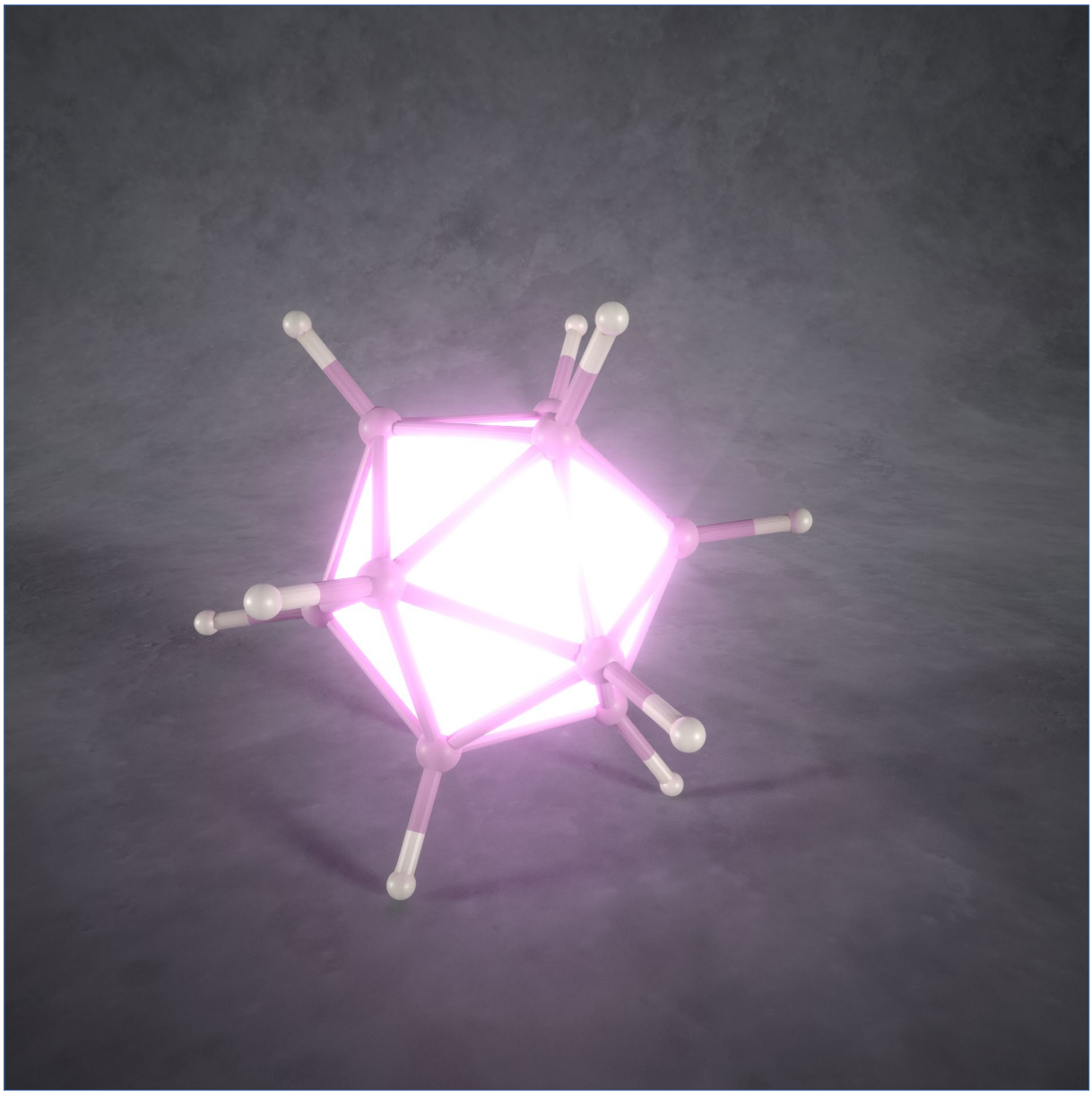
ISSN: 2792-520X

Anales de Química de la RSEQ

La revista de la Real Sociedad Española de Química

Vol. 121 • Nº 1 • www.analesdequimica.es



DOI: 10.62534/rseq.aq.121.1

RSEQ Real Sociedad Española de Química

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.

Editora Ejecutiva

Bibiana Campos Seijo

Comité Editorial

Fernando P. 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 Uria
Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la Universidad del País Vasco.

Otilia Val-Castillo
IES Lluís Simarro Lacabra, Xàtiva (Valencia).

Secretaria Editorial

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

www.analesdequimica.es
administracion@analesdequimica.es

Anales de Química de la RSEQ

RSEQ Real Sociedad Española de Química

Entidades colaboradoras

Miembros corporativos

Anales de Química de la RSEQ
Volumen 121 · Número 1 · enero-marzo 2025

SUMARIO



Diseño y maquetación:
Ostraca Servicios editoriales

Ilustración portada:
Eugenio Vázquez Sentís

An. Quím. RSEQ, 121 (1), 2025, 1-74
ISSN: 2792-520X
e-ISSN: 2792-5250
D. L.: M-232-1958

Carta del editor
Juan Á. Casares 4

Ensayo
¡Qué grande es Avogadro!
José Elguero 5

Mesa redonda
La Inteligencia artificial en la investigación química con David Balcells, Sílvia Osuna e Israel Fernández
Jesús Campos y Uxue Uria 6

Investigación química
Pincelando nuevos horizontes en salud de precisión con tecnologías (bio)electroanalíticas vanguardistas
Susana Campuzano, Rebeca M. Torrente-Rodríguez, Víctor Ruiz-Valdepeñas Montiel, Eloy Povedano, Ana Montero-Calle, María Garranzo-Asensio, María Gamella, Verónica Serafín, María Pedrero, Rodrigo Barderas y José M. Pingarrón 11

Boro: de sus orígenes en el desierto a aplicaciones pioneras en energía, materiales y medicina
Clara Viñas i Teixidor 19

Enseñanza de la química
Errores sobre los criterios de espontaneidad y de equilibrio químico
Juan Quílez 25

La química que se esconde en las tabletas efervescentes
Fernando de Prada Díaz de Azpeitia 32

Historia de la química
50º aniversario del Instituto de Química Médica (IQM-CSIC)
José Elguero 38

50 años de la Facultad de Química en Donostia / San Sebastián. De una iniciativa social a la semilla de una ciudad de Ciencia
Juan J. Iruin y Jon Matxain 42

A todo color: los tintes a través de la historia
Juan José Serrano Pérez 47

Breve estudio histórico sobre el sentido del momento dipolar eléctrico en química
Juan Quílez 57

Imágenes de la química
Erlenmeyer y su matraz
Santiago Álvarez 62

Reseña 67

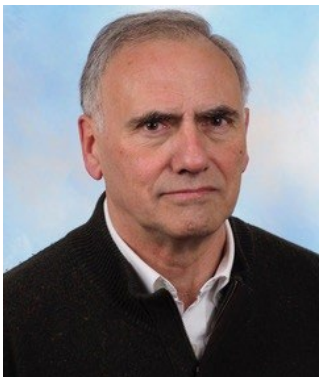
Noticias 68

Obituario
Profesor Julio González Urones 73

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 4
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2027
La revista de la Real Sociedad Española de Química

Carta del editor

Juan Á. Casares



Juan Á. Casares.

Todas las sociedades científicas dedican un esfuerzo muy importante a la educación en la materia de que se ocupan. La RSEQ está muy implicada en el desarrollo de la educación en Química, y el sitio web de la RSEQ, en su apartado "Recursos", publica material de utilidad a los profesores. En nuestro caso, en prácticamente cada número se publican artículos en la sección de "Enseñanza de la química", muchos de ellos orientados a la enseñanza pre-universitaria. En éste número tenemos dos, el primero discute y corrige algunos errores comunes en la enseñanza relacionada con los equilibrios químicos, y el segundo propone un ejemplo de "química cotidiana" para ilustrar algunas reacciones importantes. Al margen del esfuerzo de la RSEQ como institución, y a pesar de ello, se echa de menos una mayor implicación de (nosotros) los docentes a la hora de compartir y discutir aspectos relacionados con la docencia. Esto es bastante paradójico porque no conozco ni un solo químico profesor universitario o de enseñanza secundaria que minusvalore la docencia, al contrario, en general la ponemos en el centro de nuestros intereses y le dedicamos mucha atención. Pero aparentemente muy pocos estamos muy interesados en hablar, y menos en escribir, acerca de ella. Todo tiene su origen. Recuerdo que los científicos de mi generación tuvimos profesores que apenas si investigaban, en aquellos tiempos hacer investigación era muy difícil, así que la mayoría se dedicaban a la docencia y a nada más. A partir de mediados de los años 80 se impulsó la investigación y se aceptó como criterio principal de selección de profesorado la excelencia investigadora, lo que era y es muy necesario, sin duda. Pero esto ha tenido un terrible efecto colateral: Los buenos investigadores, que casi siempre son también magníficos profesores, consideran contraproducente para su currículo emplear tiempo y recursos en dar a conocer su faceta docente. Otros factores han ayudado a este desprestigio injusto. La implantación del "Plan Bolonia" vino de la mano de una jerga pedagógica empalagosa y de unos cambios en la metodología docente no siempre bien justificados y casi siempre mal ejecutados. De su mano, la brecha entre "pedagogos" y "científicos" no ha hecho más que crecer, y parece que los "pedagogos" se han quedado solos del lado de las innovaciones en docencia y los "científicos", por más que sean también docentes, solo con las publicaciones científicas. Para empeorar las cosas la partición de la docencia en áreas de conocimiento estanco las convierte en áreas estancadas, a pesar de que muchos de los profesores que las imparten hacen investigación claramente multidisciplinar.

La única forma de cambiar este estado de cosas es que quienes tenemos que ver con la docencia hablemos de ella, la discutamos. En química están cambiando demasiadas cosas como para no incorporarlas a la docencia (la universitaria y la no universitaria) y con seguridad muchos profesores lo están haciendo. Y los profesores estamos cambiando la docencia porque tenemos a mano herramientas que permiten resolver problemas y analizar ejemplos impensables hace 20 años. Tenemos programas de visualización 3D de estructuras moleculares, videos de toda clase, programas de simulación de reacciones químicas, de cálculo de orbitales moleculares etc. Continuamente aparecen nuevas reacciones, nuevos materiales, el conocimiento de los mecanismos de reacción sufre cambios importantes cada año, y la disponibilidad de instrumentos de espectroscopía y de determinación estructural no espectroscópica al alcance de nuestros alumnos también ha aumentado enormemente. Los planteamientos docentes de cualquier asignatura cambian de forma continuada, ¿por qué no compartirlos? Anales espera sus contribuciones.

Además de los interesantes artículos relativos a la enseñanza de la química citados arriba, en este número de Anales tenemos un resumen del diálogo que Uxue Uría y Jesús Campos han mantenido con Israel Fernández, Sílvia Osuna, y David Balcells acerca de la inteligencia artificial. El formato es interesante y tiene vocación de continuidad, permite una discusión ágil y una reflexión colectiva acerca de los temas tratados. Agradezco a todos los participantes su dedicación y sus interesantes aportaciones, y a Uxue Uría y Jesús Campos la iniciativa de tratar este tema y la elaboración del artículo. También quiero agradecer a José Elguero su bonita reflexión acerca de la necesidad de ponderar la magnitud del número de Avogadro cuando nos planteamos pasar del mundo microscópico de las moléculas al de las medidas y cálculos de magnitudes macroscópicas, y el haber compartido su conferencia dedicada al 50 aniversario del IQM. Como siempre hace él, invita a la reflexión y abre la mente a preguntas interesantes. Y a Santiago Álvarez sus hermosas "Imágenes de la química", esta vez dedicadas al icónico matraz erlenmeyer. El número incluye también dos excelentes artículos de investigación, uno relativo a tecnologías (bio) electroanalíticas y otro dedicado a la siempre apasionante y un tanto misteriosa química del boro, así como cuatro sobre historia de la química. Espero que les guste.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 5
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2024

La revista de la Real Sociedad Española de Química

ENSAYO

¡Qué grande es Avogadro!

How great is Avogadro!

José Elguero*

Instituto de Química Médica, CSIC.

PALABRAS CLAVE:
Navier-Stokes
Gota de agua
Avogadro

RESUMEN:
El texto muestra un ejemplo de la dificultad de abordar el estudio de fenómenos microscópicos con herramientas diseñadas para el estudio de moléculas como consecuencia de la magnitud del número de Avogadro.

KEYWORDS:
Navier-Stokes
Drop of water
Avogadro

ABSTRACT:
The text is an example of the difficulty of studying microscopic phenomena with tools designed for the study of molecules, due to the magnitude of Avogradro's number.

Introducción

Uno de los grandes problemas matemáticos a cuyo avance ha contribuido un español, Diego Córdoba, es la relación que hay entre una gota de agua y las ecuaciones de Navier-Stokes (véanse sus conferencias en la red, Real Academia de Ciencias y CSIC-La Residencia de Estudiantes)[1,2,3] ¿Es posible abordar dicho problema por medio de la química computacional?

Para que una gota se desprenda de su "pedúnculo" hay que romper muchos enlaces de hidrógeno. ¿Cuántas moléculas de agua son necesarias para que la gota pese tanto que se rompan los enlaces de hidrógeno, se desprenda del resto y caiga? Es un problema clásico-cuántico.

Hoy en día se pueden realizar cálculos teóricos de hidratos, solvatando diferentes moléculas, hasta con 500.000 moléculas de agua.[4] Es pues factible pensar en cálculos que impliquen un millón (10^6) o cien millones (10^8) de moléculas de agua.

¿Pero cuántas moléculas de agua hay en una gota? En la red se encuentra una respuesta aproximada, pues la masa de una gota de agua es un valor que tiene mucha variabilidad. Se estima en 0,065 g. El número de Avogadro dice que hay 6,023 x 10^{23} moléculas de agua en 18,02 g; es decir, 2,173 x 10^{21} moléculas en una gota. Se llega al mismo resultado si se sabe una molécula de agua pesa ≈ 3x10^{-23} g.

El número de Avogadro es tan grande que nos encontramos muy lejos de 10^6, 10^8, 10^{10}, … y por lo tanto de un cálculo teórico explícito.

Bibliografía

[1] D. Córdoba, "En plena carrera para resolver uno de los problemas del Milenio: ¿existen singularidades para Euler y Navier-Stokes?" RACEFyN, disponible en https://www.youtube.com/watch?v=9syabVS-VhU, 7 feb. **2024** (consultado: 13/02/2025).

[2] D. Córdoba, "Formación de singularidades en la dinámica de fluidos: torbellinos y gotas", CSIC y Residencia de Estudiantes, disponible en https://residenciadeestudiantes.com/actividades/formacion-de-singularidades-en-la-dinamica-de-fluidos-torbellinos-y-gotas, 16 abr. **2024** (consultado: 13/02/2025).

[3] D. Córdoba, M. A. Fontelos, J. L. Rodrigo. *La Gaceta de la RSME*, **2005**, *8*(3), 565–595.

[4] B. Ruscic, R.E. Pinzon, G. von Laszewski, D. Kodeboyina, A. Burcat, D. Leahy, D. Montoy, A.F. Wagner, *J. Phys.: Conf. Ser.* **2005**, *16*, 561–570, https://doi.org/10.1088/1742-6596/16/1/078.



José Elguero Bertolini

Instituto de Química Médica, CSIC, Juan de la Cierva, 3, E-28006 Madrid

C-e: iqmbe17@iqm.csic.es
ORCID: 0000-0002-9213-6858

Licenciado (Universidad Central, 1957) y Doctor en Ciencias Químicas (Universidad de Montpellier, 1961; Universidad Complutense, 1971). Investigador del CNRS (1959-1979). Profesor de Investigación del CSIC (1980-2005). Profesor Emérito del Instituto de Química Médica del CSIC (desde 2005). Presidente de la Real Academia de Ciencias Exactas Físicas y Naturales entre 2015 y 2018. Presidente del Consejo Social de la Universidad Autónoma de Madrid (1986-1990); presidente del Foro Química y Sociedad (2008-2010). Miembro del Comité Científico Internacional del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona) (2007-2011). Autor de unos 2045 trabajos entre artículos científicos, libros, capítulos de libros, artículos de divulgación, entrevistas y discursos.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: J. Elguero. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 5, https://10.62534/rseq.aq.2024

* C-e: iqmbe17@iqm.csic.es

Manuscrito recibido: 27/02/2024 · aceptado: 10/03/2025

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 6-10
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2023
La revista de la Real Sociedad Española de Química

MESA REDONDA

La Inteligencia artificial en la investigación química

Mesa redonda con los investigadores David Balcells, Sílvia Osuna e Israel Fernández

Jesús Campos[1] y Uxue Uria[2]

[1] *Instituto de Investigaciones Químicas (IIQ) CSIC, Universidad de Sevilla*

[2] *Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Universidad del País Vasco (UPV/EHU)*

[2] *Comité editorial Anales de Química de la RSEQ*

La inteligencia artificial (IA) está revolucionando tanto la investigación como la industria química gracias al avance vertiginoso que está experimentando en los últimos años. Muchos analistas predicen que su impacto será mayor que el obtenido previamente con Internet. Queda patente que la IA ha modificado la forma en la que los químicos de hoy en día hacen frente a problemas complejos, empleando algoritmos que aceleran el diseño molecular, predicen la toxicología y las relaciones estructura-actividad, facilitan la optimización de reacciones químicas, hasta laboratorios automatizados en los que robots inteligentes mejoran los resultados experimentales con un alto grado de autonomía. Así pues, su impacto parece extenderse prácticamente a la totalidad de la ciencia química. Un claro ejemplo del alto impacto que ha proporcionado en diferentes áreas es la concesión de la mitad del Nobel de Química por el uso de IA para predecir la estructura de proteínas y para el diseño de nuevas proteínas, así como el Premio Nobel de Física al desarrollo de redes neuronales. En esta mesa redonda, tenemos la suerte de contar con David Balcells, Sílvia Osuna e Israel Fernández, profesores de las universidades de Oslo, Girona y Complutense de Madrid, respectivamente, y líderes internacionales en diversas áreas de la química computacional y la inteligencia artificial.

