21	0,16	0,17
0,031	0,020	299,7	100460	300,7	100180	0,050	0,20	0,16	0,17
0,042	0,018	300,8	100440	301,3	100770	0,048	0,27	0,16	0,16
0,035	0,020	301,3	100440	301,1	100770	0,048	0,22	0,16	0,16
0,037	0,019	301,8	100740	301,0	101060	0,049	0,23	0,16	0,16
0,036	0,019	302,2	100740	301,2	101060	0,050	0,23	0,16	0,15
Valores medios:							0,22 ±0,01	0,16 ±0,01	0,16 ±0,01

La dispersión en los valores experimentales de H_1 y de H_2-H_1 (Tabla 1, columnas 1 y 2, respectivamente) se debe fundamentalmente a que la cantidad de aire que escapa del vaso varía ligeramente en función de la intensidad a la que arde la llama de la vela (que no es exactamente igual en todos los experimentos) y de la rapidez con que se coloca el vaso sobre la vela. A pesar de ello, los valores de la fracción molar (calculados con la ec. 16, col. 10) son similares en la mayoría de los experimentos.

Nótese que los valores de la temperatura y de la presión atmosférica al inicio de cada experimento ($T_{0,1}$ y $P_{0,1}$) se diferencian de los correspondientes valores finales ($T_{0,2}$ y $P_{0,2}$) en menos de un 1 %. Dado que el producto $pgd \approx 1000 \times 9,8 \times 0,05 \approx 500$ Pa, col. 7) es mucho menor que el valor de la presión atmosférica final $P_{0,2}$, los valores de $\frac{H_2-H_1}{L-H_1}$ y de x (cols. 9 y 10) son prácticamente iguales. De hecho, los valores medios de estas dos magnitudes coinciden cuando se expresan con dos cifras decimales.

Considerando una imprecisión de $\pm 0,001$ m en las medidas de longitud, de $\pm 0,5$ K en la temperatura y de ± 100 Pa en los valores de la presión atmosférica, los resultados de la Tabla 1 muestran que, una vez que se ha apagado la llama, el valor de la fracción molar del oxígeno en el interior del vaso es de $0,16 \pm 0,01$. Como la fracción molar del oxígeno en el aire es, aproximadamente, 0,21 (en realidad, algo inferior, tal y como se refleja en la Tabla 2, debido a que la humedad relativa dentro del vaso está cercana al 100 %), se concluye que cuando se apaga la vela se ha consumido, aproximadamente, un 24 % del oxígeno inicial ($\approx \frac{0,21-0,16}{0,21} \times 100$).

Tabla 2. Fracción molar del oxígeno, en el aire saturado en vapor de agua, a diferentes temperaturas y una presión atmosférica de 101,3 kPa.[25]

T (°C)	x
15	0,206
20	0,205
25	0,203
30	0,201

El porcentaje de oxígeno consumido por la vela puede ser todavía menor, dependiendo de las características de la vela y del recipiente que se utilizan en el experimento. Así, por ejemplo, si en lugar de un vaso cilíndrico de unos 16 cm de altura, se cubre la vela con un recipiente de capacidad similar a la del vaso, pero que sea más alto y estrecho, tal como una probeta de 250 cm³ de capacidad nominal, se observa que el tiempo que permanece encendida la vela es alrededor de un 20 % inferior que cuando se cubre con el vaso. Dado que ambos recipientes contienen, aproximadamente, el mismo volumen de aire y que la vela arde, aparentemente, con una intensidad similar en ambos casos, es razonable suponer que la vela consume menos oxígeno, cuando se cubre con la probeta que cuando se cubre con el vaso. Los resultados experimentales (Tabla 3) confirman esta hipótesis, mostrando que la fracción molar del oxígeno, tras apagarse la llama, es mayor en la probeta ($x = 0,18 \pm 0,01$) que en el vaso ($x = 0,16 \pm 0,01$).

Tabla 3. Resultados obtenidos en la determinación de la fracción molar del oxígeno tras apagarse la vela en el interior de una probeta de 30,2 cm de altura (L) y 315 cm³ de capacidad total (250 cm³ de capacidad nominal).

H_1 ±0,001m	H_2-H_1 ±0,001 m	$T_{0,1}$ ±0,5 K	$P_{0,1}$ ±100 Pa	$T_{0,2}$ ±0,5 K	$P_{0,2}$ ±100 Pa	d ±0,001 m	H_1/L ±0,01	$H_2-H_1/L-H_1$ ±0,01	$x \pm 0,01$ (ec. 16)
0,065	0,042	299,0	100210	298,7	100550	0,097	0,22	0,18	0,18
0,067	0,040	299,1	100670	299,2	100400	0,099	0,22	0,17	0,18
0,062	0,043	300,2	100690	299,0	101000	0,098	0,21	0,18	0,18
0,061	0,042	299,8	100690	299,2	101000	0,097	0,20	0,17	0,18
0,064	0,040	298,9	101050	298,3	100820	0,099	0,21	0,17	0,18
0,059	0,043	298,7	101000	298,3	101050	0,099	0,20	0,18	0,18
0,066	0,040	298,0	101050	298,9	100820	0,100	0,22	0,17	0,18
0,059	0,044	298,2	101000	298,8	101050	0,097	0,20	0,18	0,19
0,069	0,041	299,3	100210	298,0	100550	0,099	0,23	0,18	0,18
0,068	0,040	298,9	100670	298,2	100400	0,098	0,23	0,17	0,18
Valores medios:							0,21 ±0,01	0,17 ±0,01	0,18 ±0,01

Obsérvese que la proporción de agua que entra al recipiente que cubre la vela, H_i/L (Tablas 1 y 3, col. 8), tras apagarse la llama, tiene un valor medio cercano a 0,21. El hecho de que la relación H_i/L , sea en algunos experimentos, como los correspondientes a las Tablas 1 y 3, similar al porcentaje en volumen de oxígeno en el aire atmosférico, ha sido interpretado erróneamente, durante mucho tiempo, por algunos autores como una evidencia de que la vela consume la totalidad del oxígeno que contiene el vaso.^[17, 26-32]

La realidad es muy diferente, ya que el valor de la relación H_i/L está determinado, fundamentalmente, por la cantidad de aire caliente que escapa del recipiente con el que se cubre a la vela y no guarda relación con el porcentaje de oxígeno contenido en el aire ni con la cantidad de oxígeno que consume la llama de la vela.

Conclusiones

En contra de la idea, ampliamente extendida entre estudiantes de todos los niveles e, incluso, entre una parte del profesorado, cuando se cubre con un vaso una vela encendida, la llama no se apaga porque se agote el oxígeno del aire atrapado en el vaso. De hecho, cuando se apaga la vela, generalmente, queda todavía entre el 75 % y el 85 % del oxígeno inicial, tal y como se deduce de los resultados de las Tablas 1 y 3.

En este artículo se ha presentado un procedimiento experimental con el que se puede hallar la concentración de oxígeno en el interior del vaso, tras apagarse la vela, basándose en el conocido método que emplea lana de acero para determinar la fracción molar del oxígeno en el aire. El procedimiento propuesto es fácilmente reproducible, no supone riesgos para las personas ni el medio ambiente y es asequible a cualquier centro educativo. En su versión más simplificada, el experimento se puede llevar a cabo con materiales caseros, ya que las únicas medidas que se precisa realizar se pueden efectuar con una regla.

Dicho procedimiento permite hallar, con una exactitud aceptable, el valor de la fracción molar del oxígeno para la cual se apaga la llama de una vela, encontrándose que, en la mayoría de los casos, está comprendida entre 0,16 y 0,18.

No obstante lo anterior, lo realmente importante, desde una perspectiva didáctica, no es hallar el valor más exacto posible de la fracción molar del oxígeno, valor que dependerá de las condiciones particulares de cada experimento, tales como la forma y volumen del recipiente, temperatura ambiente, humedad relativa, etc., sino demostrar de forma clara e inequívoca que la vela nunca agota la totalidad del oxígeno disponible.

Bibliografía

- [1] H. Pfundt, *Representation of physics and chemistry knowledge* **1981**, 320-341.
- [2] E. F. Mortimer, L. C. Miranda, *Química Nova na Escola* **1995**, 2, 23-26.
- [3] M. Meheut, E. Saltiel, A. Tiberghien, *European Journal of Science Education* **1985**, 7(1), 83-93.
- [4] S. B. BouJaoude, *Journal of Research in Science Education Journal of Research in Science Education* **1991**, 28(8), 689-704.
- [5] D. L. Gabel, D. L. Monaghan, J. G. Makinster, J. D. Stockton, *School Science and Mathematics* **2001**, 101(8), 439-451.
- [6] V. Sesto Varela, I. García-Rodeja, *Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias* **2017**, 14(3), 521-534.
- [7] S. Matute, P. Iglesias, O. Gutiérrez, T. Capote, J. Rojas, R. Durán, *Educere* **2013**, 17(57), 309-318. <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=35630152015>.
- [8] I. García-Rodeja, V. Sesto Varela, *Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias*, **2016**, 13(2), 215-229.

- [9] M. Kim, Y. J. Joung, H. G. Yoon. *Issues and Challenges in Science Education Research*, Springer, Dordrecht, **2012**, 175-189.
- [10] H. G. Yoon, Y. J. Joung, M. Kim. *Research in Science Education* **2012**, 42, 589-608.
- [11] L. Leite, A. Afonso. *Canadian Journal of Science Mathematics and Technology Education* **2004**, 4(2), 169-191.
- [12] A. Tomás-Serrano, R. García-Molina. *Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias* **2024**, 21(2), 2203, https://doi.org/10.25267/Rev_Eureka_ensen_divulg_cienc.2024.v21.i2.2203.
- [13] American Chemical Society, "Flame Out", disponible en <https://www.acs.org/content/acs/en/education/whatischemistry/adventures-in-chemistry/experiments/flame-out.html>, **2024** (consultado: 26/09/2024).
- [14] O. Knill, "Getting the facts right" disponible en <https://people.math.harvard.edu/~knill/pedagogy/waterexperiment/>, actualiz. **2014** (consultado: 26/09/2024).
- [15] The University of Western Australia, "Bushfire science 3: Exploring combustion (worksheet answers)", disponible en <https://www.uwa.edu.au/study/-/media/faculties/science/docs/worksheet-answers-exploring-combustion.pdf>, 2015 (consultado: 26/09/2024).
- [16] F. Vera, R. Rivera, C. J. Núñez, *J. Chem. Educ.* **2011**, 88(9), 1341-1342.
- [17] D. I. Rudel, *Science Myths Unmasked: Exposing misconceptions and counterfeits forged by bad science books (Vol. 1: Earth and Life Science)*. Gadflower Press, 2010, ISBN: 9781935776024.
- [18] R. Que, S. Sha, L. Shen, Y. Xiong. *J. Chem. Educ.* **2020**, 97(4), 1195-1197. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.9b00833>.
- [19] G. D. Peckham, *J. Chem. Educ.* **1993**, 70(12), 1008-1009.
- [20] J. P. Birk, A. E. Lawson, *Journal of Chemical Education* **1999**, 76, 914-916.
- [21] D. Krnel, S. A. Glazar. *J. Chem. Educ.* **2001**, 7, 914. <https://doi.org/10.1021/ed078p914>.
- [22] C. Beyler, en *SFPE Handbook of Fire Protection Engineering*, 5ª ed. (Eds.: M. J. Hurley, D. Gottuk, J. R. Jr. Hall, K. Harada, E. Kuligowski, M. Puchovsky, J. Torero, J. M. Jr. Watts, C. Wieczorek), SFPE, Gaithersburg, MD, USA, **2016**, pp. 529-553.
- [23] T. L. Brown, H. E. LeMay, B. E. Bursten, *Química, la ciencia central*, Prentice Hall, México, **1997**.
- [24] J. P. Birk, L. McGrath, S. K. Gunter, *J. Chem. Educ.* **1981**, 58, 804-805.
- [25] A. Tomás, M. Pastor, *An. Quím. RSEQ* **2023**, 119(2), 99-106.
- [26] E. K. Cooper, *Discovering Chemistry*, Butterworth, London, **1963**.
- [27] V. L. Mullin, *Chemistry Experiments for Children*, Dover, New York, **1968**.
- [28] J. Glanz, *J. Chem. Educ.* **1963**, 40, 6, A477.
- [29] V. Cobb, *Chemically Active*, Lippincott, New York, **1985**.
- [30] C. H. Fang, *J. Chem. Educ.* **1998**, 75, 58-59.
- [31] S. K. Clark, *Journal of Geoscience Education* **2009**, 57(2), 99-100.
- [32] H. G. Riveros, *Eur. J. Phys. Educ.* **2012**, 3, 52-57.



Antonio Tomás-Serrano

Profesor jubilado de Enseñanza Secundaria

Co: atserrano@gmail.com

ORCID: 0000-0002-4325-6562

Se licenció en Ciencias Químicas por la Universidad de Murcia en 1977. Ha ejercido como profesor de Física y Química en diferentes Institutos de Educación Secundaria. Ha colaborado con Centros de Profesores impartiendo cursos de formación para el profesorado. Es autor de varias publicaciones (artículos y libros) sobre realización de trabajos prácticos de laboratorio con materiales de uso cotidiano.

La química que se esconde detrás de las mascarillas de oxígeno de los aviones

The chemistry behind airplane oxygen masks

Fernando I. de Prada Pérez de Azpeitia

Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física y la Química (RSEF y RSEQ).

PALABRAS CLAVE:

Máscara de oxígeno
Generador de oxígeno
Clorato de sodio
Captura de CO₂

RESUMEN:

Todos los pasajeros que viajan en avión son informados por la tripulación de cabina del procedimiento para colocarse las mascarillas de oxígeno en caso de una despresurización de emergencia. Pero ¿de dónde procede este oxígeno? Mucha gente piensa que se encuentra almacenado en tanques. Sin embargo, el oxígeno sale de pequeños generadores químicos (COGs, Velas de Oxígeno), que contienen clorato de sodio, reactivo que al descomponerse térmicamente genera oxígeno. Bajo una perspectiva didáctica, se muestran las reacciones químicas implicadas en los generadores de oxígeno en espacios confinados y en los sistemas de captura de CO₂ exhalado en espacios sin renovación de aire.

KEYWORDS:

Oxygen mask
Oxygen generator
Sodium chlorate
CO₂ capture

ABSTRACT:

All passengers traveling by plane, are informed by cabin crew how to put on oxygen masks in case of an emergency depressurization. But where does this oxygen come from? Many people think it is stored in tanks. However, it comes from small chemical oxygen generators (COGs, Oxygen Candle), containing sodium chlorate, a reagent that decomposes thermally, generating oxygen. From a didactic point of view, the chemical reactions involved in oxygen generators in confined spaces and CO₂ capture systems in spaces without air renewal are shown.

Introducción

"La química está en todas partes, hasta tal punto que la mayoría de las veces suele pasar desapercibida" (Jean-Marie Lehn, Premio Nobel de Química en 1987).

Si preguntamos a los pasajeros de un avión, ¿de dónde procede el oxígeno que llega a las mascarillas en caso de una despresurización de emergencia?, probablemente la mayoría responderán que desde unos tanques donde se encuentra comprimido y almacenado.

Sin embargo, almacenar el oxígeno en grandes cilindros metálicos, además de ser muy peligroso (Indicaciones de peligro: H270 -puede provocar o agravar un incendio, H280 -peligro de explosión en caso de calentamiento), sería una carga demasiado voluminosa y pesada que aumentaría de forma notable el consumo de combustible. Por estas razones, los aviones cuentan con unos pequeños cartuchos metálicos, del tamaño de un termo, conocidos como generadores químicos sólidos de oxígeno (COGs) o velas de oxígeno (*Oxygen Candles*), que contienen clorato de sodio, reactivo que genera oxígeno al descomponerse. Estos cartuchos pesan solo un tercio de lo que pesarían depósitos cilíndricos para la misma cantidad de oxígeno, siendo más económicos de instalar y mantener.

Los procesos que tienen lugar en los generadores de oxígeno, junto a los sistemas de captura de CO₂ exhalado en espacios confinados y sin renovación de aire, se analizan bajo dos perspectivas. Una didáctica, con el fin de que sean de utilidad al docente como recurso didáctico y, otra divulgativa, para poner en relieve la importancia de la química en proporcionar un aire respirable en el interior de aeronaves y cosmonaves.

¿Por qué es necesario oxígeno de emergencia en los aviones?

Al aumentar la altura sobre el nivel del mar y hasta el límite de la atmósfera, sobre 100 km de altitud, el porcentaje en volumen de los gases que la forman permanece constante (21 % de oxígeno, 78 % de nitrógeno, 1 % otros gases). Sin embargo, con la altitud disminuye la cantidad total de moléculas gaseosas por volumen (densidad) debido a que la fuerza gravitatoria que atrae a las moléculas es menor y, a la vez, existe menos aire empujando hacia abajo, disminuyendo la presión que ejerce. Como resultado, la presión atmosférica disminuye de forma exponencial.^[1] Si bien, se puede considerar de forma aproximada, en los primeros 10 km el gradiente de presión es lineal. En la figura 1, se muestra la gráfica de una posible situación, dado que la presión depende de muchos factores, entre ellos la temperatura, gravedad, humedad y condiciones climáticas.

CÓMO CITAR: F. Prada. *An. Quím. RSEQ* 2024, 120, 212-218, DOI: 10.62534/rseq.aq.2006

* Ce: fernando.pradaperez@educa.madrid.org

Así, por ejemplo, si ascendemos hasta la cumbre del Pico Peñalara (2430 m) de la Sierra de Guadarrama, donde la presión se reduce a unas 0,75 atm, podremos respirar sin dificultad ni sufrir el mal agudo de montaña. Pero a la altitud de crucero de un avión (entre 10-12 km), debido a la gran reducción de la presión atmosférica ($\approx 0,25$ atm), unas tres cuartas partes menos que la presión del aire a nivel del mar, inhalaríamos el mismo volumen total de aire en los pulmones que en el nivel de referencia (altitud cero), pero la cantidad de moléculas de oxígeno que respiraríamos sería mucho menor (sobre la cuarta parte). Teniendo en cuenta que el oxígeno penetra por sobrepresión en los alvéolos de los pulmones, cuando la presión disminuye, se reduce la difusión pulmonar y, como consecuencia, el paso del oxígeno a la circulación sanguínea, lo que origina problemas al respirar y limita el suministro de oxígeno al cerebro, músculos y resto de órganos.

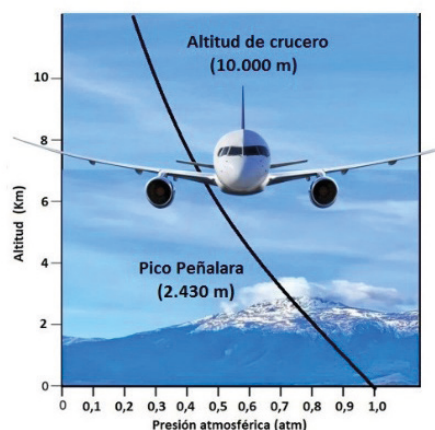


Figura 1. Gráfica de la variación de la presión atmosférica con la altitud.

Cuando los pasajeros embarcan en un avión, la presión interior de la cabina es la misma que la presión exterior y se respira normalmente. Al ir a despegar, el piloto activa el sistema de control de aire acondicionado, sellando la cabina herméticamente. Según va ascendiendo el avión, la presión exterior va disminuyendo, pero el sistema de presurización captura aire del exterior, a través de las turbinas de los motores, y lo comprime y enfría antes de introducirlo en la cabina de pasajeros. De esta forma, se regula la presión interior creando una atmósfera artificial en la que se respira sin ninguna dificultad.

Al alcanzar la altitud de crucero, la presión en cabina permanece constante durante todo el viaje, pero no a la que tendría en tierra (≈ 1 atm), sino a una inferior, entre 0,7 y 0,8 atm, lo que causa cierta somnolencia y fatiga si el viaje es largo. La normativa de seguridad establece en 9 psi (0,6 atm) la presión diferencial: límite entre la presión de la cabina y la del exterior. De esta forma, se protege la estructura metálica del fuselaje de contracciones y expansiones desmedidas, causantes de fatiga del material. Por esta razón, los aviones comerciales no suelen volar a altitudes superiores a 17 km.

La variación en la presión interna de la cabina se puede comprobar con una bolsa de aperitivos (Fig. 2). Cuando el avión toma altura, la presión interior disminuye respecto a la del gas contenido en la bolsa (nitrógeno). Como resultado, el gas se expande y la bolsa se hincha. Al aterrizar, retornaría a su tamaño original. Si la cabina no estuviese presurizada, a partir de unos 5000 m de altitud ($\approx 0,5$ atm), el volumen del gas casi se duplica y la presión que ejerce podría causar la explosión de la bolsa.



Figura 2. Efecto de la disminución de la presión en la cabina de pasajeros sobre una bolsa de aperitivos.