Muchas gracias por estar hoy con nosotros. Volviendo a los Premios Nobel de este año, ¿esperabais que ambos premios se centraran en el desarrollo y uso de la inteligencia artificial?

David: Sí que me esperaba un premio Nobel centrado en este tema tan importante, aunque no tan pronto. Lo que más ha impactado a mis colegas físicos, es que los premios en parte fueran destinados a informáticos, como es el caso de Geoffrey Hinton en física y Demis Hassabis en química. Creo que esto refleja el carácter realmente multidisciplinar de esta investigación y la necesidad de un grupo multidisciplinar de personas para trabajar en este campo.

Israel: Creo que a los químicos no nos ha impactado tanto porque ya estamos acostumbrados a que se concedan a investigadores que no son estrictamente del área. Los últimos años no ha sido así, pero antes, los premios Nobel de química se destinaron a biólogos o biólogos moleculares. En física están acostumbrados a que se lo otorguen a físicos o físico-matemáticos y de ahí la controversia generada. No obstante, uno se puede esperar cualquier cosa desde que le dieron a Bob Dylan el premio Nobel de literatura. De todas maneras, era hasta cierto punto predecible que el desarrollo del programa Alpha-Fold2 recibiera un gran reconocimiento, debido al impacto innegable que ha tenido (y tiene) en la comunidad científica y en la sociedad. Lo discutible podría haber sido el área asignada al premio, por ejemplo, medicina en vez de química. De hecho, anteriormente, los premiados también fueron galardonados con el BBVA-Fronteras del Conocimiento en biología y biomedicina dado que el de química no existe.

Sílvia: Otro aspecto que ha sorprendido mucho es que la mitad del Nobel de química fuese para una empresa, aunque ésta es la realidad de hoy en día. Hay muchas compañías con un interés elevado en investigar en el campo de diseño de proteínas y análisis de secuencias mediante la aplicación de la IA y de ahí el premio Nobel destinado a éstos.

¿Creéis que en el futuro los Premios Nobel no serán principalmente para físicos, químicos, médicos o literatos, sino que cada vez existirá un porcentaje mayor para informáticos?

David: Creo que la academia sueca debería revisar los premios, expandir o redefinir disciplinas, como puede ser Ciencia Computacional (*Computer Science*). Un ejemplo, puede ser la medalla Fields en matemáticas, premio equivalente al Nobel.

¿Cuál es la ventaja primordial de la IA como herramienta?

Sílvia: El avance que ha sufrido la generación de modelos para predecir la estructura de proteínas ha sido espectacular. En el campo de diseño de proteínas, lo que antes se hacía en años, ahora se puede hacer mucho más rápido y además con la certeza de que los modelos generados son precisos. A los científicos que trabajamos en este campo nos ha cambiado la vida de manera positiva. Eso sí, ahora se han involucrado cantidad de empresas grandes con recursos y financiaciones

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Los humanos somos seres inteligentes, y la IA puede aumentar esa inteligencia. Por supuesto, lo mismo ocurre con la estupidez.

mucho mayores a las nuestras, como es el caso de DeepMind. Ellos nos han enseñado que son capaces de desarrollar una red neuronal que funciona muy bien en poco tiempo. En definitiva, es un lujo poder estar trabajando en este campo de tanto interés con la ventaja de tener todas las herramientas que han estado creando, aunque exista una gran competencia y los académicos no podamos competir frente a estas empresas.

Israel: Nunca vamos a poder competir academia con empresa. Nosotros, incluso con la máquina más potente, podemos tardar un par de días en obtener el resultado de un cálculo, pero ese tiempo para una empresa es una barbaridad. Ellos lo pueden (lo necesitan) conseguir en 10 minutos. Queda patente que la IA es una herramienta potente y que, por supuesto, es positivo el avance que ha generado y el tiempo que nos ahorra para llegar al objetivo deseado.

David: En general veo mucho escepticismo con la inteligencia artificial, pero yo soy optimista. Los humanos somos seres inteligentes y la IA puede aumentar esa inteligencia. Por supuesto, lo mismo ocurre con la estupidez. Creo que es positivo que las empresas estén más implicadas en el campo. La química teórica y computacional era de frikis, incluso dentro del mundo de la química. Pero ahora, Google y otras grandes empresas han puesto este campo en el centro, haciendo química teórica y computacional a un nivel muy avanzado. Cuando viene un estudiante o un postdoc a mi grupo, en ocasiones su ambición es ir a trabajar a una de estas empresas y desean formarse en ese sentido. Desde un punto de vista formativo, y teniendo en cuenta que la mayoría de estudiantes van a ir al sector privado / industrial, la implicación de una mayor cantidad de empresas es una buena noticia. En cuanto a las ventajas que nos ofrece la IA como herramienta, decir que nosotros estamos en el campo de la exploración del espacio químico y evidentemente es alucinante lo que puedes hacer con estos modelos. Es decir, si antes teníamos en mente explorar decenas o centenares de sistemas, ahora puedes explorar decenas de miles o incluso espacios con billones de sistemas. También pueden existir problemas dado que es necesario un uso responsable de los grandes modelos de lenguaje y se debe evitar el uso dual. No obstante, está en nuestras manos realizar un uso adecuado, de momento aún somos nosotros los que tenemos el control.

Recordemos que la mitad del Premio Nobel ha sido para una empresa. ¿Hasta qué punto está en nuestras manos que esta herramienta/tecnología sea para tener un futuro mejor y no lo contrario?

Sílvia: Muchos investigadores hemos firmado la iniciativa de realizar un uso responsable de la IA para una aplicación positiva, y no para recursos militares o armas. De todas formas, es un tema delicado porque en el listado de firmantes hay muchos académicos, pero necesitamos que las empresas también tengan el mismo compromiso.

Israel: Hay que tener mucho cuidado porque el problema son *los malos* que siempre están ahí. De hecho, uno de los inventores pioneros en el desarrollo de la IA se está echando para atrás y pide una legislación clara y rigurosa (no vayamos a acabar como con Skynet en Terminator…).

Las licencias y la regulación de las mismas es un debate recurrente. Hay modelos completamente abiertos, algunos abiertos pero con restricciones de uso, otros accesibles sólo a través de servidores… ¿Qué opináis, publicación en abierto o con restricciones?

Sílvia: En el caso concreto de Alpha-Fold2, que se hiciera público ha sido la clave de todo y, de hecho, creo que ha sido el detonante para tener el Premio Nobel. Gracias a que la gente lo ha empleado en multitud de diferentes casos y para diferentes fines, se ha podido demostrar su potencial e impacto.

Israel: Es un negocio, al igual que ocurre con las revistas cuando se publica en abierto o pagando. Si lo publicas en abierto, desde luego tienes el peligro de que se emplee con fines maliciosos, pero ya está accesible para todo el mundo y siempre habrá alguien que lo use con fines positivos. Supongo que una cosa debería compensar la otra.

David: Yo también estoy totalmente a favor de la aproximación en abierto. Creo que para que haya colaboración y verificación, las licencias tienen que ser abiertas. En mi opinión el peligro está en la industria, donde las licencias pueden suceder en cerrado, pero es algo que se ha de respetar. En todo caso, son las instituciones públicas gubernamentales las que deben replantearse por qué esa investigación puntera está sucediendo en empresas y no en entidades públicas. Igual debería invertirse más o hacer un cambio de políticas. Por otro lado, en el modelo abierto puede haber riesgos, como el uso dual de modelos para hacer armamento químico, pero imagino que hacen falta unos recursos que no son tan fáciles de conseguir. Sin duda hay un peligro, pero igual el peligro no es tan inminente o grande como quizás algunas personas piensan.

Cuando se trabaja con IA se necesita una gran cantidad de datos para realizar el entrenamiento, siendo la calidad de los mismos directamente proporcional a la eficacia del algoritmo. ¿Hasta qué punto son fundamentales los datos que empleamos para que los resultados sean relevantes?

David: Éste es un tema crítico. Normalmente estas metodologías brillan con gran cantidad de datos, y no solo el tamaño es importante, sino su complejidad también. Además, existen otras cuestiones importantes, como el coste energético. Al menos en química teórica y computacional, muchas veces trabajamos con datos sintéticos que hay que generar con el coste energético que ello conlleva: almacenar esos datos y tener un acceso continuado de los mismos. Pero en *Machine Learning* no todo son redes neuronales, hay otros métodos que pueden ser eficientes con pocos datos, como los procesos gaussianos. De hecho, desarrollar modelos que sean precisos, transferibles y que se puedan entrenar u optimizar con pocos datos, es un campo de investigación muy activo en IA.

Israel: El éxito del Alpha-Fold2 se debe a que está basado en unos datos muy fiables como es la base de datos de proteínas

© 2025 Real Sociedad Española de Química

http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2023

(*Protein Data Bank*)) donde hay más de 300000 estructuras. El problema se genera cuando no existen los datos. Yo soy de ascendencia orgánica sintética y nosotros publicamos los buenos resultados, pero lo que no sale, suele acabar en cuadernos de laboratorio que permanecen en completa oscuridad. No obstante, para la IA estos resultados son igual de relevantes y por eso tenemos un problema. Es decir, ¿ahora vamos a obligar a la gente a publicar absolutamente todo? Creo que no damos abasto ni siquiera a publicar los resultados buenos, como para poner los malos. Es más, los que se dedican a hacer cálculos, ¿deben hacer sólo cálculos para sacar datos?, ¿Vamos a trabajar para la gente que se dedica a la IA? No lo veo, eso no es química, o al menos, no la química que me gustaría hacer.

Sílvia: En efecto, Alpha-Fold2 se pudo generar gracias a *Protein Data Bank*. Esta base de datos está bien estructurada, todo el mundo desea incluir sus estructuras nuevas y gracias a este compromiso se ha convertido en una referencia de organización. Pero cuando uno no quiere sólo estructura sino que quiere función, es mucho más complejo porque los datos tienen que ser comparables y de calidad para que puedan servir para entrenar otra IA. Por ejemplo, en el caso de enzimas, si intentas reproducir en tu laboratorio datos cinéticos de un artículo, los resultados pueden ser ligeramente diferentes, lo que conlleva una complejidad añadida.

Comentabais que el trabajo de años se puede hacer ahora en pocos días gracias a Alpha-Fold2. Por lo tanto, estratégicamente, ¿no sería más coherente dedicarnos a generar una gran cantidad de datos de buenísima calidad para tener próximamente un "Alfa function" y así acelerar nuestro desarrollo científico?

David: El problema que existe con la generación de datos es que puede ser un trabajo técnico más que de investigación. De hecho, ahora estamos intentando diseñar centros de investigación en Noruega para IA y en las secciones dedicadas a datos no sabemos qué perfil de personal asignar, si químico o informático.

¿Es demasiado aburrido el trabajo de generar grandes cantidades de datos para alimentar la máquina?

David: Generar datos conlleva diseñarlos. Es decir, cuando trabajas con un espacio químico, hay que pensar muy bien el patrón que genera ese espacio químico, el método que se usa, la evaluación de la calidad de los datos, la actualización, cómo se exponen y transfieren, hay que documentarlo. Este proceso puede implicar desarrollo de inteligencias artificiales para, por ejemplo, automatizar la generación de estructuras. Además, se debe automatizar todo: la producción de los datos, su filtrado, análisis y la solución de problemas. Cuando trabajas a esta escala, normalmente tienes errores con miles de cálculos, y entonces hay que desarrollar unos métodos para recuperar esos cálculos. En definitiva, no es tan rutinario y estándar como puede parecer y posee elementos de investigación, aunque quizá no sea el elemento más excitante de un proyecto, pero sí muy importante.

La creatividad es la base del arte y también es la base de todo lo que hacemos en investigación...
esta creatividad es la que ninguna IA nos puede enseñar ni puede hacer

¿Corremos el riesgo de perder la belleza, el arte de la exploración química porque le cederemos la capacidad de desarrollar ese arte a la máquina?

David: Yo creo que hay mucha belleza y arte en las máquinas y también exploración y experimentación en el desarrollo de algoritmos de inteligencia artificial. Además, tienen que conectar con la química tanto desde un punto de vista experimental como teórico.

Israel: Discrepo en la concepción de arte. Para mí, ni la química, ni la síntesis ni mucho menos un algoritmo, son arte. Pueden ser bellos o incluso despertar cierta emoción, pero no entran dentro de mi concepción de arte. Pero bueno, esto puede ser debido a mi educación musical clásica…En cualquier caso, sí que creo que la máquina nos puede quitar parte de esa emoción química.

Sílvia: Estoy de acuerdo, no nos vamos a emocionar con un nuevo algoritmo (aunque tengo que reconocer que sí me emociono cuando funcionan las enzimas que diseñamos), pero la creatividad es la base del arte y también es la base de todo lo que hacemos en investigación. Desde mi punto de vista esta creatividad es la que ninguna IA nos puede enseñar ni puede hacer. La creatividad de combinar o diseñar diferentes herramientas para conseguir un objetivo. Realmente creo que hay una creatividad y una belleza detrás de todo lo que hacemos. Yo lo quiero ver así. La IA exclusivamente sabe lo que le has dado para entrenar, por lo que no va a predecir algo muy innovador. Por ejemplo, en Drug Discovery, la IA sí te va a dar moléculas, pero seguramente no van a ser muy originales. Entonces, yo creo que lo que tenemos que hacer es combinar: aprovecharnos de lo que la IA hace muy bien, como analizar datos complejos, y nosotros continuar con la creatividad, el diseño de proyectos y las partes más químicas. No creo que la IA tenga poder en este sentido.

Bueno, indirectamente puede que sí tenga poder. La IA puede ser una herramienta que facilita/desarrolla mucho ciertos campos de trabajo, haciéndolos más atrayentes para nuevas investigaciones.

Israel: Sí, claro que tiene poder. Es una herramienta muy poderosa que deberíamos empezar a usar para expandir nuestra creatividad, pero no para limitarla. Si hacemos lo contrario estamos acabados. Como se ha comentado anteriormente, debemos emplear la IA para potenciar nuestra inteligencia, aunque no sabemos si esto puede significar que el homo sapiens puede evolucionar todavía más. ¡Ojala! Ahora mismo estoy enseñando retrosíntesis orgánica al estudiantado de tercero, y me he dado cuenta que *Scifinder* tiene directamente una herramienta para ello. He metido diferentes moléculas objetivo y, menos una, todas las retrosíntesis han sido perfectas. Entonces, ¿es necesario enseñar estos conceptos? Yo creo que *Scifinder* te da el resultado lógico, pero no va a poder darte una retrosíntesis creativa e innovadora. No creo que la IA pueda predecir una reacción nueva.

David: No, no creo que pueda. Donde la IA tiene mucho potencial es en problemas combinatorios, en sistemas químicos que se

© 2025 Real Sociedad Española de Química

construyen a bloques, como puede ser un complejo metálico o un MOF. No va a ser una herramienta que sustituya al químico humano, pero sí una herramienta potente para trabajar con gente muy diferente y para el descubrimiento de nuevos compuestos químicos y materiales. Otro campo muy activo donde la IA se aplica a las ciencias física y química es cuando se implementan los principios de estas ciencias dentro del modelo, de tal manera que la predicción del modelo sea consistente con las leyes ya conocidas. Pero creo que para la IA, los conceptos fundamentales, como podrían ser nuevas reacciones o enlaces químicos, son problemas frontera aún. Uno de los retos en modelos generativos es que el *output* tenga sentido químico, es decir, que un modelo, no te dé carbonos con valencia siete u ocho.

Siempre enfatizas que todavía no se puede, dejando la puerta abierta al futuro.

David: En los últimos años ha habido muchos desarrollos que antes eran impensables. Esto no se va a parar. Sobre todo, cuando hay un interés muy importante, no solo a nivel académico, gubernamental y por parte de las entidades públicas, sino también por las grandes empresas. Sin duda, en 5 ó 10 años se podrán hacer cosas que hoy parecen, sino impensables, como mínimo, muy difíciles.

Y ¿Qué seremos capaces de hacer dentro de esos años?

David: En mi opinión son tres los temas que tienen futuro pero que aún hoy en día son muy difíciles. 1) Modelos generativos multiobjetivo. Muchos problemas de la química son multiobjetivo, como tener que optimizar la actividad, la robustez y la selectividad de un proceso. O en cromóforos, necesitar una absorción intensa y amplia, además de que sea soluble en agua. Por ello, se necesitan modelos generativos donde tú especificas los objetivos que quieres, y el modelo te predice la molécula o el material. Hay algún modelo que empieza a hacer predicciones en este sentido, aunque todavía está lejos. 2) Integrar la IA en sistemas robóticos que operen de manera autónoma y remota en laboratorios. 3) Combinar aprendizaje evolutivo, como son los algoritmos genéticos, con *Deep Learning* (redes neuronales) y otros métodos de *Machine Learning*. Son dos campos que han ido bastante separados pero que podrían funcionar de manera sinérgica por tener propiedades complementarias.

Sílvia: Yo creo que el futuro es la combinación de modelos basados en datos y en principios físicos. Además, tal y como decía David, los sistemas multiparamétricos son muy difíciles de solventar, como ocurre en catálisis o en sistemas complejos como proteínas. En mi campo en concreto, en el diseño de enzimas, viendo todo el interés que se ha generado se va a avanzar mucho en los siguientes años y obviamente la IA va a tener un papel muy relevante.

Israel: La IA es una herramienta muy potente que va a usar muchísima gente, y por supuesto, no sólo químicos computacionales. Frank Glorious (Universidad de Münster) es un claro ejemplo, empleando la IA para seleccionar el ligando que mejore los excesos enantioméricos obtenidos en una reacción. Esto creo que es el futuro, emplear la IA como complemento. Creo que seguiremos haciendo química, pero ayudada por la IA. Me recuerda a cuando salieron los primeros cálculos, cuando la gente pensaba que ya no se harían más cinéticas y, no obstante, a día de hoy todavía casi todos seguimos haciéndolas. En definitiva, creo que la IA será una herramienta que utilizaremos cada vez con más asiduidad, y que nos formaremos todos en ella, aunque no todos queramos.

Teniendo en cuenta todo lo tratado hasta ahora y al hilo de la formación que comentáis que necesitaremos, ¿creéis que la docencia universitaria debería adaptarse a esta nueva era e incluir conceptos relacionados con la IA?

David: Totalmente, los químicos del presente tienen que saber programar y la IA es la excusa perfecta para incluirlo en los programas docentes. Además, debería ser relativamente sencillo, pues se trata de un campo muy abierto en Internet a nivel tanto de código como de datos. No obstante, mi impresión es que, en Europa, aún falta avanzar mucho en este sentido. Yo creo que hay una cierta resistencia por parte del conjunto de docentes que hay en los centros y realmente no lo comprendo. La química es una ciencia eminentemente más experimental y puede que ésa sea la causa de esta resistencia. Además, hay muchos campos, no solamente teóricos o computacionales, sino que también experimentales, en donde la programación puede ser muy útil.

Sílvia: Desde mi punto de vista también es totalmente necesario. Cada vez más estudiantes se interesan por la programación o la IA y si hubiera una asignatura más centrada en ello, sería una buena forma de captar estudiantes para química. Yo recuerdo estar haciendo el doctorado en química computacional y que la gente me preguntase por qué no había escogido química orgánica, donde tendría una mejor salida para la industria. Hoy en día esta pregunta ya ni se plantea, quedando reflejado el cambio de mentalidad del estudiantado.

Israel: Yo estoy parcialmente de acuerdo. Si hubiese que incluirlo en la programación de una carrera de química, como mucho, lo incluiría en un máster muy especializado, jamás en el grado. Son muchos los conocimientos necesarios para formarse como químico y el tiempo que tenemos es, desgraciadamente, muy limitado. Estoy harto de escuchar a conferenciantes (normalmente jóvenes) muy buenos programando y prediciendo, pero con problemas en conceptos básicos como puede ser el postulado de Hammond, cosas que yo considero absolutamente básicas para un químico. Si hubiese más tiempo, por supuesto que incluiría una asignatura, incluso desde el primer curso, porque los estudiantes de hoy en día tienen capacidades tecnológicas infinitamente mejores a las que teníamos antes.

Sílvia: Pero la programación es algo que se puede aplicar en todos los campos de la química, por lo que sería realmente beneficioso tener una formación en ello.

Israel: Por esa misma razón creo que debería ser en un máster para formar una especialización con todas las aplicaciones posibles que pueda tener la IA dentro de la química. Teniendo en cuenta mi experiencia como docente, y tras comprobar el nivel de conocimiento de la gran mayoría de mis estudiantes, no veo posible reducir contenidos fundamentales para incorporar conceptos de IA en el grado.

David: Entiendo totalmente tu preocupación y creo que, si se enseña programación en el grado, hay que hacerlo conectándolo con la química. Esto es difícil y creo que hay poca gente que sepa hacerlo. No obstante, sé que grandes empresas como Astrazeneca, están desesperadas buscando gente que sepa programar, ciencia de datos, inteligencia artificial y, que además, sepa química. Éste es un perfil muy raro, muy difícil de en-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2023

contrar hoy en día, y creo que somos las universidades los que tenemos que pensar cómo cambiamos las cosas para que sea posible. Por ejemplo, el concepto *Hammett plots* perteneciente a química orgánica, se puede dar como un conjunto de datos que se puede plotear con Python. Es decir, puedes hacer una regresión lineal, el cual es un método de IA, con Python. También, en los últimos años han salido varios artículos fantásticos en *Journal of Chemical Education* sobre cómo implementar este tipo de contenidos en el trabajo experimental de laboratorio. Por ello, a pesar de ser difícil, yo creo que es posible y supongo que va a suceder, aunque sea mediante un proceso largo y complejo. Un problema adicional podría ser el nivel académico con el que llega el estudiantado a la universidad desde la educación básica, pero esto se escapa de nuestras capacidades.

Para terminar, una pregunta más cercana a los lectores de Anales, ¿cómo va a cambiar la vida diaria de un investigador que hace síntesis orgánica, inorgánica o materiales con el desarrollo de la IA en la próxima década?

Israel: Me reitero, para mí, un caso paradigmático es F. Glorious o también M. Sigman. Siguen con su investigación sintética además de tener unos cuántos investigadores dentro del grupo trabajando para predecir o diseñar. En España, dado cómo son los grupos de investigación, dudo que esto ocurra en un futuro próximo. Más bien, seguro que recurrimos a colaboraciones entre experimentales y teóricos que se dediquen a la IA. Se trabajará con gente como David, gente experta en el tema, porque la probabilidad de que lo predicho ocurra es muy alta. Cuando yo aprendí cálculos, mi mentor Fernando Cossío (UPV/EHU) me dijo que había tres tipos de cálculos: los que reproducían el resultado experimental, los que explicaban lo que pasaba y, los mejores, los que predecían. Yo me adhiero a esta visión.

David: Estoy de acuerdo. Yo creo que vamos a seguir con lo que tenemos, pero con una herramienta más potente que nos va a dar más posibilidades. No hay que tenerle miedo, al contrario, vamos a hacer más cosas y mejor, de más calidad.

Sílvia: Y sin duda, más rápido.

Muchas gracias por atendernos y compartir con nosotros vuestras experiencias y reflexiones en torno a la Inteligencia Artificial. Mucha suerte en el futuro y deseamos que sigáis cosechando éxitos dentro del campo.



David Balcells

Hylleraas Centre for Quantum Molecular Sciences, Departamento de Química, Universidad de Oslo, Noruega

C-e: david.balcells@kjemi.uio.no

ORCID: 0000-0002-3389-0543

David Balcells inició su carrera con un doctorado en química computacional bajo la supervisión de Feliu Maseras y Gregori Ujaque, empezando en la UAB y terminando en el ICIQ. Después de un postdoc con Odile Eisenstein (Universidad de Montpellier), obtuvo un contrato Juan de la Cierva en el grupo de Agustí Lledós (UAB). Seguidamente se trasladó a Noruega, dónde obtuvo una beca MSCA para iniciar su carrera independiente. En 2020 recibió el premio Joven Investigador de la RSEQ y desde 2021 es investigador principal del centro de excelencia Hylleraas (Universidad de Oslo) liderando el grupo de IA aplicada a química.



Sílvia Osuna

ICREA & Institut de Química Computacional i Catàlisi y departament de Química, Universitat de Girona

C-e: silvia.osuna@udg.edu

ORCID: 0000-0003-3657-6469

Sílvia Osuna obtuvo su doctorado en 2010 en la Universidad de Girona (UdG) en el Institut de Química Computacional (IQC). En 2010, se trasladó al grupo del Prof. Houk en la Universidad de California, Los Ángeles (UCLA), con una beca postdoctoral Marie Curie. Sílvia ha sido recientemente galardonada con el Premio Nacional Joven en Química – María Teresa Toral 2023, el premio EuChemS Lecture Award 2021, el Premio Nacional de Investigación de Cataluña – Talento Joven 2019 de la Fundació Catalana de Recerca i Innovació (FCRi), entre otros. Su grupo está centrado en el diseño racional de enzimas y está actualmente financiado por un proyecto del ERC – Consolidator Grant, dos ERC– Proof of Concept grants y dos proyectos nacionales.



Israel Fernández

Departamento de Química Orgánica I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid

C-e: israel@quim.ucm.es

ORCID: 0000-0002-0186-9774

Israel Fernández (Madrid, 1977) obtuvo su doctorado, con premio extraordinario, en la Universidad Complutense de Madrid bajo la dirección del Prof. Miguel A. Sierra y recibiendo el Premio Lilly-Young Investigator. Posteriormente, se unió al grupo de Química Computacional del Prof. G. Frenking en la Philipps Universität Marburg, como investigador postdoctoral. En 2009 recibió el Premio Joven Investigador de la RSEQ, el premio Julián Sanz del Río en 2011 y la Medalla Barluenga en 2020. En la actualidad, I.F. es Catedrático en el departamento de Química Orgánica de la UCM. Su investigación actual incluye el estudio computacional de la situación de enlace y los mecanismos de reacción de compuestos orgánicos y organometálicos, con especial interés en los procesos de formación de enlaces C-C.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 11-17
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2006

La revista de la Real Sociedad Española de Química

INVESTIGACIÓN QUÍMICA

Pincelando nuevos horizontes en salud de precisión con tecnologías (bio)electroanalíticas vanguardistas

Painting new horizons for precision healthcare with cutting-edge (bio)electroanalytical technologies

Susana Campuzano[1,2,*], Rebeca M. Torrente-Rodríguez[1], Víctor Ruiz-Valdepeñas Montiel[1], Eloy Povedano[1], Ana Montero-Calle[3], Maria Garranzo-Asensio[3], Maria Gamella[1], Verónica Serafín[1], María Pedrero[1], Rodrigo Barderas[2,3], José M. Pingarrón[1]

[1]Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid

[2]Centro de Investigación Biomédica en Red Fragilidad y Envejecimiento Saludable (CIBERFES)

[3]Unidad de Proteómica Funcional (UFIEC). Instituto de Salud Carlos III

PALABRAS CLAVE:

Tecnologías (bio)electroanalíticas
Medicina de precisión
Nutrición personalizada
Salud de vanguardia

RESUMEN:

Los grandes avances experimentados en el desarrollo de tecnologías (bio)electroanalíticas vanguardistas, confiables y multipropósito y su incursión exitosa en escenarios poco explorados han demostrado su potencial único para actuar de facilitadoras de una salud de vanguardia y de sistemas sanitarios más eficientes y sostenibles. Es en este contexto esperanzador en el que se enfoca este artículo preparado por invitación por el reconocimiento con uno de los "premios a la Excelencia investigadora" otorgados por la RSEQ en su edición 2024 a las investigaciones que he tenido la suerte de orquestar en compañía de los mejores colaboradores, y en el que, además de destacarse algunas de las más representativas, se ofrece una visión personal y generosa de los propósitos inminentes.

KEYWORDS:

(Bio)electroanalytical technologies
Precision medicine
Personalized nutrition
Cutting-edge health

ABSTRACT:

The great advances experienced in the development of cutting-edge, reliable and multipurpose (bio)electroanalytical technologies and their successful incursion into little-explored scenarios have demonstrated their unique potential to act as facilitators of cutting-edge health and more efficient and sustainable healthcare systems. It is in this hopeful context that this article focuses on, prepared by invitation for the recognition with one of the awards for Research Excellence granted by the RSEQ in its 2024 edition to the research that I have been fortunate enough to orchestrate in the company of the best collaborators, and in which, in addition to highlighting some of the most representative, a personal and generous vision of the imminent purposes is offered.

Introducción

La salud de precisión o de vanguardia se refiere al desarrollo de procedimientos innovadores para mejorar la prevención, diagnóstico, tratamiento o rehabilitación de los pacientes de forma personalizada y con medicamentos o terapias avanzadas con el objetivo último de transformar la salud y el sistema sanitario con acciones en las que la ciencia, la innovación y la digitalización actúen de motor para afrontar los nuevos retos sanitarios.[1,2] Es necesario para ello un abordaje innovador, apoyado entre otros pilares fundamentales en la ciencia y la innovación, y que demanda, entre muchas otras cosas, el conocimiento, la experiencia, el compromiso y la coordinación eficiente de científicos básicos y clínicos tanto para identificar nuevos (bio)marcadores como para desarrollar nuevas tecnologías que permitan su investigación, determinación y valorización y sean potencialmente transferibles de los laboratorios de investigación a los laboratorios clínicos y a la sociedad.

Es en este ámbito vanguardista y desafiante en el que, junto con mi grupo de investigación (Grupo de Electroanálisis y (bio) sensores electroquímicos de la Universidad Complutense de Madrid) y los mejores colaboradores nacionales e internacionales, entre los que debo destacar al Grupo ProteoFun de la Unidad de Proteómica Funcional del Instituto de Salud Carlos III de Madrid, he dedicado mis investigaciones de los últimos cinco años, trabajando en el desarrollo de (bio)tecnologías electroanalíticas de vanguardia de carácter multiplexado y/o multiómico y con potencial multipropósito que se ofrecen habilitadoras para investigar e implementar una medicina, terapia y nutrición de precisión en aras de una salud de vanguardia. Es gracias a estas investigaciones, reconocidas con uno de los cuatro Premios a la Excelencia investigadora otorgados por la RSEQ en su edición 2024, por lo que tengo la oportunidad de preparar esta contribución.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: S. Campuzano, R. M. Torrente-Rodríguez, V. Ruiz-Valdepeñas, E. Povedano, A. Montero-Calle, M. Garranzo-Asensio, M. Gamella, V. Serafín, M. Pedrero, R. Barderas, J. M. Pingarrón. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 11-17, https://10.62534/rseq.aq.2006

* C-e: susanacr@quim.ucm.es

Manuscrito recibido: 05/10/2024 · aceptado: 08/02/2025

Tecnologías (bio)electroanalíticas vanguardistas, confiables y multipropósito

Los grandes avances acontecidos en los últimos años han demostrado el potencial de las tecnologías (bio)electroanalíticas para asistir tanto en la investigación como en la implementación de la medicina y la nutrición de precisión.[3-6] Y lo han hecho propulsadas por multitud de alianzas clave, entre las que se pueden mencionar los progresos en el desarrollo y/o empleo de sustratos electródicos (versátiles en términos de uso, material, diseño y formato), tecnologías ómicas de vanguardia (proteómicas cuantitativa y dirigida e inmunómica), receptores (bio)miméticos inspirados en la naturaleza[7] (péptidos aberrantes y/o desplegados en fagos,[8] proteoformas derivadas de "splicing" alternativo,[9] ectodominios obtenidos por mutación dirigida,[10] proteínas completas producidas en células de mamífero y bacteria, fragmentos de anticuerpos recombinantes, etc.), estrategias químicas de funcionalización e inmovilización atractivas en términos de sensibilidad, simplicidad, multiplexado y/o posibilidad de reutilización (químicas "click" o electroinjerto,[11] His-tag[12] y HaloTag[8,9,13,14]), (nano)materiales artificiales y biológicos (con propiedades electrocatalíticas, pseudoenzimáticas, de biocompatibilidad y multitud de grupos funcionales)[15] para la modificación de superficies electródicas[16,17] y la preparación de nanoetiquetas de señalización;[11,17] reactivos comerciales con múltiples moléculas trazadoras o enzimáticas,[18] técnicas de calibración ratiométricas, estrategias isotermas de amplificación de ácidos nucleicos,[19,20] herramientas estadísticas y de inteligencia artificial de última generación[2,21] y tecnologías de edición génica[22] (Figura 1).

Constituyen así combinaciones valientes, poderosas y sinérgicas que han puesto sobre la mesa las ventajas competitivas que ofrecen estas tecnologías frente a las más convencionales u otras de vanguardia en términos de simplicidad, coste, versatilidad de diseño y empleo en distintos entornos para investigar y demostrar el potencial no solo de marcadores candidatos o de relevancia emergente, sino también de otros no descritos, sorteando la disponibilidad comercial de receptores y estándares para su desarrollo y caracterización. Una pequeña muestra de estos desarrollos, que he tenido la suerte de orquestar en los últimos cinco años (2019-) con los colaboradores ideales, se destacan brevemente en las próximas secciones.

Nuevos horizontes en medicina de precisión

Los desarrollos sin precedentes acontecidos en los últimos años y su incursión en terrenos poco explorados hasta entonces han conducido a la puesta a disposición de la sociedad de tecnologías habilitadoras para descubrir, determinar y valorizar el potencial de marcadores de transcriptoma (RNAs no codificantes), epigenoma (DNAs y RNAs metilados), proteoma (proteasas,[23] canales de iones[24]), estroma,[25] glicoma,[26,27] inflamasoma (citoquinas[11]), estado mutacional,[20] autoantibodioma,[8,9,13,14,28] exosomas,[29] metaboloma,[30] etc., en escenarios muy relevantes (agresividad e hipoxia tumoral,[23,31] angiogénesis,[32] senescencia celular,[33] enfermedad mínima residual,[27] etc.).

Estas tecnologías se han desarrollado tanto en formatos integrados como asistidos mediante el empleo de micropartículas magnéticas comerciales, aprovechando las ventajas y versatilidad que ofrecen para implementar sobre su superficie bioensayos con sensibilidad mejorada, tiempo de ensayo reducido y menos susceptibles a efectos indeseables en el análisis de matrices complejas.[34] En todos los casos se han empleado electrodos desechables para la detección individual o multiplexada (dual, cuádruple y óctuple) y fundamentalmente transducción amperométrica, por ser la más fácilmente implementable en dispositivos en el punto de necesidad.