Cabe preguntarse: ¿por qué los aviones no viajan a una altitud más baja, en la que los pasajeros puedan respirar sin dificultad durante todo el viaje? La respuesta se encuentra, por un lado, en la seguridad, a ciertas alturas hay menos obstáculos, menos turbulencias y mayor tiempo para realizar un aterrizaje de emergencia; por otro lado, en la eficiencia energética, la densidad del aire disminuye con la altitud, lo que reduce la resistencia aerodinámica del avión, permitiendo volar más rápido y con menor consumo de combustible.

Si por alguna emergencia (accidente, problemas técnicos, sabotaje...) se produce una pérdida imprevista del aire a presión de la cabina y la presión interna disminuye bruscamente, los pasajeros podrían perder el conocimiento en menos de un minuto. Para evitar la hipoxia, desde un panel superior situado sobre las filas de los asientos (Unidad de Servicio de Pasajeros o PSU), se liberan unas máscaras amarillas que caen de forma automática sobre los pasajeros. Con el objetivo de estar preparados frente a una despresurización, antes de despegar el avión, la tripulación de cabina de pasajeros (TCP) debe informar del procedimiento a seguir: *si la cabina pierde presión, las máscaras de oxígeno caerán automáticamente sobre su asiento, tire de la máscara y colóquela sobre su nariz y boca, deslice la banda elástica alrededor de su cabeza y aspire normalmente...* (Fig. 3).

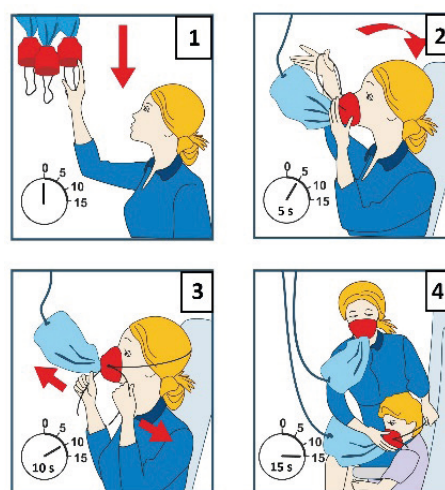


Figura 3. Instrucciones para colocarse las máscaras de emergencia.

El tiempo medio estimado para que los pasajeros se coloquen las mascarillas de silicona es de 15 s, que se corresponde con el tiempo útil de conciencia (TUC): tiempo estimado que tiene una persona antes de perder el conocimiento si le falta oxígeno. La bolsa de plástico unida a cada mascarilla equilibra

el flujo continuo de oxígeno, recogiendo el exceso que no se ha inhalado para que pueda volver a ser respirado.

El oxígeno fluye de forma continua, y a presión, a través de un tubo conectado a la mascarilla, lo que permite respirar a los pasajeros durante un mínimo de 15 min y mantenerlos conscientes. Este tiempo se considera el suficiente para que el piloto descienda el avión a la altitud adecuada (≤ 2400 m) donde la presión atmosférica permita respirar sin aporte extra de oxígeno. Por ende, las rutas de aviones comerciales evitan atravesar zonas montañosas que superen la altitud mínima de seguridad a la que habría que descender en caso de despresurización, como es el caso de la meseta del Tíbet (4900 m de altitud media y 8849 m de altitud máxima en el monte del Everest).

Los aviones disponen también de otros sistemas de oxígeno de emergencia: -botellas portátiles, para proporcionar oxígeno a los tripulantes de cabina y pasajeros con urgencias médicas, y -botellas integradas en la cabina de mando, para piloto y copiloto.

¿De dónde sale el oxígeno de emergencia?

El oxígeno que llega a las mascarillas procede de generadores químicos sólidos de oxígeno (Fig. 4), que contienen clorato de sodio (80 % NaClO_3), mezclado con otros reactivos, como perclorato de potasio (1 % KClO_4); hierro en polvo (10 % Fe), peróxido de bario (4 % BaO_2) y aglutinantes; fibra de vidrio y lana de acero (5 %).^[2]

Inicialmente, como proveedor de oxígeno se empleó clorato de potasio, pero al ser muy higroscópico dificultaba la ignición, por lo que fue sustituido por clorato de sodio, que además presenta mayor porcentaje en masa de oxígeno y menor temperatura de fusión

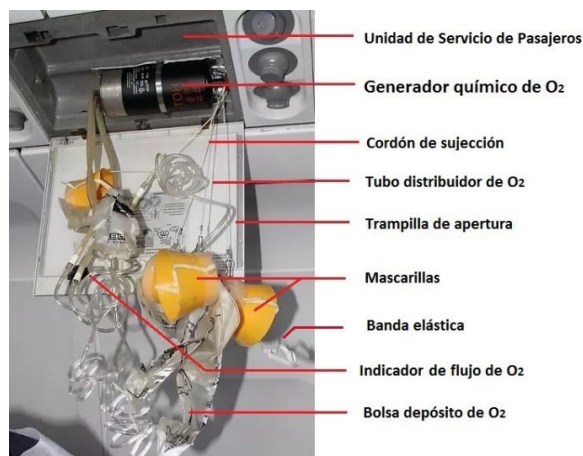
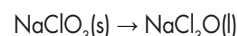


Figura 4. Componentes del sistema de suministro de oxígeno de emergencia en los aviones.

Para que se inicie la generación de oxígeno, previamente es necesario tirar del cordón de sujeción de las mascarillas, que se encuentra conectado a un sistema (mecánico o eléctrico).^[3] Esta acción (impacto, fricción, calor) suministra la energía necesaria para la detonación de una cápsula fulminante que contiene una mezcla iniciadora formada por explosivos primarios, p. ej. estifnato de plomo con tetrazeno explosivo.

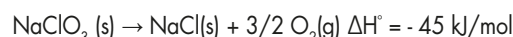
Como resultado de esta pequeña detonación, se desprende la suficiente energía térmica para iniciar la descomposición del clorato de sodio y, a través de una serie de procesos, la generación de oxígeno respirable.

La primera transformación, cuando la temperatura alcanza unos $250\text{ }^\circ\text{C}$, es la fusión del clorato de sodio:



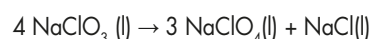
Al seguir aumentando la temperatura, y alcanzar sobre $450\text{ }^\circ\text{C}$, se inicia la descomposición térmica del clorato, formándose cloruro de sodio, como residuo sólido, y oxígeno gaseoso. Este es el oxígeno que sale del generador (Fig. 5) y llega por un tubo hasta la mascarilla para ser respirado por los pasajeros, con un ligero olor a quemado.

La reacción principal que tiene lugar en el interior del generador se puede representar por la ecuación global:^[4]



El proceso no es directo, tienen lugar reacciones intermedias:

- descomposición del clorato de sodio en perclorato de sodio y cloruro de sodio:



- descomposición del perclorato de sodio:

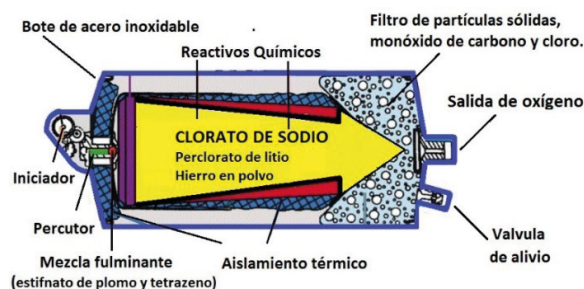
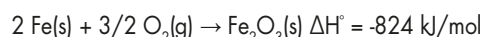


Figura 5. Diagrama de un generador químico sólido de oxígeno (COGS).

El calor generado en la descomposición del clorato es insuficiente para sostener la temperatura requerida para el proceso y conseguir una producción continua de oxígeno.^[5] Para mantener activa la reacción y sea autosostenible, el clorato se mezcla con dos reactivos:

- hierro en polvo (tamaño de partícula $\leq 100\text{ }\mu\text{m}$): que reacciona con una parte del oxígeno que se libera y desprende el calor necesario para que la reacción no se detenga y sea autosostenible,^[6] pudiendo alcanzar temperaturas superiores a $600\text{ }^\circ\text{C}$. Como residuo, se forma óxido de hierro (III), producto que no es nocivo:



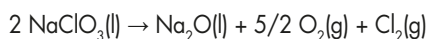
- óxido de cobalto (Co_3O_4) o de otro metal de transición; con acción catalizadora, a la vez que reduce la temperatura de descomposición del clorato para liberar oxígeno.

El pequeño porcentaje de perclorato de potasio que se incluye en la mezcla del generador produce un efecto endotérmico: absorbe una parte del calor desprendido en la descomposición del KClO_3 , lo que reduce la temperatura que alcanzan

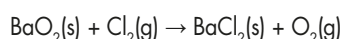
las paredes del recipiente y la del oxígeno respirable. Por otro lado, al descomponerse genera más oxígeno, compensando la pérdida debida a la combustión del hierro.

Con el objetivo de proteger al equipo periférico de las altas temperaturas que se producen en el interior del generador, el recipiente metálico está envuelto con un aislante térmico. De esta forma no se llega a superar los 150 °C.^[7]

Como producto secundario, en la descomposición del clorato de sodio, se forman pequeñas cantidades de cloro:



Dado que el cloro es un gas muy tóxico en pequeñas cantidades (máximo permitido en el aire: 0,001 mg/L), para absorberlo y purificar el oxígeno, al clorato se le añade peróxido de bario (BaO_2):^[8]



Todos los componentes químicos de la mezcla del COGs, se encuentran formando un aglomerado con fibra de vidrio, que estabiliza la velocidad de la reacción de descomposición del clorato de sodio. Una vez iniciado el proceso, ya no se puede detener hasta que finalice en unos 15 min, tiempo suficiente para que el piloto descienda a una altitud que permita respirar sin la máscara.

Teniendo en cuenta que la generación de oxígeno es proporcional al área de la sección transversal del cilindro y, por tanto, a su diámetro, la cantidad de oxígeno generado está regulada por la geometría del depósito interno que contiene los reactivos. Por esta razón, es más ancho por un extremo, cuando se necesita más oxígeno para respirar por estar a mayor altura, y más estrecho a la salida, cuando el avión ya tendría que haber descendido a una altitud segura, donde el aire es respirable.

En el caso de una emergencia producida por un incendio en la cabina, las máscaras no se despliegan automáticamente porque el oxígeno que generan podría acelerar el fuego. En estas situaciones, los auxiliares de vuelo disponen de un equipo respiratorio de protección (PBE), formado por una máscara facial, o campana personal, que protege del humo y gases nocivos, con suministro de oxígeno comprimido durante 15 min, tiempo estimado como suficiente para solucionar la emergencia.

Experimentación: Generación de oxígeno en el laboratorio

En el laboratorio se puede reproducir fácilmente la reacción que se produce en el interior de un generador químico de oxígeno. En lugar de NaClO_3 , se utiliza el KClO_3 como precursor de oxígeno, el comportamiento químico es semejante. Si bien, desde 2021 está prohibida la venta de cloratos a particulares,^[9] es posible adquirirlo para laboratorios didácticos. Para comprobar la producción de oxígeno, se utiliza un trozo de golosina que contenga azúcares simples (glucosa y/o fructosa).

Objetivos didácticos

- Identificar la reacción de descomposición como un proceso redox y definir los cambios en los números de oxidación.
- Diferenciar entre combustibles y comburentes.
- Analizar la influencia de la concentración del oxígeno en la cinética de la reacción.
- Comprobar el alto contenido energético que contienen las golosinas, concienciando a los estudiantes sobre la mode-

ración en su consumo, cuyo exceso puede causar problemas de salud.

Materiales y reactivos

Tubo de ensayo de borosilicato (20 cm x 2,5 cm), espátula, mechero Bunsen, clorato de potasio, golosina (malvavisco, gominola, etc.).

Procedimiento experimental

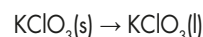
- Con una espátula, introducir una pequeña cantidad de clorato de potasio puro (≤ 3 g) en un tubo de ensayo seco y bien limpio.
- Calentar con el mechero, de forma uniforme, la base del tubo. Utilizar pinzas, guantes y gafas de seguridad o protector facial.
- Continuar calentando el tubo, alrededor de la superficie que contiene el clorato hasta fundirlo totalmente, cambio de estado que requiere de poco tiempo.
- Apagar el mechero, introducir el trozo de la golosina hasta el fondo del tubo (Fig. 6) para que reaccione con el oxígeno liberado. Agitar el tubo suavemente para mantener la combustión.
- Al finalizar la reacción, dejar enfriar el tubo en un lugar seguro y a temperatura ambiente. Limpiarlo y retirar el residuo formado (KCl). Como no es tóxico, se puede verter al cubo de basura general o al fregadero del laboratorio, disuelto en agua.



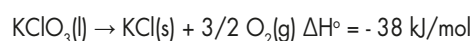
Figura. 6. Combustión sorprendente de una golosina con clorato de potasio (Feria Madrid por la Ciencia).

Discusión y resultados

Cuando el clorato de potasio se calienta y alcanza el punto de fusión (356 °C), se inicia el cambio de estado de sólido a líquido:

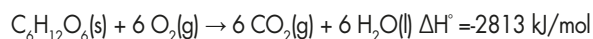


Alcanzado el punto de ebullición (400 °C), se produce la descomposición térmica, liberándose oxígeno gaseoso, según la ecuación global:^[10]



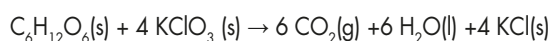
En esta reacción redox, el oxígeno del clorato se oxida de O^{2-} a oxígeno elemental O_2 , lo que explica que actúe como un fuerte oxidante. A la vez, el cloro se reduce de Cl^{+5} a Cl^{-1} .

Al introducir la golosina, que actúa como sustancia reductora, debido a la alta concentración del comburente O_2 (oxidante), se produce la fulgurante oxidación del azúcar ($C_6H_{12}O_6$) que contiene, según la ecuación:



El calor desprendido favorece la descomposición térmica del clorato de potasio, a la vez que mantiene la combustión. La llama de color violeta que se observa indica la presencia de iones K^+ .

El proceso global se caracteriza por la liberación de energía química en diferentes formas: -energía térmica, es un proceso muy exotérmico, -energía luminosa, con un color morado debido al ion potasio que contiene el clorato, y -energía sonora, causante del estrépito producido por la rapidez con la que se desprenden los gases:



Si la golosina se quema exclusivamente con el oxígeno del aire (21 %V), la cantidad total de energía desprendida en la combustión será la misma que al reaccionar con una elevada concentración de oxígeno, pero a menor velocidad. Por el contrario, si se añade un catalizador (MnO_2), el oxígeno se liberará más rápidamente, y al aumentar su concentración en el tubo, la velocidad de la combustión aumentará.

Otras consideraciones

Es recomendable que la experiencia sea realizada personalmente por el docente o, si lo considera, bajo supervisión directa y cumpliendo las normas de seguridad indicadas. Es adaptable a diferentes niveles preuniversitarios, con el grado de profundidad que se considere adecuado, teniendo en cuenta los currículos correspondientes. Así, p. ej., en bachillerato es más factible analizar los procesos redox a partir de los cambios en los estados de oxidación.

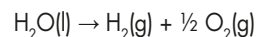
El oxígeno en las cosmonaves

Los generadores químicos sólidos de oxígeno no solo están presentes en los aviones, también son imprescindibles en espacios herméticos (anaeróbicos) donde se necesite oxígeno en caso de emergencia, como en el espacio, a miles de kilómetros de la Tierra (cosmonaves) o bajo el agua, a cientos de metros de la superficie (submarinos). Por ejemplo, la Estación Espacial Internacional (ISS) dispone de este tipo de generadores, basados en una reacción de descomposición semejante a los utilizados en los aviones comerciales. Utilizan perclorato de litio ($LiClO_4$),^[11] reactivo que libera mayor porcentaje de su masa en oxígeno (60 %) que el clorato de sodio (45 %), lo que permite a los miembros de la tripulación respirar durante varias horas. El $LiClO_4$ se descompone, sobre 420 °C, produciendo cloruro de litio y oxígeno:

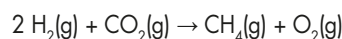


En el interior de la ISS, que orbita a unos 400 km de la Tierra, la composición del aire y la presión (entre 724-770 mmHg) son semejantes a la del nivel del mar. De esta forma, los astronautas puedan permanecer varios meses sin problemas relacionados con la altitud. El oxígeno que respiran se

obtiene de un sistema (Oxygen Generation Assembly: OGA),^[12] basado en la electrólisis del agua a partir de la electricidad generada por paneles solares, descomponiéndola en oxígeno e hidrógeno.



El hidrógeno generado se expulsa al espacio o se combina con el dióxido de carbono exhalado para generar oxígeno:



En el caso de los aviones comerciales, el CO_2 que emiten los pasajeros en la cabina no es un problema: los sistemas de ventilación renuevan totalmente el aire, en unos 3 min. El aire nuevo penetra a través de la parte superior de la cabina y ocupa alrededor del 60 % del aire interior. El porcentaje restante recircula y se purifica con unos filtros HEPA (High Efficiency Particulate Air), semejantes a los filtros de los quirófanos, que capturan hasta el 99,9 % de virus y bacterias. La cabina del avión dispone de válvulas, cerca de la cola, que dejan salir aire al exterior para regular la calidad y presión del aire del interior.

Sin embargo, en espacios confinados y sin posibilidad de renovación del aire, tan importante es suministrar un flujo constante de oxígeno, como disponer con un sistema para purificar el aire que retire el CO_2 exhalado y los tripulantes no se mareen ni desmayen cuando supere ciertos niveles.

Seguidamente, se muestran algunos sistemas utilizados para la captura del dióxido de carbono que exhalan los astronautas durante sus misiones en el espacio.

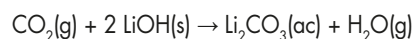
¿Cómo se elimina el exceso de CO_2 exhalado por los astronautas en la Estación Espacial Internacional?

En el S. XVI, el médico y alquimista Paracelso escribió: *dosis sola facit venenum* (la dosis hace el veneno). Esto se podría aplicar al CO_2 , una sustancia no tóxica y necesaria para la vida en la Tierra. El aire que respiramos contiene sobre el 0,04 % en volumen (400 ppm). Por encima del 1 %, y dependiendo del tiempo de exposición, es nocivo para la salud, pudiendo provocar somnolencia, mareo, náuseas, dificultad respiratoria y pérdida de conocimiento. A niveles superiores al 8 % en el aire, se considera letal su respiración.

En la ISS, el dióxido de carbono que exhalan los tripulantes se retira del aire al pasar por un sistema (CDRA) con filtros reutilizables de zeolita,^[13] que actúa como tamiz molecular, adsorbiendo el CO_2 sobre la superficie del lecho. Una vez que el lecho se ha saturado, se despresuriza para liberar el gas al espacio, mientras otro filtro de reserva entra en funcionamiento.

Otro sistema de retirar el CO_2 expirado por los astronautas, es mediante la carbonatación con una base fuerte ($LiOH$). Este es el que emplea el sistema portátil de soporte vital (Portable Life Support System: PLSS); la mochila conectada al traje espacial que se ponen los astronautas para realizar actividades extravehiculares (EVA) durante los paseos espaciales (Fig. 7).^[14]

En la reacción con $LiOH$, se forma carbonato de litio y agua:



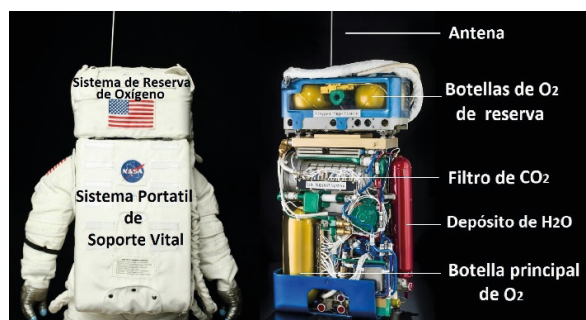
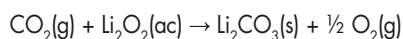


Figura 7. Mochila de astronauta con soporte vital para caminatas espaciales (Smithsonian National Air and Space Museum).

De la estequiometría de la reacción, se deduce que cada gramo de LiOH anhidro captura 0,918 g de CO₂ (513 mL, suponiendo gas ideal a 1 atm y 27 °C). Para absorber todo el CO₂ que exhala una persona en reposo en un día sería suficiente con 0,6 Kg de LiOH, pero debido a las actividades físicas que realizan los astronautas requieren de cantidades superiores (2 kg).^[15]

El peróxido de litio (Li₂O₂), también se utiliza para capturar CO₂, con la ventaja de liberar oxígeno durante el proceso:



Para que los astronautas puedan respirar al realizar sus operaciones extravehiculares, el sistema PLSS contiene botellas de oxígeno. Si fallase el suministro primario, existe otro secundario de emergencia (Oxygen Purge System: OPS), situado sobre el primario, que proporciona una reserva extra de oxígeno en caso necesario.

A nivel global, la gran cantidad de CO₂ vertido a la atmósfera, por las industrias y centrales eléctricas que utilizan combustibles fósiles, es nocivo para el medio ambiente por ser un gas de efecto invernadero, que afecta al clima y a la temperatura del planeta. Precisamente, la extracción directa del CO₂ de la atmósfera mediante la reacción con LiOH es una de las alternativas que se están investigando para reducir sus niveles y cumplir con los objetivos de la Cumbre del Clima (COP26).

Experimentación: Captura del CO₂ en el laboratorio

Esta experiencia muestra un procedimiento sencillo para capturar el CO₂ del aire. Para ello, se hace reaccionar el CO₂ con una disolución de hidróxido de sodio (sosa cáustica), un reactivo habitual en laboratorios y, utilizado como desatascador de fregaderos, en los hogares. Al igual que el hidróxido de potasio, es una base fuerte y corrosiva. Como fuente de CO₂ se utiliza el que encuentra disuelto a presión en un agua mineral natural con gas y se libera al abrir la botella. También se puede utilizar el gas liberado por una pastilla efervescente al disolverse en agua.

Objetivos didácticos

- Identificar una reacción de captura de gas a partir de la disminución de presión que se origina.
- Verificar que en el proceso se cumple la ley de conservación de la masa, aunque el volumen cambie.
- Reconocer la importancia de la química en proteger la calidad del aire respirable, en ambientes herméticos y en medios naturales, mediante sistemas de captura de contaminantes.

Reactivos y materiales

Agua con gas, hidróxido de sodio, botella de plástico de 500 mL, guantes de vinilo, balanza de laboratorio.

Procedimiento experimental

- Añadir 200 mL de agua con gas a una botella de plástico de medio litro de capacidad y removerla (sin tapar) para que el interior se llene de CO₂ y desplace el aire al exterior.
- Utilizando guantes de laboratorio, introducir en la botella unos 10 g de NaOH.
- Cerrar herméticamente la botella con el tapón y, para favorecer el contacto entre los reactivos, agitarla energicamente durante unos 3 minutos (Fig. 7).

Discusión y resultados

Como consecuencia de la captura del gas CO₂ por el NaOH, disminuye la presión del interior de la botella y se aplasta (Figura 8).

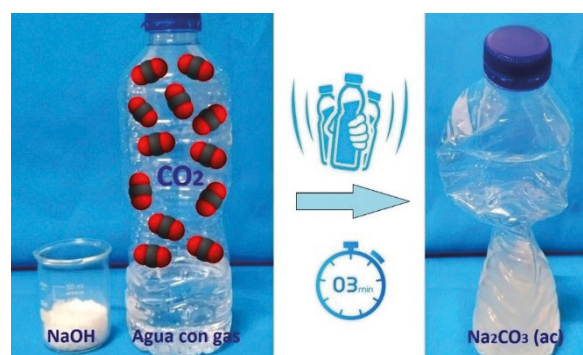
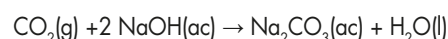


Figura 8. Efecto de la captura del CO₂ desprendido por un agua mineral con gas.

Entre los productos de la reacción se encuentra el carbonato de sodio, sustancia inocua para el medio ambiente y una de las materias primas más sintetizadas y utilizadas en la industria química y alimentaria:



Mediante una balanza se puede comprobar que, aunque el volumen de la botella disminuya, la masa no cambia: es la misma al inicio, durante y al final de la reacción.

Otras consideraciones

Teniendo en cuenta que el procedimiento es muy sencillo y los contenidos son de química básica, la experiencia puede ser realizada tanto en ESO como en Bachillerato, siempre bajo la supervisión del profesor y con las medidas de seguridad adecuadas.

Conclusiones

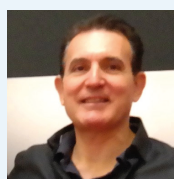
Gracias a la química, se han desarrollado sistemas para suministrar oxígeno de emergencia, y capturar el dióxido de carbono exhalado, que han permitido al ser humano viajar en espacios confinados y explorar espacios anaeróbicos. Desde el punto de vista didáctico, el análisis de estos sistemas es un recurso que favorece la adquisición de la competencia clave en ciencia, a partir de la descripción de reacciones químicas de interés y de la valoración positiva de las implicaciones e importancia que tiene la química en la tecnología, la sociedad

y el medioambiente. La incorporación de experiencias de laboratorio rompe la brecha teoría-práctica y mejora la comprensión de contenidos que forman parte de los actuales currículos en diferentes niveles preuniversitarios. Para conseguir estos fines, corresponde a la Consejería de Educación correspondiente implantar de forma ordinaria los desdobles de laboratorio en Física y Química en todos los centros y niveles donde se imparta.

En palabras del Premio Nobel (2010) japonés Akira Suzuki, "el desinterés que muestran los jóvenes por la química es un problema muy serio". Para contrarrestar esta predisposición, es fundamental estimular su curiosidad por esta apasionante ciencia, esencial para el desarrollo de la sociedad. Ni las nuevas normativas ni los cambios constantes del currículo han conseguido transmitir la importancia y el atractivo de la química. Es el docente, con sus conocimientos, recursos y entusiasmo, el principal responsable de ilusionar e incentivar el deseo de aprender entre los estudiantes.

Bibliografía

- [1] H. Young, R. Freedman. Física Universitaria. Adison-Wesley. **2009**, (1), 615.
- [2] W. H. Schechter, R.R. Miller, R. M. Bovard, C. B. Jackson. J. R. Pappenheimer. *Ind. Eng. Chem.* **1950**, 42, 11, 2348–2353. <https://doi.org/10.1021/ie50491a045>
- [3] Liu, Jg., Jin, Lz., Gao, N. et al. *Int. J. Miner. Metall. Mater.* **2019**, 26, 925–937. <https://doi.org/10.1007/s12613-019-1809-6>
- [4] J. Graf. NASA. Technical Reports Server. **2017**. <https://ntrs.nasa.gov/api/citations/20170002051/downloads/20170002051.pdf>
- [5] E. Shafirovich y col. *Combustion and Flame.* **2012**, (159) 420-426. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2011.07.004>
- [6] V. N. Harwood. *Chemical Oxygen Generators for Business and Utility Aircraft.* SAE Transactions. **1971**, 80, 1494–1502. <http://www.jstor.org/stable/44651800>
- [7] Y.Kim. J. *Korean Soc. Aviat. Aeronau.* **2022**, 30, (2), 55-60. <https://doi.org/10.12985/ksaa.2022.30.2.055>
- [8] Y.C. Zhang y col. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1993**, 32, (5), 966–969. <https://doi.org/10.1021/ie00017a028>
- [9] Diario Oficial de la Unión Europea, Reglamento (UE) 2019/ 1148 del Parlamento Europeo y del Consejo. **2019**. DOUE-L-2019-81155
- [10] H. Pouretedal, M. Ravanbod. *Central European Journal of Energetic Materials.* **2016**, 13, 505-525. doi:10.22211/cejem/64999
- [11] M. M. Markowitz y col. *Ind. Eng. Chem. Prod. Res. Dev.* **1964**, 3 (4): 321–330. doi:10.1021/i360012a016
- [12] K. Takada. *Advanced Oxygen Generation.* Centro Espacial Johnson de la NASA. **2022**. Podcast, 231. Consultado 1/11/2024. <https://www.nasa.gov/podcasts/houston-we-have-a-podcast/advanced-oxygen-generation/>
- [13] L.Shaw. *Recycling Water and Air.* Centro Espacial Johnson de la NASA. **2019**. Podcast, 105. Consultado 1/11/2024. <https://www.nasa.gov/podcasts/houston-we-have-a-podcast/recycling-water-and-air/>
- [14] C. Stuart. *How to Live in Space*, Smithsonian Books. **2018**, 59.
- [15] D. L. Malpica. *Ciencia y Poder Aéreo.* **2023**, 18(1), 6-24. <https://doi.org/10.18667/cienciaypoderaaereo.753>



Fernando I. de Prada Pérez de Azpeitia

Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física y la Química (RSEF y RSEQ)

C-e: fernando.pradaperez@educa.madrid.org
ORCID: 0000-0002-4897-2082

Fernando de Prada, profesor de Física y Química en la Comunidad de Madrid y miembro del Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física y Química (RSEQ/RSEF). Entre sus colaboraciones se encuentran diversas instituciones, entidades y empresas: Aula Mentor (MEFD), Centros de Formación del profesorado (CM) Grupo Editorial SM, Parque de Atracciones de Madrid, Real Sociedad Española de Química, Real Sociedad Española de Física y Museo Nacional del Prado. Participa de forma activa en eventos de divulgación científica: Feria Madrid es Ciencia, Ciencia en Acción, El Pati de la Ciència, ConCienciarte, Jornadas de divulgadores de ciencia (DDD), etc.

El modelo atómico de Bohr-Sommerfeld

The Bohr-Sommerfeld atomic model

Santiago Álvarez

Catedrático Emérito de Química Inorgánica.

Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Inorgànica; Institut de Química Teòrica i Computacional UB; Universitat de Barcelona.

– En el nombre de Dios, ¿qué eres?

Así exhortada, la voz respondió:

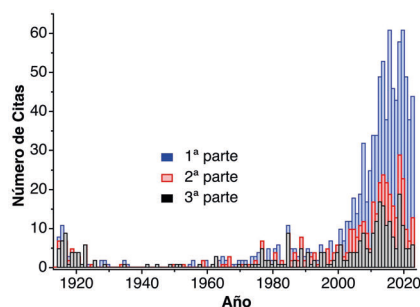
– Soy un átomo.

Tobias Smollett, *The History and Adventures of an Atom*, 1769.^[1]

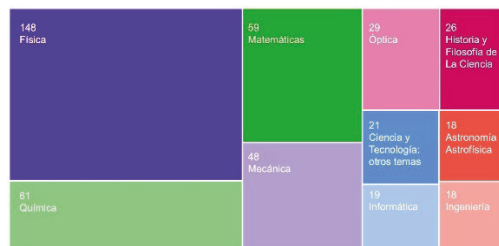
El modelo atómico de Bohr,^[2] con sus electrones en órbitas circulares, y la versión mejorada de Sommerfeld,^[3-4] con órbitas elípticas y excéntricas, han dado lugar a una amplia variedad de representaciones que, aún hoy, más de un siglo después, son universalmente reconocibles como iconos del átomo, la química, la física o la energía nuclear. Hasta tal punto, que ha sido calificado como «una de las imágenes clave en la historia de la química».^[5] No sólo son símbolos universales, sino que el artículo original de Bohr^[2] y sus dos secuelas,^[6-7] conocidos como *la trilogía*, tienen una presencia destacable en la bibliografía científica actual, como nos muestra la evolución del número de citas a lo largo de los años (Figura 1a). Un largo recorrido, al principio del cual (1910) Bohr explicaba a su hermano y confidente Harald que los primeros cuatro meses de escritura de su tesis «los desperdició especulando sobre un asunto absurdo de unos electrones estúpidos».^[8]

La práctica ausencia de citas a *la trilogía* durante décadas (1930-1970) no se puede explicar sólo por el frenazo a la investigación que debió suponer la Segunda Guerra Mundial. Sorprendentemente, después de tantos años de aparente olvido esos artículos vuelven a ser citados a partir de la década de 1980, con un crecimiento exponencial del número de citas en lo que va de este siglo. Se podría pensar que el interés reciente en los artículos de Bohr fuese debido a una mayor actividad de los historiadores de la ciencia, hipótesis que podemos evaluar analizando la distribución por temas de los artículos que han citado la primera parte de la trilogía en los últimos cinco años (Figura 1b). En ese gráfico se puede ver que en realidad las publicaciones que prestan más atención a Bohr están en los campos de física (33% de las citas), química (14%) y matemáticas (13%), mientras que los estudios historiográficos tienen un peso mucho menor.

El modelo de órbitas electrónicas quedó superado al postularse la ecuación de Schrödinger en 1926,^[10] de manera que un electrón no se mueve alrededor del núcleo en órbitas fijas, sino de forma indeterminada dentro de un volumen cuya forma –para cada nivel de energía– viene dada por los orbitales atómicos. Nos encontramos, pues, con la paradoja de que un



a



b

Figura 1. (a) Evolución temporal del número de citas de cada una de las tres partes de la *trilogía* de Bohr. (b) Distribución por temas de las citas de los últimos 5 años. Gráficos elaborados a partir de datos obtenidos de la *Web of Science*.

modelo atómico obsoleto resulta omnipresente como imagen de la ciencia e inspira investigación científica actual. Posiblemente porque, a pesar de todo, nos ofrece una representación visual simple de los conceptos de niveles electrónicos y números cuánticos que se conservan en el modelo mecánico-cuántico.

Si miramos los primeros gráficos publicados de las órbitas de Bohr y Sommerfeld (Figuras 2a y 2b, respectivamente), se ve que son mucho más simples que sus representaciones en manuales de química y en otros medios que se analizarán más abajo. Aquí aparece una segunda paradoja, pues ninguno de los dos científicos incluyó tales dibujos en sus publicaciones originales, y las imágenes de la Figura 2 provienen de la conferencia que dictó Bohr^[9] a la recepción de su premio Nobel de Física en 1922. Las flechas son importantes para Bohr y Sommerfeld porque se relacionan con el espectro de emisión del átomo de hidrógeno y validan su modelo atómico pero, una vez establecido éste, las flechas no son necesarias y las representaciones prescinden de ellas. Por otro lado, los electrones no se dibujan, estando implícitos en las órbitas y en los números cuánticos, aunque la versión idealizada para consumo público prefiere darles

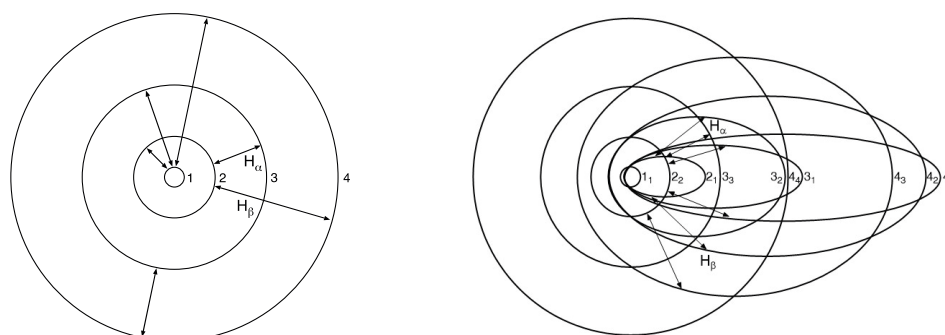


Figura 2. Modelos atómicos de Niels Bohr (a) y de Arnold Sommerfeld (b) tal como los presentó el primero en su discurso de recepción del premio Nobel de Física de 1922. Reproducido de Ref. [9]

corporeidad y los representa como pequeñas partículas en posiciones aleatorias de las órbitas. Los números cuánticos, uno en el caso de Bohr y dos en el de Sommerfeld, expresados de la forma 1_1 , 2_1 , 2_2 , etc., son sofisticaciones también innecesarias en una imagen popular y esencial del átomo, que prescinde también de ellos. Obsérvese que, por ejemplo, la órbita etiquetada con los números cuánticos 2_2 (Figura 2b) sería reemplazada en la teoría actual por los tres orbitales atómicos $2p$.

portadas de libros de química o física donde aparece más frecuentemente ese icono, si bien existen algunos ejemplos como los que se ven en la Figura 3a.^[11-13] Tampoco es inesperado encontrarlo en libros de historia o historia de la ciencia^[14-18] (Figura 3b), o sobre energía atómica y armamento nuclear^[19-24] (Figura 3c). En cambio, llama la atención la ubicuidad del modelo atómico en libros infantiles y de divulgación,^[25-30] ensayos sobre diversos temas,^[31-34] libros de auto-ayuda^[35] y novelas.^[8, 34, 36-37]

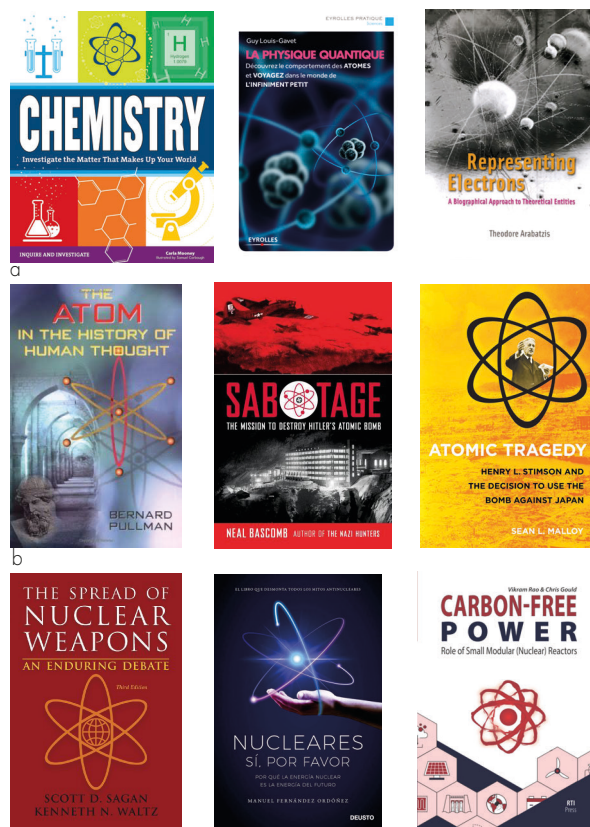


Figura 3. Portadas de algunos libros en que aparece el modelo atómico de Bohr-Sommerfeld: (a) de química y física, (b) de historia, y (c) sobre energía nuclear.

Uno de los escaparates que mejor expone el poder icónico y comunicativo del modelo atómico es el de las portadas de libros. Aunque la lista de libros con portada atómica que se citan a continuación está muy lejos de ser exhaustiva, pretende ser representativa y nos permitirá hacernos una idea más completa de las numerosas variantes del modelo de Bohr-Sommerfeld que circulan actualmente por el mundo. Curiosamente no es en

También encontramos ejemplos de revistas de ciencia-ficción: *Atomic Robo* (Figura 4a) inserta el modelo atómico en el interior de la letra "O" del título en cada uno de sus números publicados desde 2007, mientras que la revista *Amazing Story* lo sitúa sobre la mano de un hombre en la portada del número de agosto de 1947 (Figura 4b) y el cómic *Captain Atom* lo muestra de forma destacada en muchas de sus portadas y en el pecho del superhéroe (Figura 4c).

Sin embargo, no es común encontrar imágenes del átomo en este tipo de revistas, cuyas portadas están llenas de héroes y heroínas, humanos y sobrehumanos, humanoides, robots, dinosaurios, naves espaciales, planetas y paisajes lunares.

El modelo atómico parece ser especialmente adecuado para logotipos de muy variada estirpe. Entre los más abundantes están los de empresas u organismos relacionados con la energía nuclear, de los cuales se puede ver una pequeñísima muestra en la Figura 5a: la Comissão Nacional de Energia

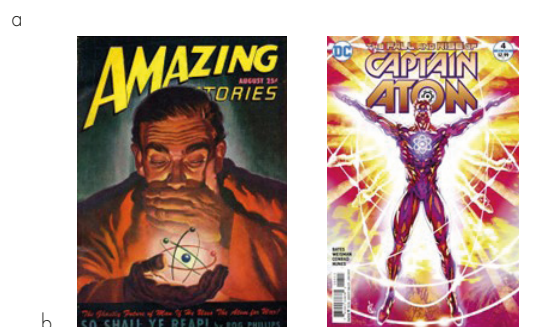


Figura 4. Portadas de revistas de ciencia ficción y cómics en que aparece el modelo atómico de Bohr-Sommerfeld: (a) *Atomic Robo*, (b) *Amazing Stories* de agosto de 1947, y (c) *Captain Atom* de junio de 2017.



Figura 5. Muestra de logotipos que contienen el modelo atómico de Bohr-Sommerfeld: (a) de organismos o empresas de energía nuclear, (b) de sociedades químicas nacionales o internacionales, y (c) de sociedades químicas de universidades.

Nuclear brasileña (CNEN), la empresa estatal China National Nuclear Corporation (CNNC) y la Nuclear Power Corporation of India Limited (NPCIL). La lista se podría alargar con corporaciones de Argentina, Rusia, Japón, Rumanía, Estados Unidos, Uzbekistán, Canadá, Arabia Saudita o Pakistán. Le siguen los logotipos de sociedades científicas o sociedades químicas de estudiantes universitarios. Entre las primeras (Figura 5b) tenemos la Sociedad Química de Zimbabue, la European Chemical Society (EuChemS) y el American Chemical Council, Inc. (ACC), seguidas de una lista de sociedades de países como Lesoto, Sudán, Arabia Saudita y Filipinas.