Todas estas metodologías desarrolladas explotan (bio)receptores comerciales o identificados y producidos mediante tecnologías de última generación (proteómicas, de despliegue en fagos, HaloTag, mutación dirigida, etc.) en formatos de bioensayo ingeniosos. Tras su optimización y caracterización exhaustiva para la determinación de estándares adecuados, se han enfrentado con resultados muy prometedores al análisis de muestras reales de cohortes de individuos, críticamente seleccionadas por nuestros colaboradores clínicos, de naturaleza muy diversa y elevada complejidad, que incluyen biopsias líquidas (suero, plasma, saliva y orina), extractos de biopsias sólidas (congeladas o parafinadas) y muestras celulares (células enteras, lisadas y/o secretomas). El análisis comparativo de las dianas empleando tecnologías convencionales (ELISA o técnicas de blotting o inmunodetección en membrana) o de vanguardia (Luminex o SIMOA), junto con el tratamiento estadístico de los resultados obtenidos ha permitido evaluar las correlaciones y capacidad de diagnóstico y pronóstico tanto de las tecnologías desarrolladas como de los (bio)marcadores analizados, lo que ha llevado al descubrimiento de firmas específicas no descritas previamente[8,9,13,14] y/o al establecimiento del potencial y de los valores de corte de los marcadores analizados en las matrices y escenarios estudiados[28] (Figura 2).

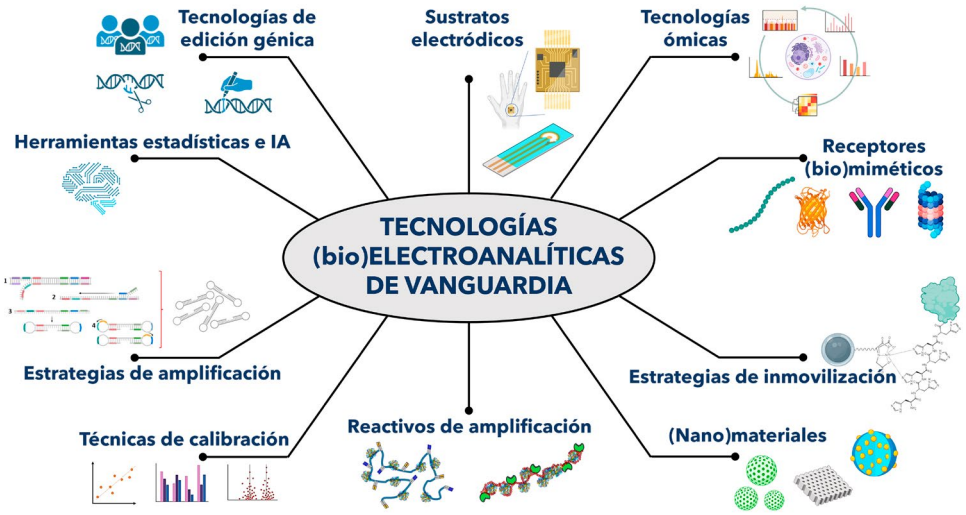


Figura 1. Tecnologías (bio)electroanalíticas de vanguardia. Alianzas clave. (Creado con biorender.com).

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Por su carácter innovador y/o multipropósito y por considerarnos responsables de su desarrollo, resulta imprescindible destacar aquellas tecnologías (bio)electroanalíticas para:

- demostrar de forma pionera su potencial para el análisis de secretomas celulares, inabordable con tecnologías habituales de "blotting" por la falta de sensibilidad, y que han proporcionado, por primera vez, los contenidos de determinados marcadores en secretomas de células cancerígenas, contribuyendo a un mayor entendimiento del microambiente tumoral en neoplasias prevalentes;[25,31,35]
- poner en valor el potencial de la desregulación de los marcadores transcriptómicos y/o epigenéticos tanto a nivel global como regional para el diagnóstico temprano y el pronóstico oncológico;[19,36-41]
- descubrir, determinar y evaluar el potencial diagnóstico del contenido total o de isotipos específicos,[28] de autoanticuerpos frente a antígenos circulantes,[13,28] exosomales[14] y proteoformas[9] o péptidos aberrantes y/o desplegados en fagos[8] para avanzar en el diagnóstico en fases preclínicas, seguimiento y/o pronóstico de cáncer colorrectal y la enfermedad de Alzheimer. Es importante destacar que una de las investigaciones realizadas en esta línea[13] fue reconocida con el "Premio UCM-Fundación Instituto Roche en Medicina Personalizada de Precisión" en su III convocatoria;
- cuantificar procesos de inmunidad natural y/o adquirida frente a infecciones virales, e implementar estrategias de diagnóstico, seguimiento y vacunación personalizadas con selectividad hacia variantes;[30]
- detectar el estado mutacional (homo/heterozigoto) de genes de relevancia en terapia oncológica;[20]
- determinar el nivel sérico de ácidos grasos (p.ej. ácido araquidónico) que condicionan tanto la predisposición como la gravedad con la que experimentamos infecciones por SARS-COV-2, SARS, MERS, RSV y otros virus con envoltura similares;[30]
- estudiar tanto la actividad de canales iónicos (proteínas transmembrana encargadas del flujo de iones y entre los que se incluyen canales de potasio implicados en el desarrollo de células cancerígenas), como de sus potenciales agentes bloqueantes (p.ej. polipéptidos extraídos del veneno de una especie particular de escorpión)[24] para profundizar en el conocimiento de canalopatías prevalentes (además de cáncer, Alzheimer, esclerosis múltiple, etc.) y mejorar la eficacia de las terapias anti-canales iónicos; y
- asistir en terapia personalizada evaluando la capacidad individual de absorción de quimioterapéuticos ampliamente usados (p.ej. 5-fluorouracilo) monitorizando su nivel sérico en pacientes oncológicos sometidos a perfusión.[42]

Nuevas perspectivas en nutrición personalizada

En el campo de la nutrición individualizada, estrechamente relacionada con la medicina de precisión y que persigue la evolución de los enfoques dietéticos desde el nivel poblacional al individual,[43] hemos sido artífices del desarrollo de nuevas tecnologías electroquímicas para la determinación de alérgenos y adulterantes de origen vegetal o animal y a nivel proteico,[44,45] genético (en distintos orgánulos como núcleos,[46] cloroplastos,[47] mitocondrias,[48] etc.) o a nivel de oligosacárido[49] tanto en muestras procesadas y sin procesar, como en productos comerciales.

También se ha trabajado en tecnologías para determinar compuestos químicos formados durante el procesado de los alimentos (p.ej. acrilamida en la reacción de Maillard[50]) capaces de interactuar con nuestro DNA y con potencial carcinogénico y de proporcionar de forma simple, precisa y fiable los niveles séricos de dos isotipos de inmunoglobulinas (IgE e IgG4) específicas a antígenos alergénicos[51] y de relevancia en el diagnóstico y seguimiento de la eficiencia de la terapia aplicada a la población con alergia/sensibilidad a estos (Figura 3).

Propósitos inminentes

En este ecosistema se nos ofrece un futuro apasionante y desafiante que nos mantendrá impacientes y motivados poniendo a disposición de la sociedad tecnologías (bio)electroanalíticas para la exploración de otro tipo de matrices (exudados nasales, líquido cerebroespinal y heces) y la determinación y puesta en valor de (bio)marcadores identificados por proteómica de vanguardia y todavía poco explorados con este tipo de dispositivos, con potencial predictivo, diagnóstico, pronóstico o terapéutico en las enfermedades que más nos siguen ocupando y preocupando (cáncer, enfermedades neurodegenerativas e infecciosas).

Estamos convencidos de que merece la pena ocuparnos de la determinación de nucleosomas, trampas extracelulares de neutrófilos, organoides, formas no canónicas de DNA (cuartetos de guanina y potenciales estabilizadores), DNA mitocondrial y marcadores de proteoma oscuro (proteínas sin función predicha

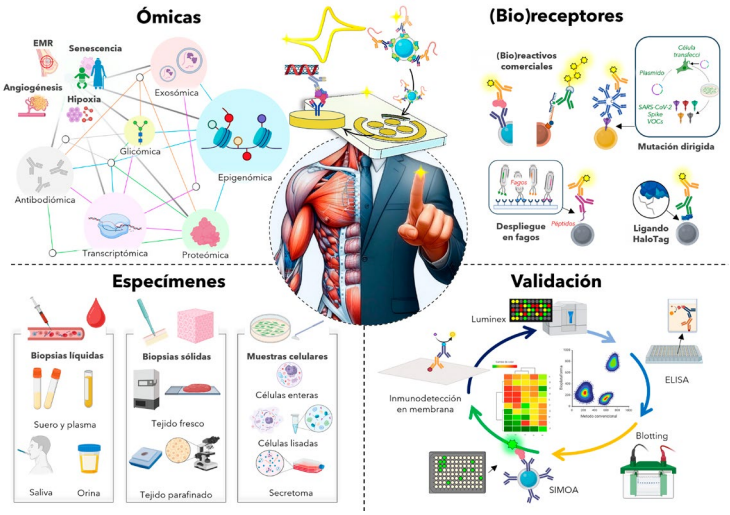


Figura 2. Nuevos horizontes en medicina de precisión con tecnologías (bio)electroanalíticas. (Creado con biorender.com).

© 2025 Real Sociedad Española de Química

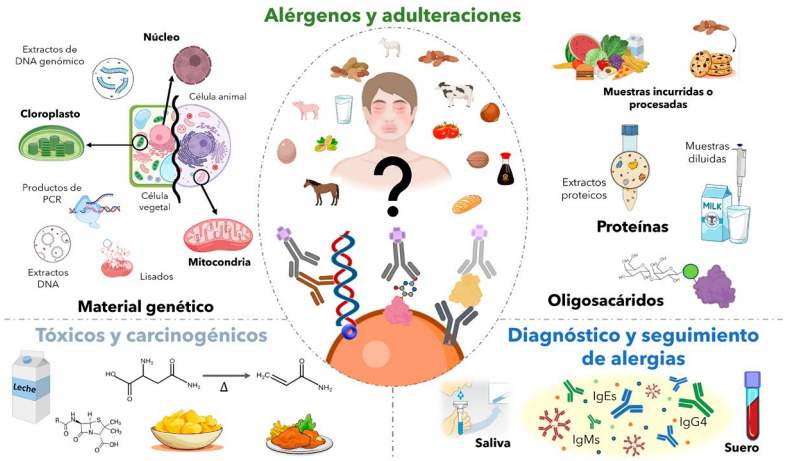


Figura 3. Nuevas perspectivas en nutrición personalizada con tecnologías (bio)electroanalíticas. (Creado con biorender.com).

y no estudiadas hasta la fecha que constituyen aproximadamente el 20-30 % de las proteínas humanas) y fantasma (proteínas o microproteínas ausentes en las bases de datos de referencia, y sin traducción predicha a partir de regiones no codificantes de RNA o a través de cambios o alteraciones en el marco de lectura).

También se prevé dedicar esfuerzos a completar el autoantibodioma del cáncer colorrectal y de la enfermedad de Alzheimer, que es de gran interés tanto para el diagnóstico temprano, el seguimiento y el pronóstico de estos pacientes, como para identificar objetivos terapéuticos para la intervención y el seguimiento de las terapias.[52]

En el campo de la nutrición se visiona el desarrollo de tecnologías para la determinación de metabolitos que ingerimos en la dieta implicados en rutas metabólicas alteradas, y de tóxicos y ácidos nucleicos en alimentos responsables de mutaciones asociadas al cáncer y otras enfermedades.

Es incuestionable que se desafiarán todavía más las prestaciones de este tipo de (bio)herramientas en términos de sencillez (desarrollando idealmente tecnologías "single-step" y "single-pot"), sensibilidad, robustez, posibilidad de reutilización y antiensuciamiento, aprovechando las ventajas que puede ofrecer el empleo de otro tipo de (bio)receptores (plantibodies, nanobodies, anticuerpos funcionales, anticuerpos biespecíficos, terapeúticos, fragmentos de anticuerpos recombinantes, anticuerpos anti-péptido, péptidos de múltiples antígenos, con afinidad a inmunoglobulinas, etc.), de estrategias químicas de (bio)funcionalización e inmovilización más estables y robustas, y de nuevos desarrollos y/o variantes de tecnologías isotermas de amplificación de ácidos nucleicos (p.ej. estrategias de amplificación por intercambio de cebadores), de edición génica y de herramientas de inteligencia artificial (aprendizaje automático, redes neuronales e integración de datos multiómicos).

Además de priorizar el desarrollo de (bio)herramientas de carácter multiplexado y/o multiómico, se aprovechará su versatilidad de diseño y aplicación para proponer tecnologías multitarea, capaces de responder a las necesidades de la medicina y la nutrición personalizadas en favor de una salud de precisión. En este momento se considera también factible y de interés la incursión de estas tecnologías en ensayos funcionales que permitan la identificación de dianas terapéuticas y su desarrollo en modalidad multipropósito para la determinación de:

- alérgenos proteicos en alimentos y el contenido sérico de isotipos de inmunoglobulinas (IgE e IgG4) específicos asociados con el diagnóstico y pronóstico de sus alergias/intolerancias;
- el nivel de ácidos grasos relacionados con tendencias y riesgos de sufrir infecciones virales (ácido araquidónico) tanto en muestras de suero como en los alimentos que nos lo proporcionan;
- (bio)marcadores implicados en vías metabólicas alteradas y de predisposición de riesgo genético a diferentes enfermedades para su prevención (p. ej. homozigosis en *ApoE4* para la enfermedad de Alzheimer).

No cabe duda de que la próxima generación de medicina clínica y de salud pública será más precisa y que el cambio hacia enfoques de precisión está bien encaminado, y no solo en el ámbito de la atención sanitaria; la agricultura de precisión también implica cada vez más el uso de datos, inteligencia artificial, sensores y otras técnicas para el uso específico y eficiente del agua, los pesticidas y los fertilizantes.[1] En una época en la que las interdependencias del clima, la seguridad alimentaria y la salud son claramente evidentes, el desarrollo de nuevas tecnologías capaces de ofrecer resultados más precisos contribuiría al desarrollo de sistemas de salud más resilientes y sostenibles que mejorarían la salud, la esperanza y la calidad de vida de las personas, fortalecerían su confianza y compromiso con el autocuidado y asegurarían una utilización más racional de los limitados recursos sociales.

Y aunque el camino no se presiente en absoluto sencillo, teniendo en cuenta las oportunidades y características únicas que ofrecen estas tecnologías para contribuir a este propósito, tan apasionante como desafiante y necesario, no queremos caminar por otro.

Agradecimientos

Mi más sincero agradecimiento a la RSEQ por la concesión de uno de los cuatro Premios a la Excelencia investigadora en su edición 2024 y a la revista Anales de Química por la invitación a preparar este artículo, a la financiación de los proyectos PID2019-103899RB-I00 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y PID2022-136351OB-I00 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y por "FEDER Una manera de hacer Europa" y a todos los grandes profesionales nacionales e internacionales que firman las publicaciones que se recogen en la siguiente sección, por su dedicación impecable a las investigaciones destacadas y reconocidas. Mi agradecimiento muy especial también a María Cruz Moreno-Bondi y a José M. Pingarrón por haber creído en mí y haber presentado mi candidatura en las distintas convocatorias de los Premios RSEQ.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Bibliografía

[1] What will it take to make precision health a global reality. *Nat. Med.* **2024**, *30*, 1793–1794, https://doi.org/10.1038/s41591-024-03163-8.

[2] M.C. Roberts, K.E. Holt, G. Del Fiol, A.A. Baccarelli, C.G. Allen. *Nat. Med.* **2024**, *30*, 1865–1873, https://doi.org/10.1038/s41591-024-03098-0.

[3] S. Campuzano, R. Barderas, P. Yáñez-Sedeño, J.M. Pingarrón. *Curr. Op. Electrochem.* **2021**, *28*, 100703, https://doi.org/10.1016/j.coelec.2021.100703.

[4] S. Campuzano, J.M. Pingarrón, M. Pedrero. *Actualidad Analítica* **2023**, *84*, 22-27.

[5] S. Campuzano, J.M. Pingarrón. *ACS Sens.* **2023**, *8*, 3276-3293, https://doi.org/10.1021/acssensors.3c01172.

[6] S. Campuzano, R. Barderas, M.T. Moreno-Casbas, Á. Almeida, J.M. Pingarrón. *Anal. Bioanal. Chem.* **2024**, *416*, 2151-2172, https://doi.org/10.1007/s00216-023-04805-5.

[7] S. Campuzano, M. Pedrero, R. Barderas, J.M. Pingarrón. *Anal. Bioanal. Chem.* **2024**. *416*, 7225-7247, https://doi.org/10.1007/s00216-024-05294-w.

[8] A. Valverde, A. Montero-Calle, B. Arévalo, P. San Segundo-Acosta, V. Serafín, M. Alonso-Navarro, G. Solís-Fernández, J.M. Pingarrón, S. Campuzano, R. Barderas. *Anal. Sens.* **2021**, *1*, 161-165, https://doi.org/10.1002/anse.202100024.

[9] A. Montero-Calle, M. Garranzo-Asensio, R.M. Torrente-Rodríguez, V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, C. Poves, J. Dziakova, R. Sanz, C. Diaz del Arco, J.M. Pingarrón, M.J. Fernández-Aceñero, S. Campuzano, R. Barderas. *Cancers* **2023**, *15*, 2102, https://doi.org/10.3390/cancers15072102.

[10] R.M. Torrente-Rodríguez, A. Montero-Calle, C. San Bartolomé, O. Cano, M. Vazquez, M. Iglesias-Caballero, A. Corral-Lugo, M.J. McConnell, M. Pascal, V. Mas, J.M. Pingarrón, R. Barderas, S. Campuzano. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202203662, https://doi.org/10.1002/anie.202203662.