Aparte de las empresas energéticas ya comentadas, no parece fácil encontrar logotipos de empresas de otros sectores que incluyan el modelo atómico. En Internet podemos encontrar centenares de tales logotipos, pero son sólo diseños ofrecidos por empresas vendedoras de imágenes como Alamy, Shutterstock, VectorStock, Dreamstime, iStock, etc. Sin embargo, cualquier químico reconocería fácilmente el logotipo de Bruker, fabricante de instrumentos científicos de altas prestaciones. Otros tres logotipos que he podido localizar pertenecen a las siguientes empresas: (a) Science Equip, empresa de material de laboratorio de Victoria, Australia; (b) Sachs Chemical, distribuidora de productos químicos basada en Puerto Rico, y (c) Scientific Saudi, una plataforma en línea que ofrece noticias científicas.

Quizá no sorprenda la presencia de nuestro icono atómico en multitud de sellos de correo,^[38-42] una pequeña muestra de los cuales se listan en la Tabla 1. Vale la pena destacar tres aspectos que esa lista nos revela. En primer lugar, la amplia variedad de países que han emitido sellos con esa imagen: pequeños y grandes, y de cualquiera de los cinco continentes. En segundo lugar, la variedad de motivos por los que se han emitido, que incluyen la energía atómica, el descubrimiento del electrón, u homenajes a Demócrito, Ernest Rutherford y Niels Bohr (Figura 6), así como a otros científicos: Albert Einstein, Marie Curie, Wolfgang Pauli, Erwin Schrödinger y Lise Meitner. Por último, las fechas de emisión muestran cómo esa imagen del átomo mantiene su vigencia década tras década.

Recientemente se ha publicado una simulación del proceso de fisión de un núcleo de ^{236}U en los instantes clave de ruptura del *cuello nuclear* (Figura 7a).^[43] De ese artículo ha hecho una reseña la revista de divulgación *Muy Interesante*,^[44] en

Tabla 1. Ejemplos de sellos de correos con el modelo atómico de Bohr-Sommerfeld, ordenados por año de emisión.

País	Año	Motivo(s)
Estados Unidos	1957	50 aniversario del estado de Oklahoma
Yugoslavia	1961	Congreso de Electrónica Nuclear
Grecia	1961	Demócrito
Mónaco	1962	Agencia Internacional de la energía atómica (IAEA)
URSS	1962	Paz
Turquía	1963	Centro de Investigación Nuclear
Dinamarca	1963	Niels Bohr
Groenlandia	1963	Niels Bohr
Congo	1964	10 aniversario de la Lovanium University
Ghana	1964	Albert Einstein
Austria	1968	Lise Meitner
Rumanía	1971	Ernest Rutherford
Francia	1975	Centenario del metro
Gran Bretaña	1978	Planta nuclear, átomo de uranio
Aitutaki, Islas Cook	1980	25 aniversario del fallecimiento de Einstein
Grecia	1983	Demócrito
Suecia	1983	Niels Bohr
República Checa	1987	Energía Atómica
España	1994	Miguel A. Catalán, átomo y espectro del Mn
Bosnia y Herzegovina	1997	Centenario del descubrimiento del electrón
Gabón	2000	Descubrimientos: primer reactor nuclear
Ecuador	2001	Comisión Ecuatoriana de Energía Atómica
Nueva Zelanda	2008	Ernest Rutherford
Guinea-Bissau	2009	Ernest Rutherford
Macedonia	2011	Tabla periódica, reactor de laboratorio
Paraguay	2011	Marie Curie, Año Internacional de la Química (AIQ)
Costa de Marfil	2016	Ernest Rutherford



Figura 6. Sellos de correos dedicados a Demócrito (Grecia, 1961), Ernest Rutherford (Nueva Zelanda, 1999) y Niels Bohr (Suecia, 1982).

el que los dos átomos incipientes se representan mediante sus núcleos en el momento de separarse, rodeados por sus respectivos electrones en órbitas de Bohr-Sommerfeld (Figura 7b). La información visual se completa con la representación efectista de la abundante emisión de neutrones, rayos γ y rayos β que se produce en esa etapa del proceso de fisión.

Fijémonos ahora en algunos trazos comunes a la mayoría de las representaciones, así como en algunos detalles diferenciales. En primer lugar, la práctica totalidad de los átomos representados muestran órbitas electrónicas elípticas del modelo

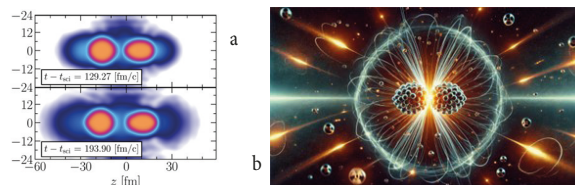


Figura 7. (a) Simulación de la distribución de densidad de neutrones (fm^{-3}) en un átomo de ^{236}U en dos instantes del proceso de fisión. Reproducido de Ref. [43], con permiso de I. Abdurrahman, M. Kalker, A. Bulgac, I. Stetcu. © 2024 de American Physical Society. (b) Representación mediante el modelo de Bohr-Sommerfeld usada en un artículo de divulgación de la revista *Muy Interesante*. Reproducido de Ref. [44]. Fuente: ChatGPT/Eugenio Fernández, reproducido con autorización.

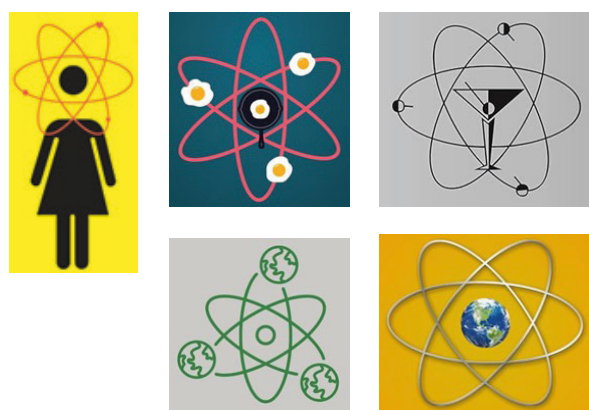


Figura 8. Detalle de algunos modelos atómicos en portadas de libros. De izq. a dcha. y de arriba a abajo: *Chemistry* [reproducido de Ref. [36]], *Chemistry for Breakfast* [reproducido de Ref. [27]], *Midcentury Cocktails* [reproducido de Ref. [32]], *El mundo como proyecto Manhattan* [reproducido de Ref. [18]], *Power to Save the World* [reproducido de Ref. [19]], *Sabotage* [reproducido de Ref. [16]].

de Sommerfeld, no las circulares de Bohr. Aquí hay que anotar que Bohr no había descartado que las órbitas pudieran ser elípticas, pero sin desarrollar la idea. En segundo lugar, observamos que en la gran mayoría de las representaciones las elipses son concéntricas, a diferencia de lo previsto en el modelo de Sommerfeld (ver Figura 1b). En muchos casos, se representan tan solo las elipses, que suelen ser suficientes, sin nada más, para sugerirnos el átomo. En otros casos los electrones se representan en las órbitas mediante pequeños círculos, que a menudo dejan una estela como los meteoritos (Figura 3c, centro). Por último, algunos hábiles diseñadores dan a los electrones una forma relacionada con el tema del libro, como un corazón (Figura 8a), unos huevos fritos (Figura 8b), unas aceitunas con palillo (Figura 8c), o unas bolas terráqueas (Figura 8d).

En cuanto al núcleo atómico, el diseño más estilizado prescinde de él, aunque más comúnmente se representa por una esfera (un círculo en las dos dimensiones del papel), ocasionalmente del mismo tamaño (Figura 3a) o menor (Figura 8d) que los electrones. Al igual que los electrones, el núcleo permite al dibujante incluir un objeto ajeno al átomo, como la cabeza de la protagonista (Figura 8a), una sartén friendo un huevo (Figura 8b), una copa de cóctel con una aceituna en su palillo (Figura 8c), una bola del mundo (Figuras 3c y 8e), una esvástica (Figura 8f), o el protagonista del libro de medio cuerpo (Figura 3b).

El lector curioso podrá encontrar nuestro icono en otros soportes con tan sólo darse un paseo por el ciberespacio, empezando por las portadas de revistas científicas o de divulgación científica como *Nature*, *Science*, *Scientific American*, *NewScientist*, *Popular Science*, *Chemical and Engineering News*, *Science et Vie*, o *Chemistry World*. Un caso que merece mención aparte es el del reportaje publicado en la revista *Life* del 16 de mayo de 1949, titulado "El átomo. Un manual para profanos: de qué está hecho el mundo", en extensas veinte páginas (publicidad incluida), y acompañado de excelentes fotografías de experimentos químicos hechas por Fritz Goro,

fotógrafo al que me he referido anteriormente,^[45] y de espectaculares ilustraciones sobre fondo negro de las órbitas (azules) y los núcleos (protones rojos, neutrones verdes) de los átomos de hidrógeno, helio, litio, berilio y uranio, este último a toda página en gran formato (26x36 cm). Encontrará también muchos otros artilugios que lucen ese icono en multitud de ciber tiendas: camisetas, corbatas, pines de solapa, toallas de manos, mascarillas, tazones, esculturas, carátulas de discos, monedas, billetes de banco, o un capítulo de *Los Simpson* titulado "El aburrido mundo de Niels Bohr".

Conclusión

El símbolo que representa el modelo orbital del átomo es un icono fácilmente reconocible, de carácter universal y cuyo uso se ha extendido por más de un siglo. Es, además, una imagen polisémica que puede simbolizar la química, la física, la ciencia en general, o la energía atómica. En este artículo se ha explorado a vista de pájaro la ubicuidad del modelo de Bohr-Sommerfeld, sin intención de ser exhaustivos, poniendo especial atención a las portadas de libros y revistas, logotipos comerciales e institucionales y sellos de correo.

Agradecimientos

El autor agradece al Prof. Daniel Rabinovich su contribución con sugerencias y material gráfico y bibliográfico a la sección dedicada a los sellos de correos.

Bibliografía

- [1] T. Smollett, *Historia y aventuras de un átomo*, El Paseo, Sevilla, **2024**.
- [2] N. Bohr, *Phil. Mag. Ser. 6* **1913**, 23, 1-24.
- [3] A. Sommerfeld, *Sitzungsberichte math-physik. K. B. Akad. Wissenschaften München* **1915**, 459-500.
- [4] A. Sommerfeld, *Eur. Phys. J. H* **2014**, 39, 157-177.
- [5] J. D. Barrow, *Cosmic Imagery*, The Bodley Head, Londres, **2008**.
- [6] N. Bohr, *Phil. Mag. Ser. 6* **1913**, 23, 476-502.
- [7] N. Bohr, *Phil. Mag. Ser. 6* **1913**, 26, 857-875.
- [8] F. Aaserud, J. L. Heilbron, *Love, Literature and the Quantum Atom*, Oxford University Press, Oxford, **2013**.
- [9] N. Bohr, in *Nobel Lectures, Physics 1922-1941*, Elsevier, Amsterdam, **1965**.
- [10] E. Schrödinger, *Phys. Rev.* **1926**, 28, 1049-1070.
- [11] C. Mooney, *Chemistry. Investigate the Matter That Makes Up Your World*, Nomad Press, Norwich, VT, **2016**.
- [12] G. Louis-Gavet, *La physique quantique*, Eyrolles, París, **2011**.
- [13] T. Arabatzis, *Representing Electrons. A Biographical Approach to Theoretical Entities*, University of Chicago Press, Chicago, **2006**.
- [14] P. Rousseau, *Historia del átomo*, Editorial Colenda, Madrid, **1958**.
- [15] B. Pullman, *The Atom in the History of Human Thought*, Oxford University Press, Oxford, **1998**.
- [16] N. Bascomb, *Sabotage. The Mission to Destroy Hitler's Atomic Bomb*, Scholastic Focus, New York, **2021**.
- [17] S. L. Malloy, *Atomic Tragedy. Henry L. Stimson and the Decision to Use the Bomb Against Japan*, Cornell University Press, Ithaca, NY, **2008**.
- [18] J.-M. Royer, *El mundo como proyecto Manhattan*, Pepitas de Calabaza y El Salmón, Logroño, **2022**.
- [19] G. Cravens, *Power to Save the World. The Truth About Nuclear Energy*, Knopf, New York, **2007**.
- [20] M. Fernández Ordóñez, *Nucleares sí, por favor*, Deusto, Barcelona, **2023**.
- [21] V. Rao, C. Gould, *Carbon-Free Power, Role of Small Modular (Nuclear) Reactors*, RTI Press, Research Triangle Park, NC, **2022**.
- [22] C. Tucker, W. Market, *How to Drive a Nuclear Reactor*, Springer, **2020**.

- [23] S. D. Sagan, K. N. Waltz, *The Spread of Nuclear Weapons, and Enduring Debate*, 3^o ed., W. W. Norton, Nueva York, **2012**.
- [24] J. C. Lee, *Nuclear Reactor Physics and Engineering*, Wiley, Nueva York, **2020**.
- [25] S. Writes, *Intro to Chemistry. Coloring Workbook*, CreateSpace Independent Publishing, **2016**.
- [26] M. Carter, *Entrevista al Sr. Átomo*, Círculo Rojo, Roquetas de Mar, **2019**.
- [27] M. T. Nguyen-Kim, *Chemistry for Breakfast. The Amazing Science of Everyday Life*, Greystone Books, Vancouver, **2022**.
- [28] P. Zarshenas, *De los átomos a las ondas. Un viaje a través de la teoría atómica. De la era de Demócrito a Schrödinger*, Eds. Nuestro Conocimiento, **2024**.
- [29] Big-Van, *Cómo explicar física cuántica con un gato zombi*, Alfaguara, Madrid, **2016**.
- [30] I. Asimov, *Atom. Journey Across the Subatomic Cosmos*, Penguin, Londres, **1992**.
- [31] R. F. Tyson, *Nuclear Verdicts. Defending Justice for All*, Law Dog Publishing, La Jolla, **2020**.
- [32] C. Tichi, *Midcentury Cocktails. History, Lore, and Recipes from America's Atomic Age*, New York University Press, Nueva York, **2022**.
- [33] S. Casey, *The Atomic Chef: And Other True Tales of Design, Technology, and Human Error*, Aegean Pub. Co., Santa Barbara, CA, **2006**.
- [34] C. H. McElroy, *Atomic Family*, Blair, Durham, NC, **2023**.
- [35] L. Conti, *Atomic Steps. From a Negative Mindset to a Positive Mindset through a 7 Day Process for Lifelong Benefits*, Norden Pacific Press, Estocolmo, **2024**.
- [36] W. Wang, *Chemistry*, Knopf, Nueva York, **2017**.
- [37] S. Niemeier, *Atomic Peril. A Nuclear Forensics Thriller*, Quantum Publishing, Londres, **2023**.
- [38] D. Rabinovich, *Rev. Quím.* **2007**, 21, 49-53.
- [39] M. A. Morgan, *Philatelia Chim. Phys.* **2006**, 28, 35-43.
- [40] D. Rabinovich, *Jaén Filatélico* **2011**, 19, 27-30.
- [41] D. Rabinovich, *Jaén Filatélico* **2012**, 20, 23-25.
- [42] Z. Rappoport, *Acc. Chem. Res.* **1992**, 25, 24-31.
- [43] I. Abdurrahman, M. Kafker, A. Bulgac, I. Stetcu, *Phys. Rev. Lett.* **2024**, 132, 242501.
- [44] E. M. Fernández-Aguilar, "Por fin sabemos qué sucede cuando un átomo se parte en dos: desvelan el momento exacto de la fisión nuclear": https://www.muyinteresante.com/ciencia/que-sucede-atomo-parte-en-dos.html?utm_term=Autofeed&utm_medium=Social&utm_source=Twitter#Echobox=1730743401.
- [45] S. Alvarez, *An. Quím.* **2018**, 114, 257-267.



Santiago Álvarez

Catedrático Emérito de Química Inorgánica. Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Secció de Química Inorgànica; Institut de Química Teòrica i Computacional UB

C-e: santiago.alvarez@qi.ub.edu
ORCID: 0000-0002-4618-4189

¿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





XL Bienal RSEÖ

30.06-03.07 2025

Bilbao Exhibition Centre | BEC

BILBAO



Noticias de la RSEQ

PREMIOS RSEQ

Entrega de Premios y Distinciones de la RSEQ 2024

El pasado 29 de noviembre, el Paraninfo de la Universidad de Extremadura (Badajoz) acogió la ceremonia de entrega de los Premios y Distinciones de la RSEQ correspondientes a la edición de 2024.

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". Asimismo, se reconoció a los miembros con cuarenta y cinco años de servicio a la Sociedad y se hizo entrega de las distinciones "Chemistry Europe Fellows Class of 2022-2023".

La ceremonia de entrega de premios vino precedida de la intervención del Prof. Rubén Martín Romo del Instituto Catalán de Investigación Química y Medalla de la RSEQ 2024 que impartió el jueves 28 de noviembre una conferencia divulgativa con el título de "Nuevas reacciones catalizadas por níquel".

En esta edición, la mesa presidencial estuvo conformada por D. Pedro M. Fernández Salguero, Rector de la Universidad de Extremadura, que actuó como presidente de la mesa; D. Ignacio Gragera Barrera, Alcalde de Badajoz; D. Antonio M. Echavarren Pablos, Presidente de la RSEQ; D. Pedro J. Casero Linares, decano de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Extremadura y D. Javier de Francisco Morcillo, Secretario General de Ciencia, Tecnología e Innovación de la Junta de Extremadura.

D. Pedro M. Fernández Salguero abrió la sesión y presentó a los miembros de la mesa. A continuación, tomó la palabra D. Javier de Francisco Morcillo, quien agradeció que se haya elegido Extremadura y su Universidad para la celebración de estos premios, a la vez que reconoció la importancia que a lo largo de la historia han tenido las sociedades como la RSEQ en la puesta en valor de la ciencia,



Mesa Presidencial. De izquierda a derecha: D. Javier de Francisco Morcillo (Secretario General de Ciencia, Tecnología e Innovación de la Junta de Extremadura); D. Antonio M. Echavarren (Presidente de la RSEQ); D. Pedro M. Fernández Salguero (Rector de la UEx); D. Ignacio Gragera Barrera (Alcalde de Badajoz); y D. Pedro J. Casero Linares (Decano de la Facultad de Ciencias de la UEx).



Reconocimiento a los socios con 45 años en la RSEQ. D. José María Gómez de Salazar y D. Nazario Martín León, en representación del resto de los socios.



Premios reconocimiento a carreras investigadoras distinguidas. Izquierda, Dña. Clara Viñas i Teixidor y derecha, Dña. Mercedes Amat Tusón.



Chemistry Europe Fellows Class 2022-2023. Concepción Gimeno Floría y Miguel Ángel Sierra reciben sus reconocimientos.



Premio a las tareas educativas y divulgativas de enseñanza preuniversitaria a Dña. Begoña Rodríguez Rodríguez.

«poniendo en relieve que la ciencia en general era el motor que para que la sociedad avanzara». Posteriormente, D. Pedro J. Casero Linares, agradeció al equipo organizador local por el esfuerzo para que la estancia de los miembros de la RSEQ fuera la inmejorable. Por su parte, el presidente de la RSEQ, D. Antonio M. Echavarren, resaltó que somos «una Sociedad que es más que centenaria, cumplimos 121 años [...] de la mano con nuestros compañeros físicos». Durante su discurso, hizo un repaso por la historia de los premios y destacó que, aunque la investigación es un trabajo en equipo, estos premios reconocen «la labor de mujeres y de hombres que se han significado en sus áreas respectivas por su contribución a la excelencia, [...] nada podría llegar a buen fin sin líderes». A continuación, D. Ignacio Gragera Barrera agradeció que la ciudad de Badajoz se haya «convertido durante estos dos días en el referente de la química». «Estos premios nos visibilizan, [...] Extremadura es una gran tierra [...] y Badajoz no le anda a la zaga». Añadió que «el hecho de que estos premios nacionales se den aquí es una muestra de esa ambición que tienen los químicos de esta ciudad y de esta universidad por acoger y ser sede de grandes eventos, para mí este lo es». Para concluir, el Rector resaltó que «no debemos desvalorizar [...] la investigación fundamental, la investigación básica, la generación del conocimiento; [...] si no se genera conocimiento nada se transfiere, [...] hay que hacer ambas cosas». Asimismo, agregó que «las sociedades científicas cumplen un papel esencial en la ciencia, aparte de dar visibilidad tienen un «papel muy importante en promover la cultura científica, la cultura investigadora entre la gente joven. Es fundamental que a través de las sociedades científicas se generen vocaciones que es básicamente promover que los jóvenes se dediquen a la investigación».

De la presentación de los premiados se encargó la Secretaria General de la RSEQ, Dña. Sonsoles Martín Santamaría, que fue nombrando a cada uno de los galardonados.

La gala comenzó con el Reconocimiento a los socios con 45 años de servicios a la RSEQ que contó con la presencia de D. Nazario Martín León y D. José María Gómez de Salazar, en representación de todos los miembros de la Sociedad que recibían este reconocimiento. El resto de los miembros reconocidos este 2024 fueron: Dña. María de los Ángeles Ferro García, D. Juan Antonio Fernández Martín, D. José Antonio Fidalgo Sánchez, D. Juan Forniés Gracia, D. Pascual Lahuerta Peña, D. Jorge Martín Juárez, D. José Miñones Trillo, Dña. M. Soledad Pino González, D. Ángel Terrón Homar y D. David Tudela Moreno.

«La química, la sociedad nos tiene un poco denostados» apuntó Gómez de Salazar en su intervención y poniendo en relieve el valor de la química, señaló: «hablando de la tecnología, [...] si no hubiera sido por el desarrollo de la química esto [el móvil] no existiría». Por su parte, Nazario Martín expuso los «tres puntos de inflexión» de la RSEQ y citó el centenario en 2003 organizado con la «sociedad hermana de Física» con la participación de seis Premios Nobel de Química y de Física; el año internacional de la Química en 2011 donde quedó de manifiesto que «la investigación [...] en el mundo era imposible sin la mujer científica»; y la revista Anales de Química «que en el año 2000 [...] se integra en las revistas europeas». «Es un privilegio y un orgullo ser miembro de esta Sociedad que ha hecho estas cosas tan importantes [...] y vivir y, sobre todo, participar en estos puntos de inflexión». Antes de concluir recordó las efemérides del próximo año 2025, el centenario de la ecuación de Schrödinger y el bicentenario del descubrimiento de la molécula de Benceno por Faraday.



Premios a la Excelencia Investigadora. Arriba – izquierda: D. Emilio Manuel Pérez Álvarez, premiado por D. José María Carracedo (BASF Española); derecha: D. Jesús Alberto Escarpa Miguel acompañado de D. Juan Antonio Vega (J&J Innovative Medicine). Abajo – izquierda: D. Guillermo Mínguez Espallargas con D. Ignacio López Serrano (CEPSA Química); derecha: Dña. Susana Campuzano Ruiz y Dña. Teresa de Haro (UCB Biopharma).

A continuación, se entregaron las distinciones a los Chemistry Europe Fellows Class of 2022-2023 a los investigadores Dña. Concepción Gimeno Floría del ISQCH (CSIC-Universidad de Zaragoza), quien apuntó que «este nombramiento [...] es la suma del esfuerzo colectivo» y D. Miguel Ángel Sierra de la Universidad Complutense de Madrid que señaló «vi en Chemistry Europe una idea brillante, unir a las sociedades químicas europeas en un proyecto común. Fue un hito en nuestra historia y un auténtico punto de inflexión para fortalecer la colaboración entre países».

Seguidamente se dio paso a la entrega del Premio a las tareas educativas y divulgativas de enseñanza preuniversitaria a Dña. Begoña Rodríguez Rodríguez del I.E.S. Calderón de la Barca (Madrid), quien señaló que «debemos fomentar las vocaciones en química e ingeniería química y, en general, en todas las disciplinas STEM» y compartió con los presentes una reflexión de su experiencia como profesora «es necesario mejorar la motivación y el aprendizaje en la enseñanza de la ciencia y la ingeniería». Debemos motivar a los chicos y chicas y dejarlos que «aprendan con tecnologías modernas, que interactúen con la ciencia y la tecnología, que vean la química que está en todo lo que nos rodea [...] de esta forma sentirán pasión por estas áreas y querrán abordarlas en estudios posteriores».

La ceremonia continuó con los Premios reconocimiento a carreras investigadoras distinguidas, que recayeron en Dña.



Medalla de la RSEQ a D. Rubén Martín Romo, entregada por D. Antonio M. Echavarren.

Mercedes Amat Tusón de la Universidad de Barcelona, quien apuntó que «este premio es, en parte, de todos aquellos que me acompañaron. [...] Dedicarme a una profesión que resulta estimulante es un privilegio que no está al alcance de la mayoría» y añadió «me siento una privilegiada por haber con-



Los premiados, los Chemistry Europe Fellows Class y los socios de 45 años acompañados por los representantes de las empresas colaboradoras, el Secretario General de Ciencia, Tecnología e Innovación de la Junta de Extremadura, el Decano de la Facultad de Ciencias de la UEx, el Presidente y la Secretaria General de la RSEQ, y la Presidenta y el Secretario de la Sección Territorial de Extremadura de la RSEQ.

vertido mi profesión en un hobby». Por su parte, Dña. Clara Viñas i Teixidor del Instituto de Ciencia de los Materiales de Barcelona, CSIC que también obtuvo esta distinción agradeció a todas las instituciones que han hecho posible el desarrollo de investigaciones de gran impacto. «La investigación de hoy es el conocimiento de mañana. [...] El esfuerzo constante y la colaboración siempre rinden frutos».

Los Premios a la Excelencia Investigadora fueron entregados por los representantes de las empresas colaboradoras. Dña. Teresa de Haro de UCB Biopharma intervino telemáticamente para entregar el galardón a la Dra. Susana Campuzano Ruiz de la Universidad Complutense de Madrid. En nombre de Johnson & Johnson Innovative Medicine, D. Juan Antonio Vega entregó el premio a D. Jesús Alberto Escarpa Miguel de la Universidad de Alcalá. D. Ignacio López Serrano de CEPSA Química hizo lo propio con D. Guillermo Mínguez Espallargas de la Universidad de Valencia. Mientras que, D. Emilio Manuel Pérez Álvarez de IMDEA Nanociencia recogió su galardón de manos de D. José M. Carracedo de BASF Española.

Durante su intervención, Dña. Susana Campuzano agradeció a todos sus colaboradores y resaltó el significado del reconocimiento recibido: «nos embarga una alegría única para seguir cuidando [...] que la química esté siempre donde debe estar». Por su parte, D. Jesús Alberto Escarpa destacó el honor de recibir este premio, agradeció a los maestros y

profesores que le han guiado y, haciendo suyas unas palabras de Margarita Salas, indicó «no soy brillante, soy un trabajador incansable». D. Guillermo Mínguez, a su vez agradeció a quienes le introdujeron en el mundo de la química y dedicó el premio a los afectados por la DANA en Valencia. Por último, D. Emilio Manuel Pérez agradeció a la RSEQ «por reunirnos, por ser una Sociedad real, hacer que interactuemos y nos conozcamos. [...] Da gusto formar parte de algo más grande que uno mismo».

En esta edición 2024 la Medalla de la RSEQ recayó en D. Rubén Martín Romo del Instituto Catalán de Investigación Química. D. Antonio Echavarren hizo un repaso a la dilatada trayectoria del premiado e hizo entrega del premio, en nombre de Bruker Española. Durante su intervención, D. Rubén Martín señaló que «es un inmenso placer, un honor y una sorpresa que no esperaba en absoluto», recordó que «este país confió en mí a la edad de 31 años para iniciar este periplo investigador» y apuntó que «el éxito de cualquier investigador está ineludiblemente ligado a su grupo de trabajo y tengo el enorme privilegio de contar con un grupo de personas que comparten mis mismas aspiraciones y que también comparten riesgos».

La sesión finalizó con la conferencia "Next LAB: la paradoja de progresar volviendo a los orígenes" impartida por Ignacio D. López Serrano, director de I+D de Cepsa Química.

Entrega de los Premios RSEQ a jóvenes investigadores 2024

La entrega de los Premios a Jóvenes Investigadores Químicos de la RSEQ 2024 se celebró el pasado 18 de noviembre en Ciudad Real, durante el XX Simposio de Jóvenes Investigadores Químicos de la Real Sociedad Española de Química. En la modalidad **Líderes de Grupo** fueron premiados la Dra. Alicia Casitas Montero (Universidad Philipps de Marburgo), la Dra. María Cuartero Botía (Universidad Católica San Antonio de Murcia / Real Instituto de Tecnología (KTH)), el Dr. Sergio García Segura (Universidad Estatal de Arizona) y la Dra. María Moros Caballero (Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón, UNIZAR-CSIC). Asimismo, en la modalidad **Investigador Postdoctoral** fueron galardonados la Dra. Celia Castillo Blas (Universidad de Cambridge), la Dra. Coralie Anne Marie Jehanno (Polykey Polymers SL), el Dr. Mauro Mato Gómez (Instituto Max Planck del Carbono) y el Dr. Andreu Tortajada Navarro (Universidad de Berna).

La mesa presidencial durante la entrega de premios estuvo formada por Antonio Manuel Rodríguez García, presidente del comité organizador de Ciudad Real; María Antonia Herrero Chamorro, presidenta de la Sección Territorial de Castilla-La Mancha de la RSEQ; Carla Casadevall Serrano, presidenta del Grupo de Jóvenes Investigadores Químicos (JIQ-RSEQ); Antonio M. Echarvarren, presidente de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ); José Antonio Castro Osma, director general de Universi-



Mesa presidencial

dades, Investigación e Innovación de Castilla-La Mancha; y Manuel Rodrigo, decano de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de la Universidad de Castilla-La Mancha. El evento contó con la presencia de Pablo Recacha Burgos, representante de Merck, empresa patrocinadora de los premios en la modalidad de líder de grupo.



Los premiados en la modalidad 'Investigador Postdoctoral', acompañados de izquierda a derecha por Manuel Rodrigo, Antonio M. Echarvarren, Carla Casadevall Serrano, José Antonio Castro Osma y María Antonia Herrero Chamorro.



Los premiados en la modalidad 'Líder Investigador', acompañados de izquierda a derecha por Manuel Rodrigo, Antonio M. Echavarren, Carla Casadevall Serrano, José Antonio Castro Osma, Pablo Recacha Burgos y María Antonia Herrero Chamorro.

Como es tradición, la ceremonia de entrega coincidió con el XX Simposio de Jóvenes Investigadores Químicos (JIQ), un evento anual destacado para jóvenes científicos de todas las disciplinas de la química. En esta edición, participaron más de 150

asistentes, quienes presenciaron 38 comunicaciones orales, 35 presentaciones flash y 46 pósteres. Además, los galardonados impartieron 7 de las 12 conferencias plenarios invitadas, enriqueciendo el programa con sus destacadas contribuciones.

Celebración anual de los Premios de Investigación de Lilly 2024

El pasado 15 de noviembre tuvo lugar la celebración anual de los Premios de Investigación de Lilly en su sede de Alcobendas (Madrid). En la ceremonia participaron los galardonados con los "Premios Lilly-RSEQ de investigación" a estudiantes de doctorado y el "Premio Lilly-RSEQ" "Early Career Researcher" concedidos por Lilly y la Real Sociedad Española de Química (RSEQ).

En esta edición de 2024, los doctorandos Marcos Vilela del CIQUS / Universidad Santiago de Compostela, Andrea Palone de la Universitat de Girona y Beatriz Arévalo de la Universidad Complutense de Madrid fueron reconocidos en la categoría de "Premios Lilly-RSEQ de investigación". Por su parte, el premio "Premio Lilly-RSEQ" "Early Career Researcher" recayó en Marc García-Borràs de la Universitat de Girona. La entrega de estos premios se realizó durante la XXIX Reunión Bienal del Grupo Especializado de Química Orgánica de la RSEQ el pasado mes de junio.

Durante el acto, los premiados impartieron charlas sobre el trabajo realizado. Para concluir, tuvo lugar una conferencia a cargo del Prof. Bill Morandi del ETH Zurich (Suiza). La Dra. María José Lallena, directora de I+D de Lilly, cerró la



De izquierda a derecha: María José Lallena Jimeno (Lilly), Beatriz Arévalo (UCM), Andrea Palone (UdG), Marcos Vilela (USC), Marc García-Borràs (UdG), Albert Cabré (Lilly) y Antonio M. Echavarren (Presidente de la RSEQ).

jornada científica. La RSEQ estuvo representada por su Presidente, el Dr. Antonio M. Echavarren y la Secretaria General, la Dra. Sonsoles Martín Santamaría.

Entrega del Premio 'Moles-Weizmann' 2023 al Prof. Itamar Willner

El Dr. Itamar Willner, de la Universidad Hebrea de Jerusalén recibió el premio Moles-Weizmann 2023 de la Real Sociedad Española de Química, el pasado 4 de septiembre de 2024 en el CIC biomaGUNE. Durante la ceremonia impartió la conferencia titulada *"Dynamic Nucleic Acid Nanostructures and Systems: From Fundamental Concepts to Applications"*.

El Premio Moles-Weizmann, es fruto de la colaboración entre Sociedad Química de Israel (ICS) y la Real Sociedad Española de Química (RSEQ). Fue creado para reconocer la investigación científica con proyección internacional realizada en Israel y España en cualquiera de sus áreas.



Ceremonia de entrega del premio Moles-Weizmann 2023 al Dr. Itamar Willner.

Entrega del Premio 'Elhuyar-Goldschmidt' 2024 al Prof. Wolfgang J. Parak

La ceremonia se entrega del premio Elhuyar-Goldschmidt 2024 al Prof. Wolfgang J. Parak, de la Universidad de Hamburgo (Alemania), tuvo lugar el pasado 30 de octubre de 2024 en el CIC biomaGUNE. Durante la ceremonia el Prof Parak impartió la conferencia titulada *"Interfacing colloidal nanoparticles with biological matter"*. Así mismo, durante el mes de diciembre dará una segunda conferencia en el

Instituto de Ciencia Molecular de la Universidad de Valencia.

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.



Ceremonia de entrega del premio Elhuyar-Goldschmidt 2024 al Prof. Wolfgang J. Parak.

NOTICIAS GRUPOS ESPECIALIZADOS

Celebración de la XLII Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica (GEQO)

Durante los pasados días 11 al 13 de septiembre se celebró en Sevilla la XLII Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica. La organización del evento corrió a cargo de Salvador Conejero, Juan Cámpora, Agustín Galindo, M Carmen Nicasio, Pilar Palma, Antonio Pizzano, Pablo Ríos, Orestes Rivada, Amor Rodríguez y Andrés Suárez del Instituto de Investigaciones Químicas (Universidad de Sevilla-CSIC) y de la Universidad de Sevilla. Ellos, junto con un grupo de jóvenes voluntarios de las dos instituciones, proporcionaron el marco idóneo para disfrutar de tres días de intenso intercambio científico. Las conferencias plenarios estuvieron a cargo de Louise Berben (UC-Davis), Paul Chirik (Princeton Univ.), Marinella Mazzanti (EPFL, Laussane), Martin Oestreich (TU Berlin) y Feliu Maseras (ICIQ). Se impartieron además diez conferencias invitadas y diecisiete comunicaciones orales. Las sesiones de poster contaron con 131 comunicaciones en dos sesiones diferentes.

En la reunión se hizo entrega de los Premios GEQO 2024, en sus diferentes categorías, a:

Dr. Feliu Maseras, Medalla Rafael Usón, por su excepcional contribución al desarrollo y aplicaciones de la química computacional al campo de la química organometálica y la catálisis homogénea que ha supuesto un impulso poderoso a la investigación de los grupos experimentales y a la comprensión profunda de los mecanismos de reacción.



Asistentes al XLII Reunión del GEQO.

Dr. Jesús Campos, Premio GEQO a la Excelencia Investigadora, por sus excelentes y novedosas contribuciones a la química organometálica fundamental, en particular a las interacciones cooperativas entre elementos de transición y sus aplicaciones a la activación de moléculas pequeñas.

Dr. Rafael Gramage Doria, Premio GEQO Jóvenes Investigadores, por su labor investigadora independiente y su liderazgo en aspectos de química organometálica como la catálisis metálica selectiva dirigida a la mejora de la sostenibilidad de los procesos químicos de síntesis.



De izquierda a derecha: Feliu Maseras, Medalla Rafael Usón; Jesús Campos, premio a la Excelencia Investigadora; y Rafael Gramage Doria, premio Jóvenes Investigadores.

XX Simposio de Jóvenes investigadores Químicos (JIQ)

Del 18 al 21 del mes de noviembre, se celebró el XX Simposio de Jóvenes investigadores Químicos (JIQ) de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ), cuya sede fue el salón de actos "Alfredo Pérez Rubalcaba" de la Biblioteca General de La Universidad de Castilla-La Mancha, ubicado en el Campus de Ciudad Real. El Simposio fue organizado por investigadores de la Universidad de Castilla-La Mancha, además de miembros de la sección Territorial de CLM de la RSEQ, antiguos dirigentes y miembros del grupo de Jóvenes Investigadores Químicos (JIQ) y profesores de la UCLM, encabezados por Antonio Manuel Rodríguez García, profesor titular de la facultad de Farmacia de la UCLM, como presidente del comité organizador. El número de participantes ascendió a 155, provenientes de diversas universidades españolas e incluso de algunos centros de investigación y universidades extranjeras. Entre los Conferenciantes Plenarios tuvimos el placer de escuchar a los Premiados con los Premios Jóvenes Investigadores 2024 tanto en la modalidad investigador postdoctoral, como en la modalidad líder de grupo: Dra. Alicia Casitas Montero (Universidad Philipps de Marburgo), Dr. Sergio García Segura (Universidad del Estado de Arizona), Dra. María Moros Caballero (Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón, UNIZAR-CSIC), como premios líder de grupo, y Dra. Celia Castillo Blas (Universidad de Cambridge), Dra. Coralie Anne Marie Jehanno (Polykey Polymers SL.), Dr. Mauro Mato Gómez (Instituto Max-Planck del Carbono), Dr. Andreu Tortajada Navarro (Universidad de Berna). También impartió una charla plenaria invitada la Prof. Silvia Osuna (Universidad de Girona, ICREA) como "Chemistry Europe Lecturer". Adicionalmente se impartieron otras 4 charlas plenarias invitadas realizadas por destacados científicos nacionales, además de los representantes de Merck, patrocinador de nuestro simposio y de los Premios modalidad Líder de Grupo. Además, de entre los más de 150 investigadores jóvenes asistentes, 38 participaron con comunicaciones orales, 35 con comunicaciones tipo flash y 46 con poster.

En nombre del grupo de Jóvenes Investigadores Químicos, y en el mío propio, quisiera agradecer al equipo organizador de Ciudad Real, especialmente a Antonio Manuel Rodríguez García, la UCLM y la Sección Territorial Castilla-La Mancha de la RSEQ, especialmente a su presidenta Marian Herrero, además del patrocinio y la colaboración de diversas entidades públicas y empresas privadas, sin cuya ayuda no hubiera sido posible la celebración de este evento: Merck, Turismo del Ayuntamiento de



Silvia Osuna recibiendo el premio *Chemistry Europe Lecture* acompañada de Antonio M. Echavarren, Carla Casadevall Serrano y Pilar Calleja.



Asistentes al XX Simposio de Jóvenes investigadores Químicos (JIQ).

Ciudad Real, la Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha, *Chemistry Europe*, JIQ-RSEQ, Bodega la reconquista y Kaertor Foundation. Por otro lado, me gustaría mostrar nuestro agradecimiento al Comité Científico y el Comité de organización Local por todo el apoyo brindado y por su contribución al éxito del congreso. El compromiso y la dedicación de este comité, incluyendo profesores, personal de administración y servicios, y estudiantes voluntarios, ha sido fundamental para crear un ambiente acogedor y profesional que ha facilitado el intercambio científico y el *networking* entre los participantes. Su trabajo y dedicación han sido claves para mantener el alto nivel que caracteriza a este simposio en su vigésima edición.

Carla Casadevall Serrano
Presidenta del JIQ de la RSEQ

Entrega de premios a las mejores Tesis Doctorales presentadas por miembros del GENAM en 2023

El pasado 18 de octubre se celebró el acto de entrega de los Premios a las mejores Tesis Doctorales defendidas por miembros del grupo en el año 2023, en el Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA-Nanociencia).

La ceremonia comenzó con la bienvenida por parte del director de IMDEA Nanociencia, Rodolfo Miranda Soriano, a la que siguió la presentación del acto por parte de la presidenta del GENAM, M^a Ángeles Herranz Astudillo, y entrega de galardones a los Drs. Manuel Ángel Martínez Orosa (Universidad Complutense de Madrid), primer accésit por su trabajo "Polimerización supramolecular de PBLs N-cicladadas. Relación estructura – propiedad" dirigido por Luis Sánchez Martín, Sergio Gámez Valenzuela (Universidad de Málaga), segundo accésit por su trabajo "Towards the rational design and characterization of organic semiconductors by a combined experimental and theoretical approach: from small molecules to polymers", dirigido por M^a Carmen Ruiz Delgado y Rocío Ponce Ortiz, y Paz Sebastián Luna (ICMol - Universitat de València), primer premio por su trabajo "Low toxicity metal halide semiconductors for optoelectronics

and thermoelectrics", dirigido por Henk Bolink y Francisco Palazón.