[11] B. Arévalo, M. Blázquez-García, A. Valverde, V. Serafín, A. Montero-Calle, G. Solís-Fernández, R. Barderas, S. Campuzano, P. Yáñez-Sedeño, J.M. Pingarrón. *Microchim. Acta* **2022**, *189*, 143, https://doi.org/10.1007/s00604-022-05250-4.

[12] B. Arévalo, M. Blázquez-García, A. Valverde, V. Serafín, P. Yáñez-Sedeño, S. Campuzano, J.M. Pingarrón. *Sens. Diagn.* **2023**, *2*, 256-261, https://doi.org/10.1039/d2sd00193d.

[13] M. Garranzo-Asensio, A. Guzmán-Aránguez, E. Povedano, V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, C. Poves, M.J. Fernandez-Aceñero, A. Montero-Calle, G. Solís-Fernández, S. Fernandez-Diez, J. Camps, M. Arenas, N. Cabré, J. Joven, N. Rodriguez, G. Dominguez, P. Yáñez-Sedeño, J.M. Pingarrón, S. Campuzano, R. Barderas. *Theranostics* **2020**, *10*, 3022-3034, https://doi.org/10.7150/thno.42507.

[14] A. Montero-Calle, I. Aranguren-Abeigon, M. Garranzo-Asensio, A. Guzman-Aranguez, C. Povés, M.J. Fernández-Aceñero, J. Martínez-Useros, R. Sanz, J. Dziaková, J. Rodríguez-Cobos, G. Solís-Fernández, E. Povedano, M. Gamella, R.M. Torrente-Rodríguez, M. Alonso-Navarro, V. de los Ríos, J.I. Casal, G. Domínguez, J.M. Pingarrón, A. Peláez-García, S. Campuzano, R. Barderas. *Engineering* **2021**, *7*, 1393-1412, https://doi.org/10.1016/j.eng.2021.04.026.

[15] S. Campuzano, M. Pedrero, R. Barderas, J.M. Pingarrón. *Adv. Mat. Technol.* **2022**, *7*, 2200310, https://doi.org/10.1002/admt.202200310.

[16] C.A. Razzino, V. Serafín, M. Gamella, M. Pedrero, A. Montero-Calle, R. Barderas, M. Calero, A.O. Lobo, P. Yáñez-Sedeño, S. Campuzano, J.M. Pingarrón. *Biosens. Bioelectron.* **2020**, *163*, 112238, https://doi.org/10.1016/j.bios.2020.112238.

[17] D. Soto, V. Serafín, M. Pedrero, J.M. Pingarrón, S. Campuzano, J. Orozco. *Microchim. Acta* **2024**, *191*, 683, https://doi.org/10.1007/s00604-024-06745-y.

[18] V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, E. Povedano, E. Vargas, R.M. Torrente-Rodríguez, M. Pedrero, A.J. Reviejo, S. Campuzano, J.M. Pingarrón. *ACS Sens.* **2018**, *3*, 211-221, https://doi.org/10.1021/acssensors.7b00869.

[19] L. Moranova, M. Stanik, R. Hrstka, S. Campuzano, M. Bartosik. *Talanta* **2022**, *238*, 123064, https://doi.org/10.1016/j.talanta.2021.123064.

[20] R. Sebuyoya, A. Valverde, L. Moranova, J. Strmiskova, R. Hrstka, V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, J.M. Pingarrón, R. Barderas, S. Campuzano, M. Bartosik. *Sens. Actuators B Chem.* **2023**, *394*, 134375, https://doi.org/10.1016/j.snb.2023.134375.

[21] G.F. Giordano, L.F. Ferreira, Í.R.S. Bezerra, J.A. Barbosa, J.N.Y. Costa, G.J. C. Pimentel, R.S. Lima. *Anal. Bioanal. Chem.* **2023**, *415*, 3683–3692, https://doi.org/10.1007/s00216-023-04514-z.

[22] S. Zou, J. Li, S. Lu, D. Li, Y. Liu, W. Zhang, X. Cui, J.J. Gooding, K. Tian, G. Liu. *Device* **2024**, *2(5)*, 100319, https://doi.org/10.1016/j.device.2024.100319.

[23] C. Muñoz-San Martín, M. Pedrero, M. Gamella, A. Montero-Calle, R. Barderas, S. Campuzano, J.M. Pingarrón. *Anal. Bioanal. Chem.* **2020**, *412*, 6177-6188, https://doi.org/10.1007/s00216-020-02418-w.

[24] M. Zouari, D. Aissaoui-Zid, S. Campuzano, R. Barderas, N. Sraïri-Abid, J.M. Pingarrón, N. Raouafi. *Anal. Chim. Acta* **2022**, *1231*, 340397, https://doi.org/10.1016/j.aca.2022.340397.

[25] M. Blázquez-García, J. Quinchia, V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, R.M. Torrente-Rodríguez, V. Serafín, M. Garranzo-Asensio, A. García-Romero, J. Orozco, J.M. Pingarrón, R. Barderas, S. Campuzano. *ChemElectroChem* **2024**, *11*, e202300641, https://doi.org/10.1002/celc.202300641.

[26] C. Muñoz-San Martín, A. Montero-Calle, M. Garranzo-Asensio, M. Gamella, V. Pérez-Ginés, M. Pedrero, J.M. Pingarrón, R. Barderas, N. de los Santos-Alvárez, M.J. Lobo-Castañón, S. Campuzano. *Anal. Bioanal. Chem.* **2023**, *415*, 2045-2057, https://doi.org/10.1007/s00216-022-04397-6.

[27] S. Tejerina-Miranda, M. Blázquez-García, V. Serafín, A. Montero-Calle, M. Garranzo-Asensio, A.J. Reviejo, M. Pedrero, J.M. Pingarrón, R. Barderas, S. Campuzano. *Int. J. Biol. Macromol.* **2023**, *248*, 125996, https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2023.125996.

[28] B. Arévalo, V. Serafín, M. Garranzo-Asensio, A. Montero-Calle, R. Barderas, P. Yánez-Sedeño, S, Campuzano, J.M. Pingarrón. *Anal. Chim. Acta* **2023**, *1257*, 341153, https://doi.org/10.1016/j.aca.2023.341153.

[29] V. Pérez-Ginés, R.M. Torrente-Rodríguez, A. Montero-Calle, G. Solís-Fernández, P. Atance-Gómez, M. Pedrero, J.M. Pingarrón, R. Barderas, S. Campuzano. *Biosens. Bioelectron.: X* **2022**, *11*, 100192, https://doi.org/10.1016/j.biosx.2022.100192.

[30] R.M. Torrente-Rodríguez, V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, S. Iftimie, A. Montero-Calle, J.M. Pingarrón, A. Castro, J. Camps, R. Barderas, S. Campuzano, J. Joven. *Microchim. Acta* **2024**, *191*, 369, https://doi.org/10.1007/s00604-024-06440-y.

[31] C. Muñoz-San Martín, M. Gamella, M. Pedrero, A. Montero-Calle, V. Pérez-Ginés, J. Camps, M. Arenas, R. Barderas, J.M. Pingarrón, S. Campuzano. *Anal. Bioanal. Chem.* **2021**, *414(1)*, 399-412, https://doi.org/10.1007/s00216-021-03240-8.

[32] S. Tejerina-Miranda, M. Pedrero, M. Blázquez-García, V. Serafín, A. Montero-Calle, M. Garranzo-Asensio, A.J. Reviejo, J.M. Pingarrón, R. Barderas, S. Campuzano. *Bioelectrochemistry* **2024**, *155*, 108571, https://doi.org/10.1016/j.bioelechem.2023.108571.

[33] S. Tejerina-Miranda, M. Gamella, M. Pedrero, A. Montero-Calle, R. Rejas, J.M. Pingarrón, R. Barderas, S. Campuzano. *Electrochim. Acta* **2024**, *503*, 144822, https://doi.org/10.1016/j.electacta.2024.144822.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

[34] S. Fortunati, M. Giannetto, C. Giliberti, M. Mattarozzi, A. Bertucci, M. Careri. *Anal. Sens.* **2024**, *4(3)*, e202300062, https://doi.org/10.1002/anse.202300062.
[35] C. Muñoz-San Martín, V. Pérez-Ginés, R.M. Torrente-Rodríguez, M. Gamella, G. Solís-Fernández, A. Montero-Calle, M. Pedrero, V. Serafín, N. Martínez-Bosch, P. Navarro, P.G. De Frutos, M. Batlle, R. Barderas, J.M. Pingarrón, S. Campuzano. *Electrochem. Sci. Adv.* **2021**, *2(4)*, e2100096, https://doi.org/10.1002/elsa.202100096.
[36] E. Povedano, V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, A. Valverde, F. Navarro-Villoslada, P. Yánez-Sedeño, M. Pedrero, A. Montero-Calle, R. Barderas, A. Peláez-García, M. Mendiola, D. Hardisson, J. Feliú, J. Camps, E. Rodríguez-Tomàs, J. Joven, M. Arenas, S. Campuzano, J.M. Pingarrón. *ACS Sens.* **2019**, *4*, 227-234, https://doi.org/10.1021/acssensors.8b01339.
[37] E. Povedano, V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, M. Gamella, M. Pedrero, R. Barderas, A. Peláez-García, M. Mendiola, D. Hardisson, J. Feliú, P. Yánez-Sedeño, S. Campuzano, J.M. Pingarrón. *Anal. Chem.* **2020**, *92*, 5604-5612, https://dx.doi.org/10.1021/acs.analchem.0c00628.
[38] M. Zouari, S. Campuzano, J.M. Pingarrón, N. Raouafi. *Microchim. Acta* **2020**, *187*, 444, https://doi.org/10.1007/s00604-020-04400-w.
[39] E. Povedano, M. Gamella, R.M. Torrente-Rodríguez, V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, A. Montero-Calle, G. Solís-Fernández, F. Navarro-Villoslada, M. Pedrero, A. Peláez-García, M. Mendiola, D. Hardisson, J. Feliú, R. Barderas, J.M. Pingarrón, S. Campuzano. *Anal. Chim. Acta* **2021**, *1182*, 338946, https://doi.org/10.1016/j.aca.2021.338946.
[40] E. Povedano, M. Gamella, R.M. Torrente-Rodríguez, A. Montero-Calle, M. Pedrero, G. Solís-Fernández, F. Navarro-Villoslada, R. Barderas, S. Campuzano, J.M. Pingarrón. *Biosens. Bioelectron.* **2021**, *171*, 112708, https://doi.org/10.1016/j.bios.2020.112708.
[41] E. Povedano, V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, R. Sebuyoya, R.M. Torrente-Rodríguez, M. Garranzo-Asensio, A. Montero-Calle, R. Hrstka, J.M. Pingarrón, R. Barderas, M. Bartosik, S. Campuzano. *Anal. Chem.* **2024**, *96*, 4580-4588, https://doi.org/10.1021/acs.analchem.3c05474.
[42] M. Zouari, R. Barderas, J.M. Pingarrón, N. Raouafi, S. Campuzano. *Sens. Actuators B Chem.* **2024**, *401*, 135017, https://doi.org/10.1016/j.snb.2023.135017.
[43] J. Neu. *Nat. Med.* **2024**, *30*, 1826–1827, https://doi.org/10.1038/s41591-024-03000-y.
[44] A. Civera, M. Gamella, R.M. Torrente-Rodríguez, M. Pedrero, P. Galán-Malo, L. Mata, L. Sánchez, J.M. Pingarrón, S. Campuzano, M.D. Pérez. *Microchem. J.* **2023**, *195*, 109403, https://doi.org/10.1016/j.microc.2023.109403.
[45] S. Tvorynska, A. Civera, M. Gamella, R.M. Torrente-Rodríguez, M. Pedrero, P. Galán-Malo, L. Mata, L. Sánchez, J. Barek, J.M. Pingarrón, M.D. Pérez, S. Campuzano. *Sens. Bio-sens. Res.* **2024**, *44*, 100644, https://doi.org/10.1016/j.sbsr.2024.100644.
[46] M. Gamella, A. Laza, J. Parrón-Ballesteros, C. Bueno, V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, M. Pedrero, J.M. Pingarrón, M. Villalba, S. Campuzano. *Bioelectrochemistry* **2023**, *150*, 108357, https://doi.org/10.1016/j.bioelechem.2022.108357.
[47] M. Gamella, M.I. Ballesteros, V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, A. Sánchiz, C. Cuadrado, J.M. Pingarrón, R. Linacero, S. Campuzano. *Talanta* **2024**, *277*, 126350, https://doi.org/10.1016/j.talanta.2024.126350.
[48] V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, M.L. Gutiérrez, R.M. Torrente-Rodríguez, E. Povedano, E. Vargas, Á. Julio Reviejo, R. Linacero, F.J. Gallego, S. Campuzano, J.M. Pingarrón. *Anal. Chem.* **2017**, *89*, 9474-9482, https://doi.org/10.1021/acs.analchem.7b02412.
[49] V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, M. Gamella, M. Blázquez-García, V. Serafín, J.M. Pingarrón, S. Benedé, S. Campuzano. *Talanta* **2024**, *273*, 125851, https://doi.org/10.1016/j.talanta.2024.125851.
[50] M. Zouari, V. Ruiz-Valdepeñas Montiel, M. Gamella, N.S. Boubaker, J.M. Pingarrón, S. Campuzano, N. Raouafi. *Electroanalysis* **2025**, *37*, e202400175, https://doi.org/10.1002/elan.202400175.
[51] A. Valverde, J.M. Gordón Pidal, S. Benedé, E. Molina, M. Moreno-Guzmán, M.Á. López, J.M. Pingarrón, A. Escarpa, S. Campuzano. *Sens. Diagn.* **2022,** *1*, 149-159, https://doi.org/10.1039/d1sd00040c.
[52] A. Montero-Calle, M. Garranzo-Asensio, M.T. Moreno-Casbas, S. Campuzano, R. Barderas. *Front. Immunol.* **2024**, *15*, 1455602, https://doi.org/10.3389/fimmu.2024.1455602.



Susana Campuzano

Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias, 2, Ciudad Universitaria, 28040 Madrid (España)

C-e: susanacr@quim.ucm.es

ORCID: 0000-0002-9928-6613

Susana Campuzano es Catedrática de Química Analítica. Sus áreas de interés incluyen el desarrollo de biotecnologías electroanalíticas basadas en afinidad con potencial para determinaciones multiplexadas y/o multiómicas en salud de precisión.



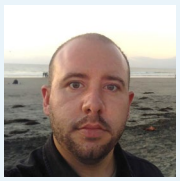
Rebeca M. Torrente-Rodríguez

Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias, 2, Ciudad Universitaria, 28040 Madrid (España)

C-e: rebecamt@ucm.es

ORCID: 0000-0002-2153-172X

Rebeca M. Torrente Rodríguez es Profesora Ayudante Doctora. Su trayectoria investigadora está enfocada al diseño, desarrollo e implementación de dispositivos de biosensado electroanalítico de biomarcadores relevantes a distinto nivel ómico.



Víctor Ruiz-Valdepeñas Montiel

Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias, 2, Ciudad Universitaria, 28040 Madrid (España)

C-e: vrvmontiel@ucm.es

ORCID: 0000-0002-8865-1531

Víctor Ruiz-Valdepeñas Montiel es Profesor Ayudante Doctor. Sus líneas de investigación incluyen el diseño, puesta a punto y caracterización de dispositivos bioelectrónicos para el sensado n-plexado de biomarcadores multi-ómicos a nivel clínico y nutricional.

© 2025 Real Sociedad Española de Química



Eloy Povedano

Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias, 2, Ciudad Universitaria, 28040 Madrid (España)

C-e: elpove01@ucm.es

ORCID: 0009-0007-0871-0815

Eloy Povedano Muñumel es investigador postdoctoral. Su investigación se centra en el diseño de bioplataformas electroanalíticas para medicina de precisión en cáncer colorrectal y la Enfermedad de Alzheimer.



María Garranzo-Asensio

Unidad de Proteómica Funcional (UFIEC). Instituto de Salud Carlos III, Majadahonda, 28220 Madrid (España)

C-e: mgarranzo@isciii.es

ORCID: 0000-0003-0850-4986

María Garranzo-Asensio es doctora en Bioquímica, Biología Molecular y Biomedicina. Actualmente continúa profundizando en la caracterización del cáncer colorrectal mediante el uso de técnicas proteómicas y ensayos ortogonales complementarios.



Verónica Serafín

Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias, 2, Ciudad Universitaria, 28040 Madrid (España)

C-e: veronicaserafin@quim.ucm.es

ORCID: 0000-0003-0034-8456

Verónica Serafín es Profesora Ayudante Doctora. Su carrera investigadora se centra en el desarrollo de biosensores electroquímicos para la determinación de biomarcadores mediante el empleo de partículas magnéticas, electrodos nanoestructurados y química de superficies.



Rodrigo Barderas

Unidad de Proteómica Funcional (UFIEC). Instituto de Salud Carlos III, Majadahonda, 28220 Madrid (España)

Centro de Investigación Biomédica en Red Fragilidad y Envejecimiento Saludable (CIBERFES), Madrid (España)

C-e: r.barderasm@isciii.es

ORCID: 0000-0003-3539-7469

Rodrigo Barderas es Investigador Científico de OPIs. Sus áreas de interés incluyen la identificación de marcadores diagnósticos y pronósticos y nuevas dianas de intervención en enfermedades crónicas.



Ana Montero-Calle

Unidad de Proteómica Funcional (UFIEC). Instituto de Salud Carlos III, Majadahonda, 28220 Madrid (España)

C-e: ana.monteroc@isciii.es

ORCID: 0000-0001-5141-0454

Ana Montero-Calle es investigadora postdoctoral. Su investigación está centrada en la identificación de biomarcadores de deterioro cognitivo temprano y cáncer colorrectal mediante proteómica.