A continuación, en una jornada científica de medio día, los asistentes pudieron disfrutar de dos conferencias plenarios y comunicaciones orales por parte de los premiados. Los jóvenes investigadores de reconocido prestigio internacional Felipe Gándara (ICMM-CSIC) y Manuela Garnica (IMDEA-Nanociencia), expusieron los avances recientes en metal-organic frameworks (MOF) multimetálicos y la caracterización de materiales 2D mediante microscopía de sonda de barrido (SPM), respectivamente.

La reunión concluyó con la celebración de un cóctel-almuerzo que ofreció un marco informal para la interacción entre los asistentes, y la posterior visita guiada por el Director Científico Adjunto de IMDEA-Nanociencia, Emilio M. Pérez Álvarez, a las instalaciones del instituto IMDEA-Nanociencia.

Grupo Especializado de Nanociencia
y Materiales Moleculares
de las Reales Sociedades Españolas de Física y Química



Los galardonados con los Premios a las mejores Tesis Doctorales defendidas por miembros del GENAM en el año 2023 junto a representantes de la Junta de Gobierno del GENAM.



Los galardonados con los Premios a las mejores Tesis Doctorales defendidas por miembros del GENAM en el año 2023 junto a representantes de la Junta de Gobierno del GENAM.

XII Escuela de Cristalografía de Rayos X en Monocristal

La duodécima edición de la Escuela de Cristalografía de Rayos X en Monocristal tuvo lugar del 11 al 15 de noviembre de 2024 en la Residencia Universitaria de Jaca, Huesca. La Escuela, dirigida por los doctores Fernando J. Lahoz Díaz y Pilar García Orduña, investigadores del Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH; CSIC- Universidad de Zaragoza), contó con el apoyo económico del Grupo Especializado de Cristalografía y Crecimiento Cristalino de la Reales Sociedades de Química y Física (GE3C), de la Asociación de Usuarios de Sincrotrón de España (AUSE) y de la empresa Bruker.

Esta edición ha contado con la participación de 13 alumnos, entre los que se encuentran estudiantes de doctorado, jóvenes investigadores y personal técnico especializado de diferentes universidades y centros de investigación de nuestro país (Universidad de Alcalá de Henares, Universidad Jaume I, Universidad de La Coruña, Universidad de La Laguna, Universidad de Pamplona, Universidad de Sevilla, Universidad de Vigo, IMDEA Nanociencia, Instituto de Catálisis y Petroleoquímica y ESRF).

El programa científico incluyó 35 h lectivas, con sesiones teóricas y prácticas revisando el fenómeno de difracción, desarrollando conceptos básicos de simetría, de difracción, de crecimiento cristalino, abordando la integración de datos de difracción, así como sobre las aplicaciones de la difracción de electrones, neutrones o la Cristalografía Cuántica en el desarrollo de la Química y otras áreas afines.

Todas las lecciones fueron impartidas por profesorado de reconocido prestigio, contando con la presencia de Laura Cañadillas (Instituto Laue Langevin), Duane Choquesillo Lazarte (Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra), Berta Covelo (Universidad de Vigo), Felipe Gándara (Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid), Carsten Leczynek (Bruker AXS), Anthony Linden (Universidad de Zurich), José Manuel Martín García (Instituto de Química Física Blas Cabrera), Florian Meurer (Universität Regensburg) y Sergio Plana Ruiz (Universitat Rovira y Virgili), así como por los propios directores del curso.



Asistentes a la Escuela de Cristalografía de Rayos X en Monocristal.

NOTICIAS SOCIOS

Premios Nacionales de Investigación 2024

Tomás Torres, Premio Enrique Moles

Tomás Torres es doctor en Química (UAM, 1978, Prof. Fariña). Realizó una estancia postdoctoral en el Instituto Max-Planck de Bioquímica en Martinsried, Múnich (1978-1980, Prof. Schäfer) como becario Max-Planck, y en el Instituto de Química Orgánica del CSIC en Madrid (1980-1981). Trabajó en Abelló, S.A./Merck, Sharp and Dohme (1981-1985) en Madrid. En 1985, se convirtió en Profesor Asociado y, entre 2000 y 2022, fue Catedrático de Química y director del Instituto de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas de la UAM (2016-2022). Actualmente, es Profesor Emérito en activo en la UAM y Científico Senior en IMDEA-Nanociencia.

Ha trabajado en áreas de nuevos materiales moleculares para energía y nanomedicina, y actualmente lidera un equipo de 20 personas. Torres cuenta con más de 600 publicaciones (34,499 citas) y 49 patentes, con un índice H (WoS) de 96. Ha dirigido 64 tesis doctorales, impartido



Prof. Tomás Torres

395 conferencias y participado como investigador principal en más de 55 proyectos. Torres ocupa el quinto lugar entre los químicos españoles más citados en los últimos 10 años.

Ha recibido numerosos reconocimientos, entre ellos la Medalla de Oro de la Real Sociedad Española de Química (2013), el Premio Linstead de la Sociedad de Porfirinas y Ftalocianinas (2016) y el Premio Miguel Catalán de la Comunidad de Madrid (2017). En 2018, fue galardonado con el Premio Elhuyar-Goldschmidt por la Sociedad Alemana de Química (Gesellschaft Deutscher Chemiker). Es miembro de la Academia Europea de Ciencias (EURASC) desde 2017. Ha recibido doctorados honoris causa por la Universidad de Ivánovo, Rusia (2009), y la Universidad Miguel Hernández de Elche, España (2016). Recientemente, en 2023, fue galardonado con el Premio Humboldt de Investigación de la Fundación Alemana de Investigación.

Ramón Martínez Máñez, Premio Juan de la Cierva

Ramón Martínez Máñez ha trabajado durante más de 30 años en el diseño de nanopartículas para liberación controlada de fármacos, y de sondas cromofluorogénicas y sensores químicos, para aplicaciones biomédicas, medioambiente y tecnología de alimentos en la Universitat Politècnica de València (UPV). Es actualmente Director del Instituto Interuniversitario de Investigación de Reconocimiento Molecular y Desarrollo Tecnológico (IDM), Director Científico de la ICTS NANBIOSIS y ha sido durante los últimos años Director Científico del Centro de Investigación Biomédica en Red en Bioingeniería, Biomateriales y Nanomedicina (CIBER-BBN). Ramón Martínez-Mañez ha publicado más de 600 artículos de investigación. Es coeditor de un libro, coautor de 25 capítulos de libro, ha dirigido 61 tesis doctorales, 13 de las cuales han obtenido premio extraordinario de doctorado y ha supervisado en su laboratorio a 65 estudiantes internacionales. Ha sido miembro de varias Comisiones de Expertos para la Agencia Estatal de Investigación y el IS-

CIII, así como evaluador para varias agencias extranjeras. Fue coordinador del Programa de Doctorado Interuniversitario en Química en la UPV. Ha sido coordinador de más de 200 proyectos financiados por el Gobierno Español, la Generalitat Valenciana, el Instituto de Salud Carlos III y Europa. Participa en la actualidad en 7 Proyectos Europeos incluyendo una ERC Advanced Grant. Re-

señas a su investigación han aparecido más de 175 veces en periódicos locales y nacionales y en TV. Ha participado en más de 45 proyectos en colaboración con empresas nacionales e internacionales. Tiene 38 patentes, algunas de ellas transferidas a distintas compañías. Ha sido cofundador de tres *spin-offs* relacionadas con los campos de la nanomedicina y sensores. En 2016 recibió el Premio a la Excelencia Investigadora de la Real Sociedad Española de Química. En 2023, recibe premios UPV al Impacto Mediático de la Investigación y a una Carrera Científica Pionera. En 2018 recibe el Premio Jaume I de Nuevas Tecnologías.



Prof. Ramón Martínez Máñez.

María Escudero Escribano, Premio María Teresa Toral

María Escudero Escribano es catedrática de investigación ICREA en el Instituto Catalán de Nanociencia y Nanotecnología (ICN2), donde dirige el grupo de NanoElectrocatalisis y Química Sostenible, desde 2022. Es Ingeniera Química por la Universidad de Extremadura y Doctora en Electroquímica por la Universidad Autónoma de Madrid (2011), con su tesis doctoral realizada en el Instituto de Química Física Blas Cabrera del CSIC. Fue investigadora postdoctoral en la Universidad Técnica de Dinamarca (2012-2015) y la Universidad de Stanford en

Estados Unidos (2015-2017). A los 33 años, comenzó su carrera independiente en la Universidad de Copenhague, donde fue profesora y líder de grupo desde 2017 hasta regresó a España como profesora ICREA.

Su investigación se centra en el diseño, caracterización y desarrollo de nuevos materiales y procesos electroquímicos para conversión de energía renovable, así como la producción de combustibles verdes y otros productos sostenibles. Estos procesos permiten obtener hidrógeno verde y otros combustibles limpios para la aviación y el transporte marítimo, así como medicamentos, fertilizantes y otros materiales. Sus publicaciones científicas han tenido un enorme impacto (>6000 citas recibidas) y es inventora de tres patentes. Ha recibido numerosos premios de investigación tanto a nivel nacional como internacional como reconocimiento de la calidad, originalidad, innovación, relevancia e impacto científico, tecnológico, energético y social de sus investigaciones. Entre ellos destacan: Medalla de Oro del Premio Joven Químico Europeo (2016), 'ECS Energy Technology Division Young Researchers Award' (2018), Premio Princesa de Girona Investigación Científica (2018), Premio Jóvenes Investigadores de la Real Sociedad Española de Química (2019), 'Clara Immerwahr Award' (2019), 'Journal of Materials Chemistry Lectureship' (2021). En 2022, María recibió una ERC Consolidator Grant y, desde el 2022, es Académica de Número de la Academia Joven de España.



Prof.ª María Escudero Escribano.

Beatriz Pelaz, Premio Felisa Martín Bravo

Beatriz Pelaz es Profesora Titular de la Universidad de Santiago de Compostela, donde codirige el grupo BioNanoTools del Centro Singular en Química Biológica y Materiales Moleculares (CiQUS-USC). Ha sido premiada por la excelencia y calidad de su trabajo e independencia científica en el ámbito de los nanomateriales avanzados con aplicaciones



Dra. Beatriz Pelaz.

terapéuticas. En su investigación destacan el control de las propiedades fisicoquímicas de los materiales para determinar su comportamiento biológico y el desarrollo de nuevas tecnologías para la modificación de la superficie de nanopartículas mediante el uso de orígenes de ADN.

Presentación Quimioteca CSIC (QCSIC)



Logo de la Quimioteca CSIC (QCSIC).

El miércoles 18 de septiembre, el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), organismo dependiente del Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades, presentó una nueva infraestructura estratégica: la Quimioteca CSIC (QCSIC).

El evento fue inaugurado por el Vicepresidente de Investigación Científica y Técnica del CSIC, José María Martel, y contó con la presencia de la Secretaria General de Investigación, Eva Ortega Paíno. El Director del Instituto de Investigaciones Químicas y del Centro de Investigaciones Científicas Isla de la Cartuja, quien también es coordinador de la iniciativa, realizó una presentación sobre la Quimioteca, abordando sus orígenes, importancia y logros. Posteriormente, se celebró una mesa redonda titulada "Pequeñas moléculas para grandes retos", en la que participaron los siguientes expertos:

- José Bartolomé, Director de Investigación del Centro de Toledo de la empresa Janssen.
- Rafael Fernández-Chacón, Director del Instituto de Biomedicina de Sevilla.
- M^o Jesús Pérez-Pérez, Profesora de Investigación del Instituto de Química Médica-CSIC.

- Margarita del Val, Coordinadora de la Plataforma Temática Interdisciplinar (PTI) Salud Global.
- Javier García Martínez, Presidente de la IUPAC (2022-2023) y Premio Nacional de Investigación "Juan de la Cierva".

La Quimioteca CSIC se enmarca en el ámbito de la "Salud Global" y tiene como objetivo abordar los desafíos relacionados con la salud humana, animal y vegetal, promoviendo la colaboración interdisciplinar para desarrollar soluciones innovadoras. Además, busca fortalecer la interacción con el sector empresarial, facilitar la generación de nuevas patentes y, en última instancia, contribuir al desarrollo de tratamientos más efectivos.

Esta infraestructura, nacida en el seno de la Plataforma Temática Interdisciplinar Salud Global, está coordinada por el Director del Instituto de Investigaciones Químicas de Sevilla, y cuenta con la destacada colaboración del Instituto de Química Médica de Madrid y del Instituto de Química Avanzada de Cataluña.



Mesa redonda "Pequeñas moléculas para grandes retos", durante el acto de presentación.

Quinta Edición del Simposio Iberoamericano de Química Orgánica (SIBEAQO-V)

Del 11 al 14 de septiembre se celebró en el Auditorio Municipal del Grove la quinta edición del Simposio Iberoamericano de Química Orgánica (SIBEAQO-V) con la presencia de casi 120 investigadores iberoamericanos y europeos, procedentes de Cuba, Brasil, México, Uruguay, Argentina, Chile, Portugal, España, Estados Unidos, Suiza, Alemania, Reino Unido y Francia. La organización del simposio estuvo a cargo de la Prof.ª Concepción González Bello y el Dr. Emilio Lence Quintana, presidenta y secretario del comité organizador, y de los vocales, la Dra. María Maneiro Rey, y los profesores Marta Lores Agúin, y M. Eugenio Vázquez Sentís, todos ellos profesores e investigadores de la Universidad de Santiago de Compostela.

Con esta reunión se buscó proporcionar un foro de encuentro y de debate entre los investigadores de Química Orgánica de Iberoamérica para promover el intercambio de ideas e incrementar las colaboraciones entre los países iberoamericanos, así como estudiar los avances más recientes en el ámbito de la química orgánica. La ceremonia de apertura estuvo presidida por la Sra. Vicerrectora de Política Científica de la Universidad de Santiago de Compostela, Dña. Pilar Bermejo Barrera y participaban también el Sr. José Antonio Cacabelos Rico, el alcalde del Grove, el Prof. Julio Podestá, miembro del comité coordinador y profesor de la Universidad Nacional del Sur, Argentina, y la Prof.ª Concepción González Bello, presidenta del comité organizador, catedrática del Departamento de Química Orgánica e investigadora principal en el CIQUS.

Este evento ha consolidado su relevancia internacional desde su primera edición en 2007 en Mar del Plata, Argentina. Con ediciones posteriores en Santiago de Compostela (2010), Porto (2016) y Cayo Santamaría (2019), el SIBEAQO ha logrado establecer fructíferas colaboraciones científicas y humanas. La edición de este año, celebrada en la pintoresca localidad gallega de O Grove, contribuyó a afianzar y expandir estas alianzas, reforzando la cooperación científica en la región iberoamericana.

El simposio contó con cinco científicos de renombre internacional como conferenciantes plenarios: el Prof. Amir Hoveyda, del Boston College, y la Universidad de Estrasburgo; el Prof. Erick M. Carreira, del ETH Zürich; el Prof. Chris Vanderwal de la Universidad de California; la Dra. Martina DelBianco del Max Planck Institute of Colloids and Interfaces; y el Prof. Antonio M. Echavarren del Institut Català d'Investigació Química (ICIQ). En el simposio participaron además numerosos conferenciantes invitados de diversos países, tanto del ámbito académico como de la industria química, así como investigadores que presentaron diversas comunicaciones, orales, cortas o carteles.

El Comité Organizador dedicó este simposio a la memoria del Prof. Edmundo Alfredo Rúveda, un brillante químico orgánico que inspiró y formó a muchas generaciones de químicos en el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET, Argentina), así como en la Universidad Estatal de Campinas (UNICAMP, Brasil), muy querido por los investigadores iberoamericanos.



Acto de inauguración del SIBEAQO-V. De izquierda a derecha: Julio Podestá, Pilar Bermejo Barbera, José Cacabelos Rico, y Concepción González Bello.

El simposio concluyó con la entrega de premios a tres investigadores en reconocimiento a sus contribuciones en el ámbito de la química orgánica y su destacada trayectoria profesional: el Prof. Claudio Palomo, catedrático jubilado de la Universidad del País Vasco; el Prof. Antonio M. Echavarren, presidente de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ); y la Prof.ª M. Emilia Sousa, de la Universidad de Oporto.

Se otorgaron cuatro premios a investigadores jóvenes, patrocinados por la revista JACS y entregados por su editor jefe, el Prof. Erick M. Carreira: dos a las mejores comunicaciones cortas y dos a los mejores carteles. Los premios a las comunicaciones cortas fueron para Dayana Alonso, de la Universidad de La Habana (Cuba), y Alberto José Pernas Álvarez, de la Universidad de Vigo. Los premios a los mejores carteles fueron para Ángel Alejandro Nolasco-Hernández, de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP, México), y María Carmen Outeiral Valiño, de la USC-CIQUS.

Finalmente, el comité organizador agradece enormemente el apoyo recibido por parte del ayuntamiento del Grove, de la Facultad de Química de la USC, Chemistry Europe y de la Real Sociedad Española de Química a través de los grupos especializados de Química Orgánica y Química Biológica, así como de la Sección Territorial de Galicia. Agradecer también la ayuda recibida de las empresas gallegas GalChimia, MestreLab Research y Chemosapiens, así como de los consejos reguladores de aguardientes y licores tradicionales de Galicia, del queso tetilla, denominación de origen protegida Arzúa-Ulloa, de las bodegas Pazo de Rubianes, Familia Chavarri y Restollal de Amandi y de Emgrobes, la asociación de empresarios groveses de bienes y servicios.

Concepción González Bello
Universidade de Santiago de Compostela, CIQUS
Presidenta del Comité Organizador



Entrega de premios a una carrera distinguida en química orgánica. De izquierda a derecha: Antonio Mourriño, Claudio Palomo y Concepción González-Bello, Julio Podestá, Antonio M. Echavarren y Concepción González-Bello. Arthur Silva, M. Emilia Sousa, y Concepción González-Bello.

I Simposio Iberoamericano de Química Orgánica para Jóvenes Investigadores (IBEQO-I)

El pasado 10 de septiembre de 2024, Santiago de Compostela acogió el I Simposio Iberoamericano de Química Orgánica para Jóvenes Investigadores (IBEQO-I), un evento complementario al Quinto Simposio Iberoamericano de Química Orgánica (SIBEAQO-V), dirigido a jóvenes investigadores, estudiantes de postdoctorado, doctorado, y grado. Este simposio pretendió ser un foro de encuentro y divulgación de los avances más recientes en el campo de la química orgánica, así como motor de debate sobre las perspectivas profesionales futuras del ámbito. El simposio contó con dos conferencias impartidas por investigadores sénior: el Prof. Félix Freire, de la Universidad de Santiago de Compostela, y la Prof.^a Elena Pazos, de la Universidad de A Coruña. La jornada concluyó con una mesa redonda enriquecedora, en la que participaron profesionales de distintos sectores, tanto de la industria como del ámbito académico. Del sector industrial participaron el Dr. Jacobo Cruces, director de Galchimia; la Dra. Verónica Prado, de CEAMSA; la Dra. Beatriz Blanco, de Life Molecular Imaging. El sector académico estuvo representado por los profesores de la USC, Félix Freire y Concepción González Bello, presidenta del simposio, y la profesora Elena Pazos de la Universidad de



Mesa redonda del IBEQO-I. De izquierda a derecha: Jacobo Cruces, Félix Freire, Elena Pazos, Beatriz Blanco, Verónica Prado, y Concepción González Bello.

A Coruña. La mesa redonda generó un intenso debate entre los asistentes, centrado principalmente en identificar las cualidades profesionales y humanas que las empresas del sector buscan en los jóvenes graduados y doctores en química.

Katherine Villa: premio EuChemS Lecture Award 2023



Katherine Villa ha sido galardonada con el premio EuChemS Lecture Award 2023. Este premio reconoce los logros de científicos jóvenes que trabajan en un país con una organización que es miembro de EuChemS, en este caso, la RSEQ. Como merecedora de este premio, nuestra compañera impartirá una conferencia plenaria en el X Congreso de

Química de EuChemS, que se celebrará en Amberes, Bélgica, en julio de 2026.

La Dra. Villa se licenció en Química en la Universidad del Quindío (Colombia). Posteriormente se trasladó a España para continuar su carrera científica. Realizó su tesis doctoral en la Universitat Autònoma de Barcelona, sobre "Generación de hidrógeno a partir de biomasa mediante fotocatalisis heterogénea". Tras obtener su doctorado, trabajó como investigadora postdoctoral en el Instituto de Investigación en Energía de Cataluña (IREC), el Instituto de Bioingeniería de Cataluña (IBEC) y en la Universidad de Química y Tecnología de la República Checa. Desde junio de 2021, es investigadora principal en el ICIQ, gracias a una beca Junior Leader de la Caixa. Asimismo, ha conseguido becas altamente competitivas, entre ellas MSCA-COFUND-Universidad de Padua, Beatriu de Pinós, Ramón y Cajal y ERC-StG. Sus áreas de investigación incluyen fotocatalisis, nanomateriales, energías renovables, micro/nanomotors y remediación medioambiental. Actualmente desarrolla un proyecto centrado en la conversión de dióxido de carbono en productos químicos y combustibles de alto valor añadido.

Los ganadores de las Olimpiadas Científicas de 2024 reciben el reconocimiento del Ministerio de Educación

Los alumnos ganadores de las fases nacionales, internacionales e iberoamericanas de las Olimpiadas Científicas recibieron el pasado día 25 de octubre el reconocimiento del Ministerio de Educación, Formación Profesional y Deportes por las medallas obtenidas en estas competiciones.

El secretario de Estado de Educación, Abelardo de la Rosa, presidió la ceremonia de entrega de diplomas. El acto reunió a medio centenar de ganadores de los Premios Nacionales de las Olimpiadas Científicas de 2024 en las disciplinas de Química, Matemáticas, Biología, Física, Geología, Economía e Informática. Ha contado, además, con la participación de las Reales Sociedades científicas y asociaciones vinculadas.

En representación del área de Química estuvieron presentes los 10 primeros ganadores: Ángel García Andreu, medalla de oro y ganador de la Olimpiada Nacional, y medalla de bronce en la Olimpiada Iberoamericana; Enrique Cortés Tirado, medalla de oro de la Olimpiada Nacio-

nal y medalla de bronce en la Olimpiada Iberoamericana; Carlos Calderón Alba, medalla de oro en la Olimpiada Nacional, medalla de plata en la Olimpiada Iberoamericana y Mención de Honor en la Olimpiada Internacional; Daniel García Mihalic, medalla de oro en la Olimpiada Nacional, medalla de bronce en la Olimpiada Iberoamericana y Mención de Honor en la Olimpiada Internacional; junto a Daniel Quintana Alonso, Sergio Martín Pe, Carmela Guerrero Rodríguez, Asier Sánchez Rodríguez, Jaime Ruiz Ródenas y Paz Béjar Armañanzas, medallas de oro en la Olimpiada Nacional.

Los olímpicos estuvieron acompañados por Antonio M. Echavarren, presidente de la RSEQ, así como por los mentores Óscar Rodríguez Montoro, Jorge Melendo Arrufat (los profesores miembros de la delegación olímpica a la Olimpiada Internacional) y María del Mar Ramos Gallego (una de las profesoras integrante de la delegación olímpica a la Olimpiada Iberoamericana).



Foto oficial de los Olímpicos acompañados por el secretario de Estado de Educación, Abelardo de la Rosa y el Presidente de la RSEQ, Antonio M. Echavarren (Fuente: Ministerio de Educación y Formación Profesional).

100 años de la fundación de la Droguería Boter S.L. de Badalona

El 18 de octubre de 2024 se conmemoraron los 100 años de la fundación de la Droguería Boter S.L. de Badalona en el Teatro del Círcol, un acto donde se rindió homenaje a todas aquellas personas que han trabajado en la empresa durante todos estos años. Al acto de celebración, además de toda la familia de Droguería Boter S.L., también asistieron autoridades locales y numerosas autoridades académicas y científicas.

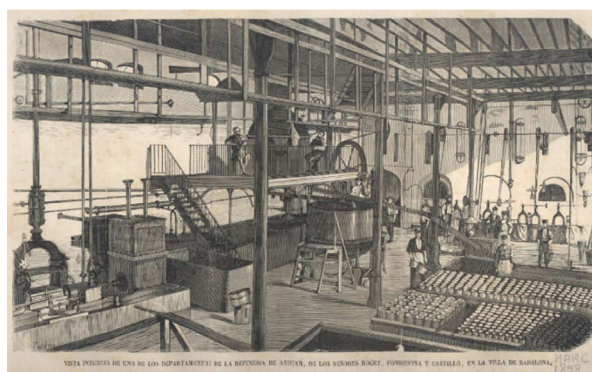
La RSEQ fue invitada al acto y estuvo representada por el Prof. Albert Moyano Baldoire, Presidente de la ST de Cataluña.

La droguería fue fundada en 1924 por Joan Boter Torrens. La empresa abrió sus puertas el 18 de octubre de 1924, en un local situado en la calle Prat de la Riba, 71 de Badalona (actualmente Calle del Mar). El edificio fue diseñado por uno de los arquitectos modernistas más importantes de la ciudad, Joan Amigó i Barriga y fue catalogado como Edificio Histórico y cultural de interés Municipal. Las droguerías no eran como las conocemos hoy en día y, junto a los productos químicos, también se vendía otro tipo de mercancía, como por ejemplo ultramarinos. En aquel entonces, había tres establecimientos más que se dedicaban a la química en la misma calle.

Badalona era una de las ciudades dedicadas a la industria química más importantes de la península. Se encontraba en el



Fotografía de archivo de la Droguería Boter. Arriba: a principios del s XX; abajo: en la actualidad.



Imágenes de archivo del Museo de Badalona representado la Badalona Industrial del siglo XX. Arriba: CROSS S.A.; abajo: EL SUCRE

recorrido de la primera línea ferroviaria inaugurada en España, que conectaba Barcelona con Mataró. La Droguería Boter estaba rodeada de algunas de las empresas con más nombre del país, como la Fabrica Cross, dedicada a la fabricación de productos químicos derivados del fósforo; la Unión Vidriera de España, conocida como "El Cristall", que se dedicaba a la producción de materiales de vidrio; La Campsa, dedicada a la refinación del petróleo; y empresas dedicadas a la industria alimentaria, como el Anís del Mono, Refinerías Diana, la refinación de azúcar La Colonial, entre muchas otras. Gracias a las numerosas oportunidades que brindaba la industria química en la ciudad, surgieron rápidamente sinergias entre la Droguería Boter y otras empresas locales.

La droguería sigue siendo un referente para las empresas en lo que a productos de química industrial se refiere, pero no ha olvidado las necesidades de la población, proporcionando lo que se podría llamar química cotidiana: productos químicos específicos para resolver pequeños problemas de la vida diaria. Su experiencia y conocimientos los hace únicos en este sector, tanto es así que en Badalona se dice que lo que no se encuentra en Can Boter, no se encuentra en ninguna parte.

Josep Boter Carbonell

Premio Nobel de Química 2024: Diseño Computacional de Proteínas y Predicción de Estructura de Proteínas

El premio Nobel de Química en 2024 ha sido otorgado a David Baker, de la Universidad de Washington en Seattle y del Howard Hughes Medical Institute, y Demis Hassabis y John Jumper de la empresa Google DeepMind, por el desarrollo de métodos computacionales para el diseño de proteínas y de predicción de la estructura terciaria de proteínas.

Hace unos 65 años se determinó por primera vez mediante cristalografía de rayos X las primeras estructuras tridimensionales (3D) de las proteínas.^[1] Estas primeras estructuras hicieron evidente como las cadenas polipeptídicas se pliegan sobre si mismas usando unos patrones complejos y bien definidos, cosa que es clave para su función. Este descubrimiento también evidenció cómo la predicción de la estructura 3D de una proteína permite predecir también su función, así como sus propiedades bioquímicas. En 1972, Christian Anfinsen recibió el Premio Nobel de Química por su notable descubrimiento de que las estructuras 3D de las proteínas vienen codificadas por su secuencia de aminoácidos en la cadena peptídica.^[2] Este descubrimiento llevó al gran desafío de la biología estructural de los últimos 50 años: "Predecir la estructura 3D de una proteína a partir de su secuencia de aminoácidos".

El problema de la predicción de estructuras terciarias también puede formularse de forma inversa, es decir, preguntándose qué secuencias de aminoácidos producirían un patrón de plegamiento específico con una determinada función. En este problema se centra el diseño de proteínas, un campo en el que dada una estructura objetivo deseada se identifica, mediante métodos computacionales, las secuencias que generarían dicha estructura con una función determinada.

El premio Nobel de 2024 reconoce los grandes avances realizados para solucionar estos dos gran retos: la predicción de estructuras tridimensionales a partir de la secuencia, y la predicción de secuencias a partir de la estructura.

Regan y DeGrado en 1988 construyeron una proteína formada por alfa helices y conectadas mediante bucles que sirvió de base para muchos diseños de proteínas.^[3] Dahiyat y Mayo publicaron en 1997 el primer diseño computacional de una proteína pequeña.^[4] El principal objetivo era encontrar una nueva secuencia capaz de adoptar una determinada estructura llamada zinc-finger pero sin la presencia de iones metálicos. La generación de nuevas proteínas con secuencias no relacionadas con las naturales se denomina diseño de proteínas de novo. El gran avance en el diseño de proteínas de novo se produjo en 2003 cuando Baker diseñó una nueva proteína de 93 aminoácidos llamada Top7.^[5] La clave del éxito fue el software desarrollado llamado Rosetta, el cual se basa en combinar pequeños fragmentos de proteínas no relacionadas con secuencias similares locales de la base de estructuras 3D Protein Data Bank (PDB) y optimizar la secuencia y estructura con respeto a la estructura objetivo.^[6] Rosetta fue diseñado desde el principio para ser aplicado tanto para predecir la estructura 3D de las proteínas como para diseñar nuevas secuencias. El 2008, Baker, Houk y colaboradores publicaron los primeros diseños de enzimas de novo, y aunque las actividades conseguidas eran modestas estos estudios posteriores demostraron



David Baker, Demis Hassabis, John Jumper.

que dichos diseños computacionales se podían mejorar de forma remarcable mediante Evolución Dirigida (técnica por la cual Frances Arnold recibió el premio Nobel de Química de 2018).^[7] Baker también aplicó sus protocolos computacionales para el diseño de proteínas para unirse a determinados ligandos,^[8] nanomateriales que se auto-ensamblan generando estructuras altamente complejas,^[9] así como sensores e interruptores proteicos.^[10, 11]

Una iniciativa importante en el campo de la predicción de la estructura 3D de las proteínas es el reto CASP (en inglés Critical Assessment of protein Structure Prediction) organizado por primera vez el 1944. Este reto bianual permite poner a prueba los diferentes métodos de predicción de estructuras 3D de proteínas, ya que las predicciones se comparan directamente con nuevas estructuras experimentales determinadas por cristalografía de rayos X o RMN. Durante años el progreso fue ciertamente lento, pero con los avances en secuenciación de ADN a principios de los 90, el número de secuencias de proteínas disponibles también creció exponencialmente. Esto permitió alinear y comparar un mayor número de secuencias para una familia de proteínas dada (alineamiento múltiple de secuencias, o MSA). La métrica usada en CASP para determinar la calidad de los modelos generados es el test de distancia global (GDT en inglés) e indica el porcentaje más alto de átomos de α -carbono que caen dentro de un cierto umbral de distancia de la estructura experimental, después de superponer iterativamente ambas estructuras. Durante años el GDT se mantuvo por debajo del 40 % hasta CASP12 en 2016. En 2018, el GDT aumentó hasta 70 % gracias a la aplicación de métodos de deep learning usando redes neuronales convolucionales. En particular, la empresa DeepMind fundada por Demis Hassabis, construyó un programa basado en una red neuronal convolucional que llamaron AlphaFold (AF1).^[12] En 2020 el equipo de DeepMind liderado por Jumper y Hassabis demostró la elevada precisión de su nueva red neuronal completamente rediseñada basada en una arquitectura transformer llamada AlphaFold2 (AF2).^[13] AF2 determinó la estructura 3D de las proteínas del CASP^[14] con valores de GDT del 90 %, valor considerado comparable a la precisión experimental.

La ingeniosa arquitectura de AF2 de Jumper, Hassabis y sus colaboradores puede considerarse como el primer gran avance científico real de la inteligencia artificial en el campo de la biología. El hecho de que el código fuente de AF2 se hiciera público contribuyó de manera decisiva a su impacto, ya que pudo ser am-

pliamente probado y validado. Una arquitectura de aprendizaje profundo similar a la de AF2 también fue adoptada rápidamente por Baker en el programa RoseTTAFold (RF).^[14]

AF2 es reconocido como uno de los hitos más importantes en la predicción de la estructura de proteínas, y gracias a ello ha impulsado la aplicación y desarrollo de múltiples protocolos y métodos de aprendizaje profundo basados en AF2, RF para el diseño de proteínas. Métodos recientes como Rfdiffusion,^[15] ProteinMPNN,^[16] y halucinación^[17] desarrollados por Baker han permitido ampliar el campo del diseño de proteínas para aplicaciones biomédicas, como el diseño de vacunas e inhibidores basados en proteínas, así como aplicaciones en biología sintética.^[18-20]

SÍLVIA OSUNA

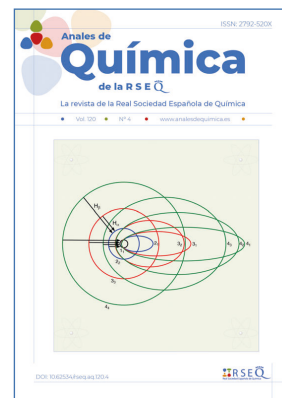
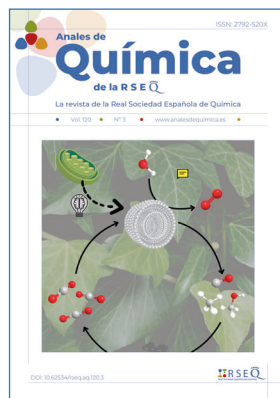
Institut de Química Computacional i Catalàlisi
Universitat de Girona & ICREA

Bibliografía

- [1] Kendrew, J. C.; Bodo, G.; Dintzis, H. M.; Parrish, R. G.; Wyckoff, H.; Phillips, D. C. A Three-Dimensional Model of the Myoglobin Molecule Obtained by X-Ray Analysis. *Nature* **1958**, *181*, 662-666.
- [2] Anfinsen, C. B. Principles that Govern the Folding of Protein Chains. *Science* **1973**, *181*, 223-230.
- [3] Regan, L.; DeGrado, W. F. Characterization of a Helical Protein Designed from First Principles. *Science* **1988**, *241*, 976-978.
- [4] Dahiyat, B. I.; Mayo, S. L. De Novo Protein Design: Fully Automated Sequence Selection. *Science* **1997**, *278*, 82-87.
- [5] Kuhlman, B.; Dantas, G.; Ireton, G. C.; Varani, G.; Stoddard, B. L.; Baker, D. Design of a Novel Globular Protein Fold with Atomic-Level Accuracy. *Science* **2003**, *302*, 1364-1368.
- [6] Simons, K. T.; Bonneau, R.; Ruczinski, I.; Baker, D. Ab initio protein structure prediction of CASP III targets using ROSETTA. *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics* **1999**, *37*, 171-176.
- [7] Jiang, L.; Althoff, E. A.; Clemente, F. R.; Doyle, L.; Röthlisberger, D.; Zanghellini, A.; Gallaher, J. L.; Betker, J. L.; Tanaka, F.; Barbas, C. F.; Hilvert, D.; Houk, K. N.; Stoddard, B. L.; Baker, D. De Novo Computational Design of Retro-Aldol Enzymes. *Science* **2008**, *319*, 1387-1391.
- [8] Tinberg, C. E.; Khare, S. D.; Dou, J.; Doyle, L.; Nelson, J. W.; Schena, A.; Jankowski, W.; Kalodimos, C. G.; Johnsson, K.; Stoddard, B. L.; Baker, D. Computational design of ligand-binding proteins with high affinity and selectivity. *Nature* **2013**, *501*, 212-216.
- [9] Bale, J. B.; Gonen, S.; Liu, Y.; Sheffler, W.; Ellis, D.; Thomas, C.; Cascio, D.; Yeates, T. O.; Gonen, T.; King, N. P.; Baker, D. Accurate design of megadalton-scale two-component icosahedral protein complexes. *Science* **2016**, *353*, 389-394.
- [10] Bick, M. J.; Greisen, P. J.; Morey, K. J.; Antunes, M. S.; La, D.; Sankaran, B.; Reymond, L.; Johnsson, K.; Medford, J. I.; Baker, D. Computational design of environmental sensors for the potent opioid fentanyl. *eLife* **2017**, *6*, e28909.
- [11] Langan, R. A.; Boyken, S. E.; Ng, A. H.; Samson, J. A.; Dods, G.; Westbrook, A. M.; Nguyen, T. H.; Lajoie, M. J.; Chen, Z.; Berger, S.; Mulligan, V. K.; Dueber, J. E.; Novak, W. R. P.; El-Samad, H.; Baker, D. De novo design of bioactive protein switches. *Nature* **2019**, *572*, 205-210.
- [12] Senior, A. W.; Evans, R.; Jumper, J.; Kirkpatrick, J.; Sifre, L.; Green, T.; Qin, C.; Židek, A.; Nelson, A. W. R.; Bridgland, A.; Penedones, H.; Petersen, S.; Simonyan, K.; Crossan, S.; Kohli, P.; Jones, D. T.; Silver, D.; Kavukcuoglu, K.; Hassabis, D. Improved protein structure prediction using potentials from deep learning. *Nature* **2020**, *577*, 706-710.
- [13] Jumper, J.; Evans, R.; Pritzel, A.; Green, T.; Figurnov, M.; Ronneberger, O.; Tunyasuvunakool, K.; Bates, R.; Židek, A.; Potapenko, A.; Bridgland, A.; Meyer, C.; Kohli, S. A. A.; Ballard, A. J.; Cowie, A.; Romera-Paredes, B.; Nikolov, S.; Jain, R.; Adler, J.; Back, T.; Petersen, S.; Reiman, D.; Clancy, E.; Zielinski, M.; Steinegger, M.; Pacholska, M.; Berghammer, T.; Bodenstein, S.; Silver, D.; Vinyals, O.; Senior, A. W.; Kavukcuoglu, K.; Kohli, P.; Hassabis, D. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* **2021**, *596*, 583-589.
- [14] Baek, M.; DiMaio, F.; Anishchenko, I.; Dauparas, J.; Ovchinnikov, S.; Lee, G. R.; Wang, J.; Cong, Q.; Kinch, L. N.; Schaeffer, R. D.; Millán, C.; Park, H.; Adams, C.; Glassman, C. R.; DeGiovanni, A.; Pereira, J. H.; Rodrigues, A. V.; van Dijk, A. A.; Ebrecht, A. C.; Opperman, D. J.; Sagmeister, T.; Buhlheller, C.; Pavkov-Keller, T.; Rathinaswamy, M. K.; Dalwadi, U.; Yip, C. K.; Burke, J. E.; Garcia, K. C.; Grishin, N. V.; Adams, P. D.; Read, R. J.; Baker, D. Accurate prediction of protein structures and interactions using a three-track neural network. *Science* **2021**, *373*, 871-876.
- [15] Lisanza, S. L.; Gershon, J. M.; Tipps, S. W. K.; Sims, J. N.; Arnoldt, L.; Hendel, S. J.; Simma, M. K.; Liu, G.; Yase, M.; Wu, H.; Tharp, C. D.; Li, X.; Kang, A.; Brackenbrough, E.; Bera, A. K.; Gerben, S.; Wittmann, B. J.; McShan, A. C.; Baker, D. Multistate and functional protein design using RoseTTAFold sequence space diffusion. *Nature Biotechnology* **2024**.
- [16] Dauparas, J.; Anishchenko, I.; Bennett, N.; Bai, H.; Ragotte, R. J.; Milles, L. F.; Wicky, B. I. M.; Courbet, A.; de Haas, R. J.; Bethel, N.; Leung, P. J. Y.; Huddy, T. F.; Pellock, S.; Tischer, D.; Chan, F.; Koepnick, B.; Nguyen, H.; Kang, A.; Sankaran, B.; Bera, A. K.; King, N. P.; Baker, D. Robust deep learning-based protein sequence design using ProteinMPNN. *Science* **2022**, *378*, 49-56.
- [17] Anishchenko, I.; Pellock, S. J.; Chidyausiku, T. M.; Ramelot, T. A.; Ovchinnikov, S.; Hao, J.; Bafna, K.; Norn, C.; Kang, A.; Bera, A. K.; DiMaio, F.; Carter, L.; Chow, C. M.; Montelione, G. T.; Baker, D. De novo protein design by deep network hallucination. *Nature* **2021**, *600*, 547-552.
- [18] Huang, B.; Abedi, M.; Ahn, G.; Coventry, B.; Sappington, I.; Tang, C.; Wang, R.; Schlichthaerle, T.; Zhang, J. Z.; Wang, Y.; Goreshnik, I.; Chiu, C. W.; Chazin-Gray, A.; Chan, S.; Gerben, S.; Murray, A.; Wang, S.; O'Neill, J.; Yi, L.; Yeh, R.; Misquith, A.; Wolf, A.; Tomasovic, L. M.; Piraner, D. I.; Duran Gonzalez, M. J.; Bennett, N. R.; Venkatesh, P.; Ahlrichs, M.; Dobbins, C.; Yang, W.; Wang, X.; Sahtoe, D. D.; Vafeados, D.; Mout, R.; Shivaie, S.; Cao, L.; Carter, L.; Stewart, L.; Spangler, J. B.; Roybal, K. T.; Greisen, P., Jr.; Li, X.; Bernardes, G. J. L.; Bertozzi, C. R.; Baker, D. Designed endocytosis-inducing proteins degrade targets and amplify signals. *Nature* **2024**.
- [19] Berger, S.; Seeger, F.; Yu, T.-Y.; Aydin, M.; Yang, H.; Rosenblum, D.; Guenin-Macé, L.; Glassman, C.; Arguinchona, L.; Sniezek, C.; Blackstone, A.; Carter, L.; Ravichandran, R.; Ahlrichs, M.; Murphy, M.; Pultz, I. S.; Kang, A.; Bera, A. K.; Stewart, L.; Garcia, K. C.; Naik, S.; Spangler, J. B.; Beigel, F.; Siebeck, M.; Gropp, R.; Baker, D. Preclinical proof of principle for orally delivered Th17 antagonist miniproteins. *Cell* **2024**, *187*, 4305-4317. e4318.
- [20] Edman, N. I.; Phal, A.; Redler, R. L.; Schlichthaerle, T.; Srivatsan, S. R.; Ehn, D. D.; Etemadi, A.; An, S. J.; Favor, A.; Li, Z.; Praetorius, F.; Gordon, M.; Vincent, T.; Marchiano, S.; Blakely, L.; Lin, C.; Yang, W.; Coventry, B.; Hicks, D. R.; Cao, L.; Bethel, N.; Heine, P.; Murray, A.; Gerben, S.; Carter, L.; Miranda, M.; Negahdari, B.; Lee, S.; Trapnell, C.; Zheng, Y.; Murry, C. E.; Schweppe, D. K.; Freedman, B. S.; Stewart, L.; Ekiert, D. C.; Schlessinger, J.; Shendure, J.; Bhabha, G.; Ruohola-Baker, H.; Baker, D. Modulation of FGF pathway signaling and vascular differentiation using designed oligomeric assemblies. *Cell* **2024**, *187*, 3726-3740. e3743.