María Gamella

Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias, 2, Ciudad Universitaria, 28040 Madrid (España)

C-e: mariagam@quim.ucm.es

ORCID: 0000-0002-5408-118X

María Gamella es Profesora Contratada Doctora. Sus líneas de investigación se centran en el desarrollo de plataformas biosensoras electroquímicas para determinación de biomarcadores en los ámbitos clínico y alimentario.



María Pedrero

Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias, 2, Ciudad Universitaria, 28040 Madrid (España)

C-e: mpedrero@quim.ucm.es

ORCID: 0000-0002-2047-396X

María Pedrero es Profesora Titular. Su área de investigación incluye el desarrollo y estudio de (bio)sensores electroquímicos para llevar a cabo la determinación de proteínas y oligonucleótidos como marcadores de cáncer y enfermedades cardiovasculares y neurológicas.



José M. Pingarrón

Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias, 2, Ciudad Universitaria, 28040 Madrid (España)

C-e: pingarro@quim.ucm.es

ORCID: 0000-0003-2271-1383

José M. Pingarrón es Catedrático de Química Analítica. Sus líneas de investigación incluyen el desarrollo de plataformas electroquímicas para la determinación simple o multiplexada de biomarcadores relevantes.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://10.62534/rseq.aq.2006

XL Bienal RSEQ

30.06-03.07 2025

Bilbao Exhibition Centre | BEC

BILBAO



Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 19-24
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2008
La revista de la Real Sociedad Española de Química

INVESTIGACIÓN QUÍMICA

Boro: de sus orígenes en el desierto a aplicaciones pioneras en energía, materiales y medicina

From its origins in the desert to pioneering applications

Clara Viñas i Teixidor*
Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC)

PALABRAS CLAVE:
Carborano
Metalabis(dicarballuro)
COSAN
BNCT
Terapia de protones

RESUMEN:
Los avances en métodos sintéticos eficaces para la funcionalización de los clústeres de boro han sido cruciales para su aplicación práctica en diversos campos. Este artículo destaca los logros alcanzados en los campos de polímeros, catálisis, sensores y medicina en los que he participado junto a Francesc Teixidor a lo largo de mi carrera científica en el ICMAB-CSIC.

KEYWORDS:
Carborane
Metallabis(dicarbollide)
COSAN
BNCT
Proton Therapy

ABSTRACT:
Advances in synthetic methods for the effective functionalization of boron clusters have been crucial for their practical application in various fields. This article highlights the achievements in the areas of polymers, catalysis, sensors, and medicine in which I have participated with Francesc Teixidor throughout my scientific career at ICMAB-CSIC.

Introducción

Tras recibir el Premio a una Carrera Distinguida de la RSEQ 2024, fui invitada a escribir un artículo para Anales de Química de la RSEQ. Aproveché esta oportunidad para compartir mi pasión por la química del boro, abordando las características y reactividad del boro y sus clústeres y destacando mi investigación en el ICMAB-CSIC.

El elemento boro: características, compuestos y aplicaciones iniciales

El boro fue aislado en Penzance (Cornualles, Inglaterra) en 1808 por el químico inglés H. Davy,[1] pero fue identificado como elemento por J.J. Berzelius en 1824.[2] El boro, ubicado a la izquierda del carbono en la tabla periódica, se encuentra en su estado natural en forma de dos isótopos estables: el ^{10}B con una abundancia natural del 20% y el ^{11}B con un 80%.

¿Pero de dónde proviene el Boro? Al Boro le gusta combinarse con el oxígeno y, por eso, se encuentra en la naturaleza en forma de óxidos, usualmente como boratos (BO_3^{3-}). El Boro se extrae de diferentes minerales como Kaliborita ($HKMg_2(B_{12}O_{16})(OH)_{10}\cdot 4H_2O$), Karlita, $Mg_7(BO_3)_3(OH,Cl)_5$, Kernita $Na_2[(B_4O_6)(OH)_2]\cdot 3H_2O$, y Kurnakovita $Mg[(B_3O_3)(OH)_5]\cdot 5H_2O$, entre otros pero todos contienen boratos en su composición.[3,4] Turquía (yacimientos en Kırka, Emet, Bigadiç y Kestelek) tiene las mayores reservas de boro del mundo, seguida por Estados Unidos (desierto "Death Valley" en California) y Rusia,[5] pero Turquía continúa siendo el principal productor de boro.[6] El bórax ($Na_2B_4O_7\cdot 10H_2O$) fue uno de los primeros minerales que se usaron como objeto de intercambio en la antigüedad porqué se empleaba en las soldaduras de oro, como materiales para la momificación, en medicina y en la fabricación de vidrio. En el antiguo Egipto, los embalsamadores usaban sales para deshidratar los cuerpos en la momificación, notando que algunas eran más eficaces, aunque probablemente desconocían que contenían boratos. El ácido bórico (H_3BO_3) fue producido a partir de bórax por el químico holandés W. Homberg en 1702, pero se encuentra de forma natural en algunas zonas volcánicas como la Toscana, las islas Lipari y el estado de Nevada y ha sido ampliamente utilizado en medicina para administración tópica desde el siglo XVIII debido a su gran actividad bactericida y fungicida.[7]

En el año 1909, W.J. Weinstraub sintetizó boro elemental con una pureza del 100%; y en el 1912, A. Stock sintetizó el primer compuesto de boro e hidrógeno: "¡La química del boro había nacido!". Durante el período 1944-1954, una vez acabada la segunda guerra mundial, pero en plena guerra fría, tanto el gobierno americano como el ruso destinaron millones de dólares y de rublos en la investigación de nuevos combustibles; los proyectos militares "*Project Hermes*" y "*Project Zip*" tenían el objetivo de desarrollar nuevos combustibles basados en hidruros de boro para su uso como misiles de largo alcance y de

CÓMO CITAR: C. Viñas. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 19-24, http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2008

* C-e: clara@icmab.es

Manuscrito recibido: 27/10/2024 · aceptado: 06/01/2025

© 2025 Real Sociedad Española de Química

motores de combustión. ¿Por qué los hidruros de boro? Porque producen aproximadamente un 30% más de energía que los combustibles convencionales de hidrocarburo por unidad de masa. Su densidad energética puede superar los 60 MJ/kg, un 30% más que la gasolina (~46 MJ/kg), lo que los hace más eficientes por unidad de masa. La energía liberada por la combustión de los hidruros de boro depende de su composición y de la formación de B_2O_3, un producto altamente estable. Por ejemplo, la combustión del diborano: $B_2H_6 + 3\ O_2 \rightarrow B_2O_3 + 3H_2O$. El resultado de estos programas sobre combustibles son el misil *Bomarc*, un misil tierra-aire desarrollado por EE.UU. a principios de la década de los 50, el bombardero de largo alcance *Valkyrie XB-70A* y la nave espacial *Blackstar*. En estos proyectos se constató que la combustión de los boranos formaba óxidos de boro sólidos que interferían en el esperado proceso termodinámico. Así pues, los boranos no resultaron ser los 'super combustibles' deseados y estos programas de investigación se detuvieron.

Características de los clústeres de boro icosaédricos

El carbono, que se encuentra a la derecha del boro en la tabla periódica, forma enlaces C-C covalentes (2c-2e) que encontramos en las estructuras de polímeros, moléculas de hemoglobina y clorofila, o bien en las estructuras 3D de los fullerenos. El boro también puede formar enlaces B-B que dan lugar a los boranos y los heteroboranos, siendo los carboranos que contienen B y C y los metalacarboranos con B, C y metal los más conocidos. Estos clústeres de boro están formados por estructuras poliédricas con caras triangulares que poseen aromaticidad 3D,[8-10] en las que los enlaces que mantienen unido al clúster son enlaces tricéntricos con dos electrones (3c-2e). W. Lipscomb recibió el Premio Nobel de Química en 1976 por sus estudios sobre el enlace 3c-2e en las estructuras de boranos. El año 1979, H.C. Brown y G. Wittig compartieron el Premio Nobel de Química por sus trabajos con compuestos de boro que revolucionaron la química orgánica sintética.

Estas estructuras moleculares 3D de clústeres de boro poseen una extraordinaria estabilidad química, biológica, térmica y fotoquímica que les confiere aplicaciones únicas en (nano) materiales que no son posibles con otros elementos, incluido el carbono.[11-15]

Los clústeres más conocidos son los icosaédricos (Figura 1): el *closo*-dodecaborato cuya fórmula es $[B_{12}H_{12}]^{2-}$, el dicarba-*closo*-dodecaborano de fórmula empírica $C_2B_{10}H_{12}$ y los metalabis(dicarballuros) tipo sándwich cuya fórmula es $[M(C_2B_9H_{11})_2]^-$ (M = Co^{3+}, Fe^{3+}). Según la posición de los dos vértices C-H, el dicarba-*closo*-dodecaborano existe en tres formas isoméricas 1,2-$C_2B_{10}H_{12}$, 1,7-$C_2B_{10}H_1$ y 1,12-$C_2B_{10}H_{12}$, *orto*-, *meta*- y *para*-carborano (Figura 1).[16]

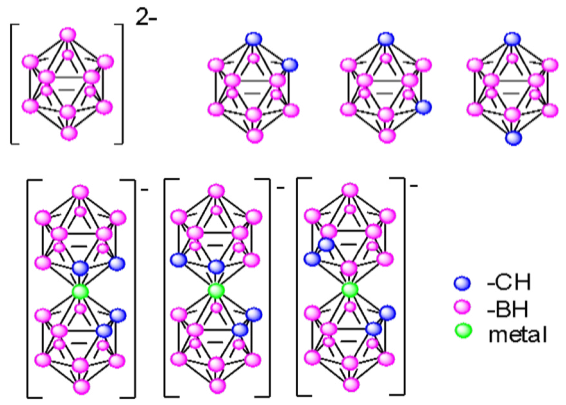


Figura 1. Representación de los clústeres de boro icosaédricos: dodecaborano $[B_{12}H_{12}]^{2-}$ (dianiónico), carborano $C_2B_{10}H_{12}$ (neutro) con sus tres isómeros en la parte superior, así como de los tres rotámeros del metalabis(dicarballuro) que para M^{+3} es monoaniónico.

F. Teixidor y yo, involucrados en la investigación de nuevos (bio)materiales conteniendo clústeres de boro desde la apertura del ICMAB-CSIC, considerábamos que una de las principales limitaciones para la aplicación de estos compuestos en nuevos (bio)materiales era la falta de métodos sintéticos efectivos para su funcionalización. Sin estos procesos, la química del boro quedaba relegada a un segundo plano, a pesar de sus enormes posibilidades, muchas de las cuales complementarias a las de los compuestos de la química orgánica. Por esta razón, desde 1982, tanto nosotros como otros grupos de investigación centramos los esfuerzos en desarrollar métodos sintéticos para la funcionalización de los vértices de carbono, de boro y de carbono y boro en los clústeres icosaédricos de carborano y metallabis(dicarballuros).

Los carboranos neutros icosaédricos closo $C_2B_{10}H_{12}$ pueden incorporar un gran número de sustituyentes en sus 12 vértices (2 C-H y 10 B-H). La reactividad de los vértices B-H depende de la distancia de cada vértice con respecto a los vértices C. Además, la mayoría de las reacciones que ocurren en los vértices de boro no afectan a los vértices de carbono, y viceversa. En consecuencia, ambos clústeres icosaédricos ofrecen la posibilidad de funcionalizarse tanto en los vértices de C, como en los de B, y en ambos vértices de C y de B simultáneamente (Figura 2).[16]

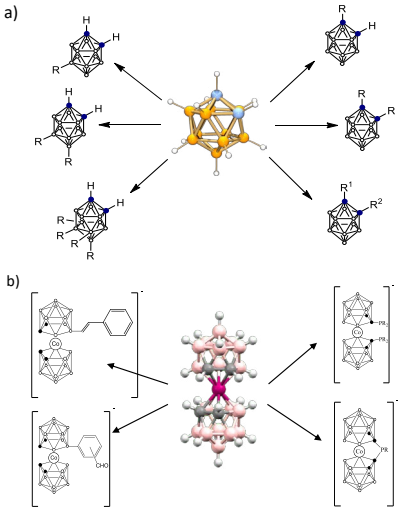


Figura 2. a) Representación esquemática de algunos *closo orto*-carboranos sustituidos en los vértices B (izquierda) y en los vértices C (derecha). b) Representación esquemática de algunos metallabis(dicarballuros) sustituidos en los vértices B (izquierda) y en los vértices C (derecha). Los círculos oscuros representan los átomos de C, mientras que los blancos representan los átomos de B.

Enfoque en la síntesis de derivados de carboranos icosaédricos y metalabis(dicarballuros) para su uso en (bio)materiales

Desde 1982, hemos optimizado protocolos de síntesis para aplicar los clústeres icosaédricos de boro en (bio)materiales. Nos enfocamos en la síntesis y caracterización de derivados de carboranos y metalacarboranos, explorando continuamente nuevas aplicaciones en la ciencia de materiales, algunas de las cuales se detallan a continuación.

- Catálisis. El primer paso para aplicar los clústeres en este campo fue la síntesis de los clústeres neutros (*closo*) y aniónicos

© 2025 Real Sociedad Española de Química

(*nido*) derivados del *o*-carborano con grupos monotioéter, ditioéter, monofosfina, difosfina, y tioéterfosfina enlazados a los carbonos del clúster.

El paso siguiente fue la reacción de coordinación con compuestos de Ru, Rh, Pd, Cu, Au, entre otros, para obtener los correspondientes complejos (Figura 3) con el propósito de su uso como catalizadores en reacciones de hidrogenación e isomerización de alquenos terminales e internos, ciclopropanación de olefinas, reacción de Kharasch y polimerización Ziegler-Natta.[17] A resaltar que los complejos de Rh son los primeros ejemplos de catalizadores conocidos de ciclopropanación.[18]

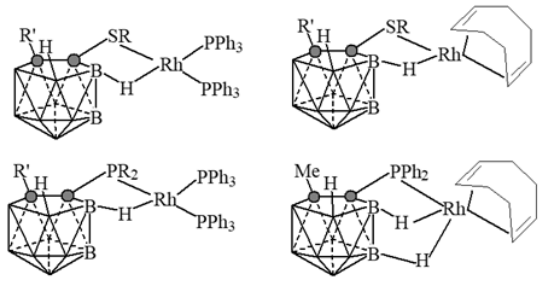


Figura 3. Representación esquemática de algunos complejos sintetizados que incorporan algunos clústeres de nido o-carborano. R = Et, i-Pr, Ph, R' = H, Me, Ph.

Cabe destacar los hallazgos innovadores llevados a cabo en los últimos cinco años sobre la actividad catalítica del cobaltabis(dicarballuro) y sus derivados halogenados como catalizadores fotoredox en la oxidación de alcoholes, hidrocarburos y otros compuestos en medio acuoso (Figura 4).[19-21] Este proceso que ha sido patentado (EP23382576.9), convierte alcanos y alquenos en alcoholes con rendimientos del 90-99% usando agua, oxígeno, luz UVA y un catalizador de boro. El catalizador es recuperable y tiene aplicaciones en la conversión de metano a metanol, benceno a fenol, y grasa animal en derivados, con potencial en sectores energéticos, ambientales e industriales. Estos logros avanzan hacia la creación de una empresa tecnológica denominada SunOx.

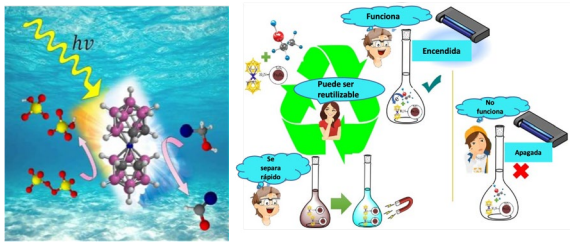


Figura 4. Izquierda: Representación esquemática del cobaltabis(dicarballuro) como catalizador fotoredox eficiente en la oxidación de alcoholes aromáticos y alifáticos en agua. Reproducido de la referencia [19]. Derecha: El catalizador fotoredox homogéneo fue eficientemente heterogenizado sobre nanopartículas magnéticas recubiertas de sílice con grupos amino. Reproducido de la referencia [20].

- Dopantes de polímeros orgánicos conductores (COPs): El Premio Nobel de Química del 2000 lo compartieron A.J. Heeger, A.G. MacDiarmid y H. Shirakawa por el descubrimiento y desarrollo de los COPs al demostrar cómo el plástico puede ser modificado para conducir corriente eléctrica lo que cambió radicalmente la percepción del plástico como material. Los COPs también se conocen como "metales sintéticos" porque una de sus posibles aplicaciones es como sustitutos de los metales o de los semiconductores inorgánicos. Los COPs más populares reportados son el polipirrol (PPy), el politiofeno (PTh) y el poli(3,4-etilendioxitiofeno) (PEDOT). El aspecto más importante de los COPs es su capacidad para actuar como semiconductores electrónicos controlados mediante un cambio redox a un potencial específico, complementado por el movimiento de iones dopantes hacia el interior o exterior del material, dependiendo de la carga neta del polímero. Los estados conductores y aislantes de los COPs se pueden generar de manera electroquímica a partir de los monómeros correspondientes. Durante la electropolimerización, los aniones de la solución se introducen en la matriz polimérica para neutralizar las cargas positivas generadas en las cadenas de polímero oxidadas. Estos aniones, llamados agentes dopantes, desempeñan un papel significativo en las propiedades químicas y físicas, en la estabilidad y en la morfología del polímero.