Índice de autores

Anales de Química de la RSEQ Volumen 120
ISSN: 2792-520X



ENSAYO

Solà, Miquel

Reflexiones en torno a la gestión de los grupos de investigación, **2024**, 120 (3) 131-133

ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

Alcázar, Victoria

Véase, Pinto, Gabriel

Duran, Josep

Véase, Soto, Aythami

Pinto Gabriel

Implementación de una asignatura de comunicación y divulgación de la ciencia para titulaciones universitarias de ciencia e ingeniería, **2024**, 120 (3) 145-150

Poater, Albert

Véase, Soto, Aythami

Prada Pérez de Azpeitia, Fernando I.

La química que se esconde tras los mecheros, **2024**, 120 (2) 85-92

La química que se esconde detrás de las mascarillas de oxígeno de los aviones, **2024**, 120 (4) 212-218

Soto, Aythami

¡Ponte Bata! Un ejemplo del uso de vídeos cortos para la divulgación de la química, **2024**, 120 (3) 151-156

Tomás-Serrano, Antonio

Un experimento sencillo para comprobar que la llama de una vela, cubierta con un vaso, se apaga antes de consumir la totalidad del oxígeno disponible, **2024**, 120 (4) 206-211

Val-Castillo, Otilia

El sentido del momento dipolar, **2024**, 120 (1) 32-35
Breve introducción a las plantas luminiscentes, **2024**, 120 (4) 199-205

HISTORIA DE LA QUÍMICA

Bosch, Elisabeth

Francisco Buscarons Úbeda (1906-1989). Químico analítico y rector, **2024**, 120 (2) 93-98

Moreno Martínez, Luis

Química en la escuela primaria: La obra de Edmundo Lozano (1856-1919), **2024**, 120 (3) 157-163

Sales, Joaquim

Véase, Bosch, Elisabeth

IMÁGENES DE LA QUÍMICA

Álvarez, Santiago

El retrato de Marie-Anne Paulze y Antoine Lavoisier, **2024**, 120 (2) 99-101

Las manos en química, **2024**, 120 (3) 164-166

El modelo atómico de Bohr-Sommerfeld, **2024**, 120 (4) 219-223

INVESTIGACIÓN QUÍMICA

Albéniz, Ana Carmen

Hidrocarburos como reactivos en reacciones de acoplamiento cruzado C–C catalizadas por paladio:
Ventajas y retos con una mirada mecánica, **2024**, 120 (1) 8-16

Barrio, Jesús

Véase, Torrero, Jorge

Bekaliyev, Akhmet

Véase, Espinoza-Suárez, Edelman J.

Casadevall, Carla

Véase, Espinoza-Suárez, Edelman J.

Cornellà, Josep

Véase, Mato, Mauro

Delgado López-Cózar, Emilio

Detectando patrones anómalos de publicación científica en España (II). Las causas: el impacto del sistema de evaluación científica, **2024**, 120 (2) 67-84

Echevarría, Coro

Geles poliméricos. 1. Algunos conceptos básicos y reología de geles, **2024**, 120 (1) 24-31

Mato, Mauro

Adición oxidante en complejos de bismuto, **2024**, 120 (1) 17-23

Martín-Martín, Alberto

Véase, Delgado López-Cózar, Emilio

Mijangos, Carmen

Véase, Echevarría, Coro

Torrero, Jorge

Materiales de un único átomo de hierro-nitrógeno-carbono para la reducción electroquímica de oxígeno y CO₂, **2024**, 120 (4) 183-191

OPINIÓN

Quílez Pardo, Juan

Sobre la innovación educativa en la enseñanza de la química en las universidades españolas, **2024**, 120 (2) 61-66

Dear Chemistry Europe Members,
Cheers to 2025 filled with new opportunities and success!
Your continued support makes our
Chemistry Europe journey truly special.
MERRY CHRISTMAS AND HAPPY NEW YEAR!

Best wishes,
Chemistry Europe Team at
WILEY-VCH

Normas de publicación

Directrices para autores/as

Instrucciones generales

La revista *Anales de Química de la RSEQ* admite la publicación de artículos en español. Solo en caso de invitación expresa del Editor General en ese sentido se admitirán artículos escritos en inglés.

Los artículos deberán prepararse utilizando la 'plantilla_AnQuimRSEQ_articulos' (disponible en la web de la revista en el apartado Envíos) y podrán remitirse a las siguientes secciones:

- **Sección "Investigación Química"**. Publica artículos de revisión, dirigidos a una audiencia multidisciplinar y no especializada. La extensión recomendada será de 6 páginas, incluyendo figuras y referencias. Los artículos serán sometidos a revisión por pares.
- **Sección "Enseñanza de la Química"**. Publica artículos relacionados con la docencia de la Química tanto en aspectos conceptuales como experimentales, y en cualquier nivel de enseñanza, desde enseñanza primaria hasta post-grad. La extensión máxima recomendada será de 4 páginas, incluyendo figuras y referencias. Los artículos serán sometidos a revisión por pares.
- **Sección "Historia de la Química"**. Publica artículos dedicados a difundir el conocimiento de la Historia de la Química. La extensión máxima recomendada será de 4 páginas, incluyendo figuras y referencias. Los artículos serán sometidos a revisión por pares.
- **Sección "Ensayos"**. Publica artículos con una extensión máxima de 5 páginas. Los artículos deberán recoger una reflexión u opinión razonada sobre un tema de interés para la comunidad científica y educativa. Serán revisados por miembros del Comité Editorial.
- **Sección "Opinión"**. Los artículos de opinión tendrán una extensión máxima de 4 páginas. Serán revisados por miembros del Comité Editorial.

Así mismo, podrá solicitarse al Equipo Editorial (administracion@analesdequimica.es) la publicación de otros tipos de escritos, utilizando la 'plantilla_AnQuimRSEQ_cartas' (disponible en la web de la revista en el apartado Envíos):

- **Reseñas de libros**. Deben tener una extensión máxima de una página. 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. Su publicación es potestativa del Editor General. Se publicarán sin editarse y no serán sometidas a revisión, excepto si se refieren a personas o instituciones de forma ofensiva.
- **Noticias**. Los miembros de la RSEQ podrán enviar para su publicación noticias relativas a la actividad de la RSEQ, los Grupos Especializados y las Secciones Territoriales. La extensión recomendada, incluyendo fotografías, es de

media página. De forma excepcional podrán publicarse obituarios de miembros destacados de la RSEQ o de científicos cuya actividad haya sido muy relevante para un grupo importante de miembros de la RSEQ. Se ruega no superar en extensión la media página. La publicación o no de las noticias se hará según el criterio del Editor General y del Editor Asociado responsable de noticias, quienes también podrán modificar la redacción del texto.

Preparación del manuscrito

El manuscrito que se prepare para enviar a la revista debe integrar en el texto las figuras, tablas, esquemas y gráficos. El formato recomendado para el envío es PDF. Una vez aceptado el artículo, se debe enviar la versión definitiva del texto, tablas, y leyendas esquemas y figuras en formato Word. Las fotos, imágenes y esquemas en ChemDraw se deben aportar como archivos independientes en su formato original.

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, Ensayo, etc.). 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.

Para la publicación o adaptación de material gráfico que no sea de dominio público, como gráficos tomados de publicaciones preexistentes o fotografías de otros autores, se debe aportar la autorización para su publicación. Es responsabilidad del autor/autores la gestión de la necesaria autorización de los permisos de reproducción de las imágenes, esquemas y tablas a utilizar. Se deben solicitar antes de la publicación del artículo y si no se dispone de dicha autorización, no podrán incluirse en el documento. La autoría se debe citar según se describe en la 'plantilla_AnQuimRSEQ_articulos'

Se debe tener en cuenta que:

- Las imágenes creadas con datos o resultados de otras publicaciones, o redibujadas por el autor/autores no requieren permisos de derecho de autor, salvo que repliquen aspectos artísticos de la obra original.
- El material publicado en revistas y artículos de acceso abierto no necesitan el permiso del editor aunque sí debe reconocerse la autoría. No obstante, deberán tenerse en

cuenta las reglas de reutilización establecidas en el trabajo original.

- Si la licencia incluye el requisito “Sin obras derivadas”, se requiere solicitar una autorización para la reproducción/adaptación de cualquier imagen porque constituyen un trabajo derivado.
- Si la licencia incluye el requisito “Compartir igual (SA)” y admite los fines comerciales, se requiere un permiso para su reproducción/adaptación porque la revista *Anales de Química de la RSEQ* no permite los fines comerciales y, por tanto, no podría publicarse bajo los mismos términos que la licencia SA.
- Se requiere obtener el permiso de derechos de autor del propietario de una marca o logotipo para su reproducción o uso pues son un tipo de propiedad intelectual.
- Para las fotografías de archivo compradas en repositorios de fotografías es necesario revisar la licencia de reutilización para garantizar que se autorice su reutilización/adaptación. En caso contrario será necesario reemplazarla.
- Para las imágenes publicadas en Internet, es necesario verificar sus derechos de autor y comprobar sus permisos de reutilización. Será necesario pedir autorización, según corresponda. Si no es posible saber esta información, se debe reemplazar la imagen.
- Las imágenes de dominio público y las libres de derecho de autor se pueden utilizar sin mencionar su autoría.
- Aunque muchas obras de arte clásico son de dominio público, las fotografías obtenidas en Internet pertenecen al propietario del sitio o al fotógrafo. Se debe solicitar su permiso para reproducirla.

Todos los documentos se deben remitir a través del área de gestión de la revista **Anales de Química de la RSEQ**. 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).

Los manuscritos deben redactarse utilizando la letra Arial 9 puntos, interlineado sencillo, sin espaciado anterior/posterior y justificado, y utilizando la plantilla que se indica en cada caso.

En el caso de los artículos, se deben respetar las siguientes secciones: título (español e inglés), nombre y filiación de los autores, resumen (español e inglés), palabras clave (español e inglés), introducción, exposición del trabajo, conclusiones, material complementario, agradecimientos, bibliografía, reseña biográfica de los autores.

Primera página. En esta página debe aparecer el título del manuscrito, los nombres de los autores, su filiación y la dirección de correo electrónico del autor principal o de contacto, que se puede identificar mediante un asterisco. También se incluirán en esta primera página un máximo de cinco palabras clave y un resumen de un máximo de 120 palabras, tanto en español como en inglés.

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.

Figuras y esquemas. 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.

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.

Terminología empleada: La formulación y nomenclatura empleada en los artículos deberá seguir las recomendaciones de la IUPAC y su adaptación al idioma castellano (ver las Guías Breves de Nomenclatura Química: <https://rseq.org/mat-didacticos/nomenclatura-quimica-y-normas-de-la-iupac-en-espanol/>). En cuanto a los elementos que pueden tener distintos nombres en castellano, deberán ser escritos atendiendo a las conclusiones del grupo de trabajo sobre terminología química de la Real Sociedad Española de Química (*Anales de Química* **2017**, 113 (1), 65-67 <https://analesdequimica.es/index.php/AnalesQuimica/article/view/966/1301>).

Parámetros físicos o ecuaciones, etc. Para aspectos más específicos relacionados con la presentación de parámetros físicos o ecuaciones, 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).

Citas y referencias bibliográficas. La revista *Anales de Química de la RSEQ* utiliza el estilo de citación *Angewandte Chemie International Edition*. Es posible descargar el formato para EndNote o Zotero desde el Apartado Envíos en la web de la revista *Anales de Química de la RSEQ*. Mendeley lo incluye en su lista de estilos predefinidos.

Las citas bibliográficas siguen el sistema numérico. Para ello, se debe insertar el número correspondiente a la referencia bibliográfica entre corchetes y como superíndice, a continuación del signo de puntuación y sin espacio ([¹]). Dicho número se repetirá siempre que el mismo recurso sea citado en el texto. Si la cita corresponde a una página exacta del texto, a continuación del fragmento citado se indicará la página entre paréntesis y antes del signo de puntuación (p.5).^[1] Las citas incluidas en tablas y las incluidas en los pies de las figuras y tablas forman parte del texto y no se ponen como superíndice (Figura extraída de la ref. [1]) o (Datos tomados de la ref. [1]).

Las referencias bibliográficas se numeran según el orden por el que se citan en el texto por primera vez y cada número de referencia debe estar entre corchetes. Se debe citar una única obra por referencia bibliográfica. Dado que hay flexibilidad en la extensión del artículo, no se deben acumular las referencias en un mismo número de cita.

Siempre que esté disponible, se deben incluir el DOI de la obra.

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

[1] <Artículo de revista> N. Apellidos 1, N. Apellidos 2, N. Apellidos 3, N. Apellidos 4, *Título de la revista abreviado Año*, v, pp-pp, <https://doi.org/10.xxxxx/xxxxxxx>.

[2] <Artículo de revista en preimpresión> N. Apellidos, *Título de la revista preimpresión Año*, <https://doi.org/10.xxxxx/xxxxxxx>.

[3] <Artículo de revista aceptado> N. Apellidos, *Título de la revista*, aceptado, <https://doi.org/10.xxxxx/xxxxxxx>.

[4] <Libro> N. Apellidos 10, *Título del Libro*, Editorial, Lugar de publicación, **Año**.

[5] <Capítulo de libro> N. Apellidos 1, N. Apellidos 2, en *Título del libro*, vol. v (Eds.: N. Apellidos, N. Apellidos), Editorial, Lugar de publicación, **Año**, pp. p-p.

[6] <Patente> N. Apellidos (Institución responsable), Número de la patente, Año.

[7] <Tesis> N. Apellidos, Tipo de tesis, Universidad, Año.

[8] <Recurso de internet> N. Apellidos "Título del artículo web," disponible en <https://www.URL.xx>, Año (consultado: dd/mm/aaaa).

[9] <Citas de datos> N. Apellidos, Año, Título del dataset, Nombre del repositorio o archivo de datos, versión, <https://doi.org/10.xxxxx/xxxxxx>.

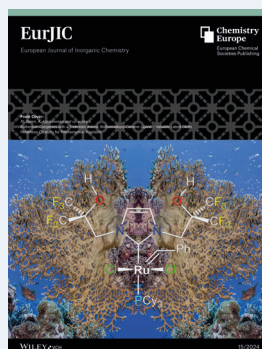
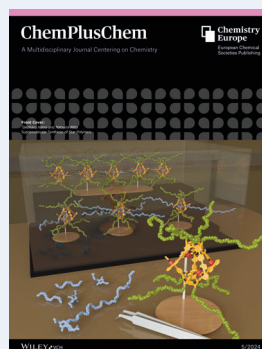
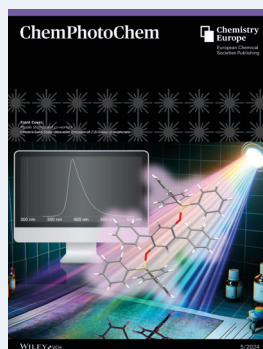
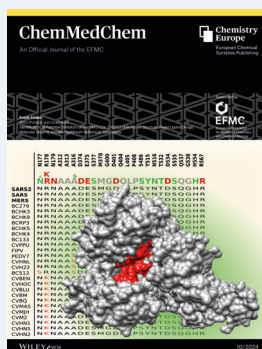
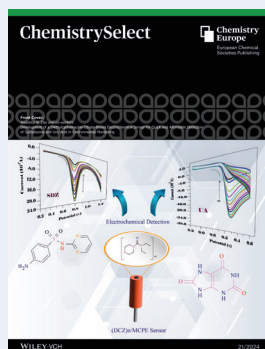
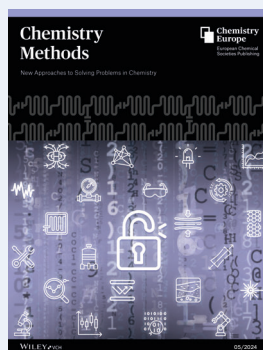
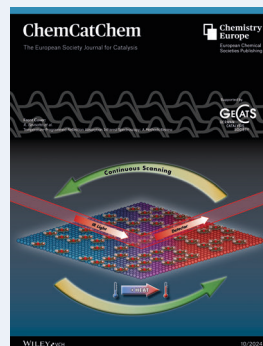
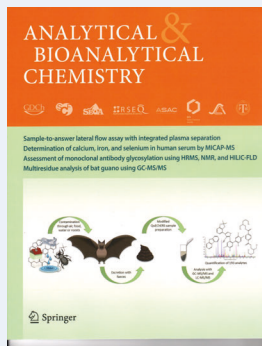
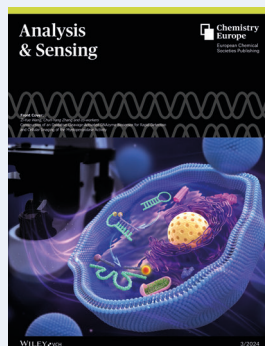
[10] <Programas> N. Apellidos. Nombre del programa, Institución, Lugar de Publicación (País), Año.

Los nombres de las revistas deben abreviarse de acuerdo con el Chemical Abstracts Service Source Index (CASSI) <https://cassi.cas.org/search.jsp>.

Reseña de los autores: Al final del documento se indicará el nombre completo de cada uno de los autores, su fotografía, filiación, dirección postal completa, correo electrónico, ORCID y síntesis biográfica de no más de 100 palabras.

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.

Revistas patrocinadas por la Real Sociedad Española de Química



Cylinder-Free Hydrogenation

H-Genie® Lite: On-Demand Hydrogen Generator

Replace cylinders and reduce risks with the H-Genie® Lite, a high-pressure smart hydrogen generator. The H-Genie® Lite can generate hydrogen from water up to 50 bar (725 psi) on demand; offering a safe, simple, compact alternative to cylinders.



Key Features

- Hydrogen generation from deionized water – no cylinders needed
- High pressure to expand your chemistry capabilities
- Compatible with any reactors and balloons
- Simple setup and use: Click & go
- Run multiple reactors with one H-Genie® Lite
- Compact footprint to save space
- Internal hydrogen detector for improved safety

Benefits of H-Genie® Lite Technology

- **Safe** The H-Genie® Lite is equipped with built-in internal hydrogen leak detectors.
- **Simple** The H-Genie® Lite can generate hydrogen from deionized water with a simple click and go. It's compatible with any reactors and balloons; in addition, you can run multiple reactors with one H-Genie® Lite.
- **Compact** The H-Genie® Lite can easily fit in any fume hood with its compact size and can be relocated around the lab as needed.



The Life Science business of Merck operates as MilliporeSigma in the U.S. and Canada.

© 2022 Merck KGaA, Darmstadt, Germany and/or its affiliates. All Rights Reserved. Merck, the vibrant M, Sigma-Aldrich, and H-Genie Lite are trademarks of Merck KGaA, Darmstadt, Germany or its affiliates. All other trademarks are the property of their respective owners. Detailed information on trademarks is available via publicly accessible resources.

MK_FL11589EN Ver. 1.0 45062 10/2022