La gran estabilidad química, las propiedades redox y el gran volumen molecular del anión cobaltabis(dicarballuro) y sus derivados nos hizo sospechar que tendrían poca movilidad dentro de la matriz polimérica de los COPs al ser utilizados como dopantes y aportarían nuevas propiedades a dichos materiales. Preparamos COPs de polipirrol (PPy),[22] y politiofeno (PEDOT),[23-24] (Figura 5) dopados con cobaltabis(dicarballuro) que provoca un notable aumento de la estabilidad de los materiales frente a la sobre oxidación cuando se les aplica potenciales fuertemente oxidantes.[22] Además, el material presenta un comportamiento cuasi-Nerstiano como sensor potenciométrico de pH y márgenes de linealidad entre pH's 3 y 12 permitiendo todo tipo de valoraciones ácido-base con exactitudes y tiempos de análisis comparables a los electrodos de pH de vidrio convencionales.[25]

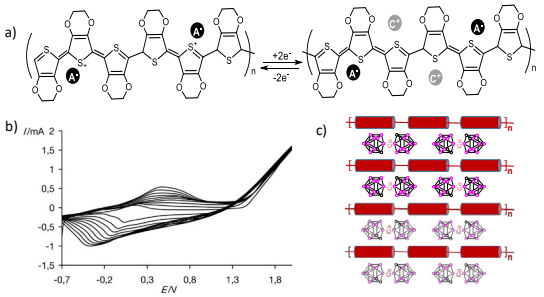


Figura 5. a) Reacción de oxidación/reducción del PEDOT(Anion) a través de extracción e inclusión de cationes. b) Crecimiento potenciodinámico del material PPy(Anión). c) Representación de los COPs dopados con cobaltabis(dicarballuro).

A raíz de los resultados alcanzados con estos materiales conductores, abrimos nuevas aplicaciones de los clústeres de boro icosaédricos como componentes clave en el campo de nuevos biomateriales para la salud con el desarrollo de sensores potenciométricos, microsensores y biosensores como se detalla a continuación.[7]

- Sensores potenciométricos para la detección de fármacos: Hemos preparado sensores potenciométricos selectivos a antibióticos (isoniacida, pirazinamida y tetraciclina),[26,27] y aminoácidos (*d*- and *l*-triptófano, *d*- and *l*-histidina y *d*- and *l*-arginina),[28,29] que contienen el clúster cobaltabis(dicarballuro) como componente electroquímico fundamental (Figura 6). Estos sensores son capaces de detectar el compuesto para el cual han sido diseñados, incluso en soluciones que contienen múltiples componentes. Además, en el caso de los antibióticos, puede detectar el isómero óptico deseado en presencia de su complementario.

Estos electrodos permiten detectar antibióticos en alimentos como leche y carne, lo que es relevante para personas alér-

© 2025 Real Sociedad Española de Química



Figura 6. Preparación de los sensores potenciométricos en el IC-MAB-CSIC con el esquema de su funcionamiento.

gicas a éstos. Asimismo, se puede detectar la presencia de trimetilamina en pescado congelado permitiendo evaluar si este no era fresco en el momento de ser congelado, ya que su formación resulta de la degradación de compuestos presentes en el pescado fresco. Entre otras aplicaciones, detectan drogas como nicotina, cocaína, anfetaminas, heroína y LSD, o las setas alucinógenas en sangre y/o en orina.

- Microsensores: Hemos preparado micro-electrodos de un tamaño de 300 µmm x 300 µmm para detectar cationes Na^+, K^+ y H^+. El control de estos cationes es muy importante en medicina tanto en las operaciones cardíacas como en el transporte de órganos para ser trasplantados (Figura 7a).[30]

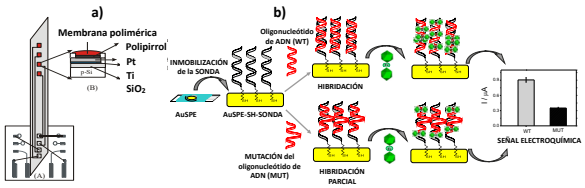


Figura 7. a) Microsensor y b) biosensor conteniendo clústeres de B.

- Biosensores: Hemos usado cobaltabis(dicarballuro) en un biosensor para detectar *Helicobacter pylori*, una bacteria causante de úlceras gástricas y cáncer (Figura 7b). El electrodo contiene ADN bacteriano que, al unirse con su complementario en la muestra del paciente, forma una cadena doble que detecta electroquímicamente mutaciones en el ADN y las distingue según su ubicación.[31]

- **Agentes de contraste de rayos X:** También llevamos a cabo la preparación de cementos óseos que contienen I_4-*o*-carborano como agente de contraste de rayos X para su uso en vertebroplastia (Figura 8). La vertebroplastia es un procedimiento ambulatorio realizado por un radiólogo para estabilizar fracturas de columna, comúnmente causadas por osteoporosis.

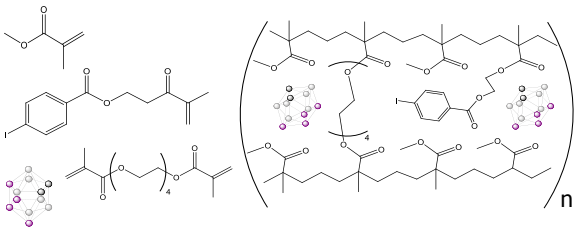


Figura 8. Reacción de copolimerización para obtener el cemento.

Se inyecta cemento óseo en la vértebra fracturada para aliviar el dolor, mejorar la movilidad y reforzar la estabilidad. Preparamos el cemento óseo polimerizando metacrilato de metilo y su derivado yodado, junto con un agente reticulante y el clúster de boro tetraiodado, para incorporarlo al polímero de metilmetacrilato.[32]

Los clústeres icosaédricos carboranos y metalabis(dicarballuros) en medicina

La química orgánica ha sido clave en el desarrollo de medicamentos, con la mayoría de los fármacos siendo moléculas orgánicas que también incluyen elementos como nitrógeno, oxígeno, fósforo y halógenos. A mediados del siglo XX, se inició la investigación de compuestos de boro para tratar el cáncer mediante la Terapia por Captación de Neutrones (BNCT) del isótopo ^{10}B. Tras la captura, el ^{10}B se convierte en $^{11}B^*$ excitado que decae liberando una partícula α (^4_2He) y ^7Li. Los efectos ionizantes destruyen células en un radio de 5-9 mm alrededor del punto en que tiene lugar la reacción como se indica en la Figura 9. La eficiencia del BNCT requiere que el tejido canceroso reciba más de 20 µg de ^{10}B por gramo de tumor.

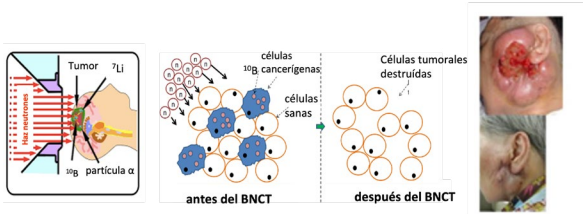


Figura 9. Esquema de cómo se realiza el tratamiento de BNCT, su efecto y fotografías de un paciente antes y después del tratamiento.

Los clústeres icosaédricos de boro con aromaticidad tridimensional pueden albergar 12 sustituyentes en sus vértices, cubriendo el espacio 3D. Estos clústeres los hemos funcionalizado para actuar como andamios multifuncionales (Figura 10a),[33,34] para unirlos a inhibidores de receptores de quinasas (EGF: erlotinib,[35] sunitinib,[36] lapatinib;[37] (Figura 10b) o anclarlos a nanopartículas de oro y magnéticas (Figura 10c).[38,39] Debido a su alta densidad de boro, los hemos probado para su uso como nanotransportadores multifuncionales en tratamientos contra el cáncer, permitiendo terapias combinadas o multiterapias.

Descubrimos que el cobaltabis(dicarballuro) es citoestático,[40] no citotóxico, forma vesículas monocapa,[41] cruza las membranas celulares,[42,43,44] y llega al núcleo,[45] interaccionando electrostáticamente con el ADN.[31,45] El ferrabis(dicarballuro) penetra en el núcleo y se intercala en el ADN.[46]

Estos resultados son muy importantes porque los fármacos antineoplásicos son los que intercalan con el ADN; pero además, estudios de Montecarlo indican que la efectividad del BNCT es muy superior si el ^{10}B se localiza en el núcleo de la célula. Nuestros resultados nos llevaron a irradiar por BNCT *in vitro* y *in vivo* gliobastomas (GBM),[37,47] cáncer de mama[48] y cáncer de cabeza y cuello;[49] estudios que han sido muy prometedores.

Además, aprovechando el alto contenido isotópico de ^{11}B en los metallabis(dicarballuros), hemos probado por primera vez estos compuestos en la terapia de cáncer con protones (PBFR) en la que se producen 3 partículas α (Figura 11).[45]

Los resultados de nuestros estudios *in vitro*, *in vivo* y de irradiación destacan de manera convincente que estos pequeños aniones son prometedores candidatos como futuros radio-sensibilizadores en el tratamiento del GBM mediante radioterapias

© 2025 Real Sociedad Española de Química

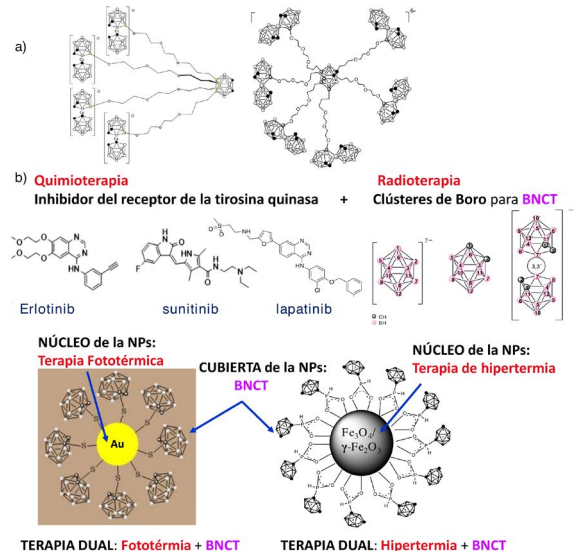


Figura 10. a) Clúster de o-carborano como núcleo de dendrones y dendrímeros. b) Moléculas hibridas (EGF + clústeres). c) NPs de oro y magnéticas funcionalizadas con o-carboranos.

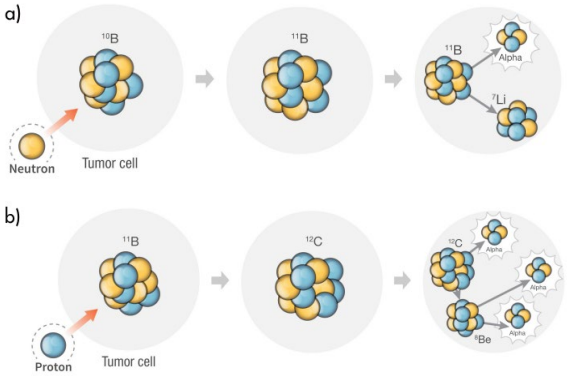


Figura 11. Reacciones nucleares: a) Boron Neutron Capture Therapy (BNCT); b) Proton Boron Fusion Reaction (PBFR).

multimodales. Su uso en radioterapias multimodales podría lograr el mismo efecto terapéutico con dosis más bajas, reduciendo los efectos secundarios del tratamiento oncológico y mejorando significativamente la calidad de vida del paciente.

Conclusiones

Este artículo destaca las propiedades únicas del boro, especialmente en forma de clústeres, que aportan características excepcionales a los (bio)materiales. Se subraya su impacto en polímeros, catálisis, sensores y medicina, áreas en las que he contribuido a lo largo de mi carrera en el ICMAB-CSIC junto a Francesc Teixidor. Estos avances demuestran cómo el boro sigue ampliando las fronteras en ciencia de materiales; los doctores Rosario Núñez, José Giner y Marisa Romero continúan con investigaciones innovadoras en fotoluminiscencia, MOFs y catálisis, respectivamente.

Bibliografía

[1] H. Davy, Philos. *Trans. Royal Soc.* **1809**, *99*, 39–104.
[2] J. Berzelius, *Proc. R. Soc.* **1824**, *12*, 46–98.
[3] D.E. Garrett, *Borates: handbook of deposits, processing, properties, and use*. Academic Press, San Diego (U.S.A.), **1998**.
[4] D.Z. Hobbs, T.T. Campbell, F.E. Block, *Methods Used in Preparing Boron*. U.S. Department of the Interior, Bureau of Mines, **1964**.
[5] M. Garside "Reserves of boron worldwide in 2023, by leading countries," disponible en https://www.statista.com/statistics/264982/world-boron-reserves-by-major-countries/ (consultado: 24/02/2025).
[6]. M. Jaganmohan "Production volume of boron worldwide 2023, by leading country" disponible en https://www.statista.com/statistics/264981/major-countries-in-boron-production/#statisticContainer (consultado el 24/02/2025).
[7] C. Viñas, *Future Med. Chem.* **2013**, *5*, 617-619, https://doi.org/10.4155/fmc.13.41.
[8] J. Poater, M. Sola, C. Viñas, F. Teixidor, *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 7437-7443, https://doi.org/10.1002/chem.201600510.
[9] J. Poater, M. Sola, C. Viñas, F. Teixidor, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 12191-12195, https://doi.org/10.1002/anie.201407359.
[10] J. Poater, C. Viñas, I. Bennour, S. Escayola-Gordils, M. Solà, F. Teixidor, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 9396-9407, https://doi.org/10.1021/jacs.0c02228.
[11] S. Mukherjee, P.J. Thilagar, *Mat. Chem. C* **2016**, *4*, 2647-2662, https://doi.org/10.1039/C5TC02406D.
[12] S.I. Lu, I. Hamerton, *Prog. Polym. Sci.* **2002**, *27*, 1661-1712, https://doi.org/10.1016/S0079-6700(02)00018-7.
[13] R. Nuñez, I. Romero, F. Teixidor, C. Viñas, *Chem. Soc. Rev.* **2016**, *45*, 5147-5173, https://doi.org/10.1039/C6CS00159A.
[14] Y. Chujo, K. Tanaka, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2015**, *88*, 633-643, https://doi.org/10.1246/bcsj.20150081.
[15] R. Brand, P. Lunkenheimer, A. Loidl, *J. Chem. Phys.* **2002**, *116*, 10386-10401, https://doi.org/10.1063/1.1477186.
[16] R.N. Grimes, *Carboranes*, Elsevier Inc., New York, 3rd Ed., **2016**.
[17] F. Teixidor, C. Viñas, J. Giner Planas, I. Romero, R. Núñez en *Advances in Catalysis, Vol. 71* (Eds.: M. Diéguez, R. Núñez), Academic Press, Cambridge, USA, **2022**, 1-45.
[18] O Tutusaus, C. Viñas, R. Núñez, F. Teixidor, A. Demonceau, S. Delfosse, A.F. Noels, I. Mata, E. Molins, *J. Am. Chen. Soc.* **2003**, *125*, 11830-11831, https://doi.org/10.1021/ja992970w.
[19] I. Guerrero, Z. Kelemen, C. Viñas, I. Romero, F. Teixidor, *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 5027-5036, https://doi.org/10.1002/chem.201905395.
[20] I. Guerrero, A. Saha, J.A.M. Xavier, C. Viñas, I. Romero, F. Teixidor, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2020**, *12*, 56372-56384, https://doi.org/10.1021/acsami.0c17847.
[21] I. Guerrero, C. Viñas, I. Romero, F. Teixidor, *Green Chem.* **2021**, *23*, 10123-10131, https://doi.org/10.1039/d1gc03119h.
[22] C. Masalles, J. Llop, C. Viñas, F. Teixidor, *Adv. Mater.* **2002**, *14*, 826-829, https://doi.org/10.1002/1521-4095(20020605)14:11%3C826::AID-ADMA826%3E3.0.CO;2-C.
[23] V. David, C. Viñas, F. Teixidor, *Polymer* **2006**, *47*, 4694-4702, https://doi.org/10.1016/j.polymer.2006.04.017.
[24] J.A.M. Xavier, I. Fuentes, M. Nuez-Martínez, Z. Kelemen, A. Andrio, C. Viñas, V. Compañ, F. Teixidor, *J. Mater. Chem. A* **2022**, *10*, 16182-16192, https://doi.org/10.1039/d2ta02079c.
[25] C. Masalles, S. Borrós, C. Viñas, F. Teixidor, *Anal. Bioanal. Chem.* **2002**, *372*, 513-518, https://doi.org/10.1007/s00216-001-1221-7.
[26] A. Stoica, C. Viñas, F. Teixidor, *Chem. Commun.* **2008**, 6492–6494, https://doi.org/10.1039/b813285b.
[27] H.B. Halima, A. Baraket, C. Viñas, N. Zine, J. Bausells, N. Jaffrezic-Renault, F. Teixidor, A. Errachid, *Biosensors* **2023**, *13*, 71, https://doi.org/10.3390/bios13010071.
[28] A. Stoica, C. Viñas, F. Teixidor, *Chem Comun.* **2009**; 4988-4990, https://doi.org/10.1039/b910645f.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

[29] A. Stoica, C. Kleber, C. Viñas, F. Teixidor, *Electrochim. Acta* **2013**, *113*, 94–98, https://doi.org/10.1016/j.electacta.2013.09.025.
[30] N. Zine, J. Bausells, F. Vocanson, R. Lamartine, Z. Asfari, F. Teixidor, E. Crespo, I.A. Marques de Oliveira, J. Samitier, A. Errachid, *Electrochim. Acta,* **2006**, *51*, 5075-5079, https://doi.org/10.1016/j.electacta.2006.03.060.
[31] T. García-Mendiola, V. Bayon-Pizarro, A. Zaulet, Isabel Fuentes, F. Pariente, F. Teixidor, C. Viñas, E. Lorenzo, *Chem. Sci.* **2016**, *7*, 5786-5797, https://doi.org/10.1039/c6sc01567k.
[32] A. Pepiol, F. Teixidor, K. Saralidze, C. van der Marel, P. Willems, L. Voss, M.L.W. Knetsch, C. Viñas, L.H. Koole, *Biomaterials* **2011**, *32*, 6389-6398, https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2011.05.056.
[33] F. Teixidor, R. Sillanpää, A. Pepiol, M. Lupu, C. Viñas, *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 12778-12786, https://doi.org/10.1002/chem.201501223.
[34] F. Teixidor, A. Pepiol, C. Viñas, *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 10650-10653, https://doi.org/10.1002/chem.201501181.
[35] M. Couto, M.F. García, C. Alamon, M. Cabrera, P. Cabral, A. Merlino, F. Teixidor, H. Cerecetto, C. Viñas, *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 3122-3126, https://doi.org/10.1002/chem.201705181.
[36] M. Couto, C. Alamon, S. Nievas, M. Perona, M.A. Dagrosa, F. Teixidor, P. Cabral, C. Viñas, H. Cerecetto, *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 14335-14340, https://doi.org/10.1002/chem.202002963.
[37] M. Couto, C. Alamon, M.F. García, M. Kovacs, E. Trias, S. Nievas, E. Pozzi, P. Curotto, S. Thorp, M.A. Dagrosa, F. Teixidor, C. Viñas, H. Cerecetto, *et al. Cells* **2020**, *9*, https://doi.org/10.3390/cells9061408.
[38] A.M. Cioran, A.D. Musteti, F. Teixidor, M. Brust, C. Viñas, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 212-222, https://doi.org/10.1021/ja203367h.
[39] E. Oleshkevich, F. Teixidor, A. Rusell, C. Viñas, *Inorg. Chem.* **2018**, *57*, 462-470, https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.7b02691.
[40] M. Tarres, E. Canetta, E. Paul, J. Forbes, K. Azzouni, C. Viñas, F. Teixidor, A.J. Harwood, *Sci. Rep.* **2015**, *5*: 7804, https://doi.org/10.1038/srep07804.
[41] P. Bauduin, S. Prevost, P. Farràs, F. Teixidor, O. Diat, T. Zemb, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 5298-5300, https://doi.org/10.1002/anie.201100410.
[42] C. Verdiá-Báguena, A. Alcaraz, V.M. Aguilella, A.M. Cioran, S. Tachikawa, H. Nakamura, F. Teixidor, C. Viñas, *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 6700-6703, https://doi.org/10.1039/c4cc01283f.
[43] D.C. Malaspina, F. Teixidor, C. Viñas, J. Faraudo, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2023**, *25*, 27942-27948, https://doi.org/10.1039/d3cp03614f.
[44] I. Fuentes, T. García-Mendiola, S. Sato, M. Pita, H. Nakamura, E. Lorenzo, F. Teixidor, F. Marques, C. Viñas, *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 17239-17254, https://doi.org/10.1002/chem.201803178.
[45]. M. Nuez-Martinez, M. Queralt-Martin, A. Muñoz-Juan, V.M. Aguilella, A. Laromaine, F. Teixidor, C. Viñas, C.G. Pinto, T. Pinheiro, J.F. Guerreiro, F. Mendes, C. Roma-Rodrigues, P.V. Baptista, A.R. Fernandes, S. Valic, F. Marques, *J. Mater. Chem. B* **2022**, *10*, 9727–9934, https://doi.org/10.1039/d2tb01818g.
[46]. L. Gutierrez-Galvez, T. García-Mendiola, E. Lorenzo, M. Nuez-Martinez, C. Ocal, S. Yan, F. Teixidor, T. Pinheiro, F. Marques, C. Viñas, *J. Mater. Chem. B* **2024**, *12*, 9550-9565, https://doi.org/10.1039/d4tb01177e.
[47] A. Belchior, B. C. Alves, E. Mendes, F. Megre, L. C. Alves, P. Santos, K. Nishimura, H. Nakamura, F. Teixidor, C. Viñas, J. M. Sampaio, F. Marques, T. Pinheiro . *EJNMMI RESEARCH* **2025**, *15*, 13, https://doi.org/10.1186/s13550-025-01199-6.
[48] C. Alamon, B. Dávila, M.F. García, S. Nievas, M.A. Dagrosa, S. Thorp, M. Kovacs, E. Trias, R. Faccio, M. Gabay, N. Zeineh, A. Weizman, F. Teixidor, C. Viñas, M. Gavish, H. Cerecetto, M. Couto, *Mol. Pharmaceutics* **2023**, *23*, 2702-2713, https://doi.org/10.1021/acs.molpharmaceut.3c00152.
[49] M.A. Palmieri, A. Monti Hughes, V.A. Trivillin, M.A. Garabalino, P.S. Ramos, S.I. Thorp, P. Curotto, E.C.C. Pozzi, M. Nuez Martínez, F. Teixidor, C. Viñas, A.E. Schwint, S.I. Th, *Pharmaceuticals* **2024**, 17, 1367, https://doi.org/10.3390/ ph17101367.



Clara Viñas i Teixidor
Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC)
C-e: clara@icmab.es
ORCID: 0000-0001-5000-0277

Doctora en Farmacia y licenciada en Química y Farmacia, ha sido directora del Laboratorio Municipal de Sabadell y actualmente trabaja en el ICMAB-CSIC. Académica de la Academia Europaea, ha destacado en Química Organometálica y del boro. Ha liderado proyectos nacionales e internacionales, con 7 patentes, 403 artículos (índice h=60), 20 capítulos de libros y 16 tesis doctorales supervisadas. Recibió el premio a la excelencia científica de la SCQ-2022 y contribuyó a la nomenclatura de clústeres de boro para la IUPAC. Figura en el top 2% de los químicos más citados en el ranking de Stanford-Elsevier (carrera y período 2020-2024).

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 25-31
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2016

La revista de la Real Sociedad Española de Química

ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

Errores sobre los criterios de espontaneidad y de equilibrio químico

Errors on spontaneity and chemical equilibrium criteria

Juan Quílez*

Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Química y de la Física. RSEQ – RSEF. Valencia. España

PALABRAS CLAVE:

Espontaneidad
Equilibrio químico
Energía libre de reacción
Unidades
Errores

RESUMEN:

Este trabajo revisa el tratamiento termodinámico que establece los criterios generales de espontaneidad y de equilibrio de una reacción química. Para ello, se definen las magnitudes $\Delta_r G$, $\Delta_r G^0$, ΔG y ΔG^0. Además, se proporcionan las relaciones matemáticas que existen entre ellas. Particularmente, se centra en el cálculo de $\Delta_r G$, así como en el significado de sus valores. Esta fundamentación teórica permite comparar el empleo habitual de estas magnitudes en los libros de texto de química general universitarios con el correspondiente de pruebas oficiales de nivel preuniversitario. Los resultados obtenidos revelan la existencia de confusiones generalizadas referidas tanto al criterio general de espontaneidad como al de equilibrio químico, así como a las unidades con las que se expresan las magnitudes asociadas.

KEYWORDS:

Spontaneity
Chemical equilibrium
Free energy of reaction
Units
Errors

ABSTRACT:

This paper reviews the general thermodynamic criteria for both the spontaneity and equilibrium of a chemical reaction. For this purpose, it defines the quantities $\Delta_r G$, $\Delta_r G^0$, ΔG y ΔG^0. Also, the mathematical relationships that exist among them are provided. It focuses on the calculation of $\Delta_r G$, as well as on the meaning of its values. This theoretical foundation allows us to compare the treatment usually given to these quantities in university general chemistry textbooks with that which corresponds to official assessment exams at pre-university level. The results obtained reveal the existence of widespread confusion regarding the spontaneity and chemical equilibrium criteria, as well as the units in which the associated quantities are expressed.

Introducción

En el estudio de cómo se interpreta el currículum establecido de Química de bachillerato se pueden examinar las correspondientes pruebas oficiales de evaluación. En concreto, se trata de conocer cómo se presentan y manejan los distintos conceptos, así como las magnitudes químicas asociadas. En este trabajo, estos exámenes corresponden a las pruebas de Química de acceso a la universidad y a los de las Olimpiadas de Química nacionales. En particular, se estudia si existen algunas deficiencias o errores, tanto en el enunciado como en la resolución de estas pruebas, referidas a los criterios termodinámicos de espontaneidad y de equilibrio químico, de forma análoga a lo realizado en otros trabajos que han analizado previamente exámenes de selectividad.[1-3]

Esta investigación se estructura en dos partes. En primer lugar, se realiza un extenso estudio termodinámico en el que se hace énfasis en la definición, el significado y el cálculo de las magnitudes asociadas al establecimiento de un criterio general de espontaneidad. En la parte final, tomando como referencia esta fundamentación teórica, se comentan estudios previos[4,5] en los que se han analizado las principales deficiencias encontradas en los libros de texto universitarios en el tratamiento de los conceptos de espontaneidad y de equilibrio químico. Estos resultados facilitan la discusión que se realiza posteriormente referida a las pruebas de evaluación oficiales, fruto del análisis de los enunciados y de las resoluciones de las cuestiones y problemas propuestos.

Como marco curricular normativo se ha tomado lo establecido para Química de bachillerato en el Real Decreto 1105/2014:

> *Contenidos*: Segundo principio de la termodinámica. Entropía. Factores que intervienen en la espontaneidad de una reacción química. Energía de Gibbs.
> *Criterios de evaluación*: Predecir, de forma cualitativa y cuantitativa, la espontaneidad de un proceso químico en determinadas condiciones a partir de la energía de Gibbs.
> *Estándares de aprendizaje evaluables*: Identifica la energía de Gibbs con la magnitud que informa sobre la espontaneidad de una reacción química. Justifica la espontaneidad de una reacción química en función de los factores entálpicos, entrópicos y de la temperatura (p. 270).[6]

CÓMO CITAR: J. Quílez. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 25-31, http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2016

* C-e: jquilez@uji.es

Manuscrito recibido: 16/01/2025 · aceptado: 17/02/2025

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Criterio general de espontaneidad y de equilibrio químico

En la deducción de un criterio general tanto de espontaneidad como de equilibrio químico, el punto de partida va a ser la función termodinámica extensiva *energía de Gibbs* (*G*).[7] Esta magnitud está completamente determinada por el estado del sistema: temperatura (*T*), presión (*p*) y las cantidades de substancia de las especies químicas presentes (n_i):

$$G = G\,(T,\ p,\ n_1,\ n_2,\ ...,\ n_k)$$

Por tanto, el cambio infinitesimal de esta magnitud (*dG*) se puede expresar en función de la siguiente ecuación

$$dG = \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{p,n_i} dT + \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_{T,n_i} dp + \sum_{i=1}^{k}\left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,\,p,n_j} dn_i$$

donde, $\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{p,n_i} = -S;\ \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_{T,n_i} = V;\ \left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,\,p,n_j} = \mu_i$

por ello, se puede escribir:

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_{i=1}^{k}\mu_i dn_i$$

El último término de la ecuación anterior se puede expresar en función del grado de avance de la reacción (*dξ*), ya que $d\xi = \frac{\partial n_i}{\partial \nu_i}$ (donde ν_i representa el coeficiente estequiométrico de cada una de las substancias que participan en la reacción química):

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_{i=1}^{k}\nu_i\mu_i d\xi$$

De forma semejante, *la energía de Helmholtz* (*A*) está completamente determinada por la temperatura (*T*), el volumen (*V*) y las cantidades de sustancia de las especies químicas presentes (n_i):

$$A = A\,(T,\ V,\ n_1,\ n_2,\ ...,\ n_k)$$

La variación de esta magnitud (*dA*) se puede representar, de forma análoga a *dG*, por la siguiente ecuación:

$$dA = -SdT - pdV + \sum_{i=1}^{k}\nu_i\mu_i d\,\xi$$

En los textos de termodinámica y de química-física normalmente se deduce que un proceso es espontáneo si $(dG)_{T,p} < 0$ (o bien $(dA)_{T,V} < 0$); en el equilibrio, $(dG)_{T,p} = 0$ (o bien $(dA)_{T,V} = 0$).[8,9] Por tanto, para evaluar si a partir de una cierta composición del sistema un proceso químico es espontáneo, en unas determinadas condiciones de temperatura y de presión (o de volumen), se precisa evaluar $(dG)_{T,p}$ (o bien $(dA)_{T,V}$). Es decir, en cada uno de estos dos casos, a partir de unas condiciones iniciales, determinadas por las cantidades de cada una de las sustancias presentes, se puede determinar el sentido de la reacción que puede ocurrir. En este punto resulta importante destacar que el criterio de espontaneidad (o de equilibrio) supone la evaluación de *dG* (o *dA*), pero no de incrementos (*ΔG* o *ΔA*).[10]

Para determinar el sentido espontáneo de un proceso o si el sistema se encuentra en equilibrio, se va a definir una magnitud intensiva, ***energía libre de reacción*** ($\Delta_r G$):[7,11]

$$\Delta_r G = \left(\frac{\partial G}{\partial \xi}\right)_{T,p} = \left(\frac{\partial A}{\partial \xi}\right)_{T,V} = \sum_{i=1}^{k}\nu_i\mu_i$$

En algunos libros también se define una nueva magnitud (***afinidad química,*** $\mathcal{A}$) que realiza la misma función que $\Delta_r G$, ya que $\mathcal{A} = -\Delta_r G$.[7,8,12,13,14]

Las expresiones matemáticas de *dG* y *dA*, en función de $\Delta_r G$ (y de $\mathcal{A}$) son:

$$dG = -SdT + Vdp + \Delta_r G d\xi = -SdT + Vdp - \mathcal{A}\,d\xi$$
$$dA = -SdT - pdV + \Delta_r G d\xi = -SdT - pdV - \mathcal{A}\,d\xi$$

Si *T* y *p* permanecen constantes: $(dG)_{T,p} = \Delta_r G d\xi = -\mathcal{A}\,d\xi$
Si *T* y *V* permanecen constantes: $(dA)_{T,V} = \Delta_r G d\xi = -\mathcal{A}\,d\xi$

Con la ayuda de estas ecuaciones ya se puede establecer, independientemente de las condiciones, un criterio general para los procesos espontáneos y de equilibrio químico (Tabla 1).

Tabla 1. Criterios de espontaneidad y de equilibrio químico.

Proceso espontáneo
$(dG)_{T,p} < 0;\ (dA)_{T,V} < 0 \rightarrow \Delta rGd\xi < 0;\ \mathcal{A}\,d\xi > 0$
Equilibrio químico
$(dG)_{T,p} = (dA)_{T,V} = 0 \rightarrow \Delta_r G d\xi = \mathcal{A}\,d\xi = 0$

Finalmente, se puede concluir que el signo de $\Delta_r G$ (y también de $\mathcal{A}$) nos informa del sentido espontáneo de una reacción química:

- si la reacción está permitida en el sentido de Reactivos → Productos ($d\xi > 0$), se cumple que $\Delta_r G < 0$ y $\mathcal{A} > 0$;
- si la reacción está permitida en el sentido Productos → Reactivos ($d\xi < 0$), se cumple que $\Delta_r G > 0$ y $\mathcal{A} < 0$.

Análogamente, ya que en el estado de equilibrio la reacción ya no avanza en ningún sentido, se cumple que $d\xi = 0$, lo que implica que $\Delta_r G = \mathcal{A} = 0$.

Antes de continuar esta discusión, resulta conveniente advertir que $\Delta_r G$ no es un incremento, como podría inferirse del signo Δ. $\Delta_r G$ representa la derivada $\left(\frac{\partial G}{\partial \varepsilon}\right)_{p,T} = \left(\frac{\partial A}{\partial \xi}\right)_{T,V}$.[15-19] Es decir, $\Delta_r G$ es la velocidad instantánea de cambio de *G* respecto de *ξ* (o de *A* respecto de *ξ*). Un estudio gráfico detallado del significado de la representación *G* = f(*ξ*) puede ayudar a aclarar más este aspecto.[10,14,18,20,21] En la figura 1 se puede apreciar que $\Delta_r G$ es la pendiente de la curva en un punto dado.

No se debe confundir $\Delta_r G$ con *ΔG* para establecer el criterio general de espontaneidad o el de equilibrio, ya que *ΔG* sí que es un incremento. En la figura 1 se han representado dos posibilidades: $\Delta G_1 = G_{equil} - G_{react}$; $\Delta G_2 = G_{equil} - G_{prod}$, en donde $\Delta G < 0$. En estos dos casos, su valor negativo ayuda a enfatizar que G_{equil} corresponde al valor mínimo de *G* (que se puede alcanzar partiendo únicamente de los reactivos o de los productos). Pero otras múltiples diferencias de valores de *G* también pueden dar un valor negativo. Por ejemplo, en el caso $\Delta G_3 = G_{react} - G_{prod} < 0$, se podría interpretar erróneamente[10] que en todos los puntos de esta transición la reacción es espontánea en el mismo sentido, por lo que $\Delta G < 0$ no se debe emplear como criterio general de espontaneidad. Otra posible circunstancia que conviene aclarar es la que corresponde a todas las situaciones en las que se obtiene una diferencia de valores de *G* nula (*ΔG* = 0; mismo valor de *G* antes y después del equilibrio). Se debe insistir en que el estado de equilibrio químico queda establecido singularmente cuando $\Delta_r G = 0$ (que corresponde a un valor mínimo de *G*, determinado para un gra-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

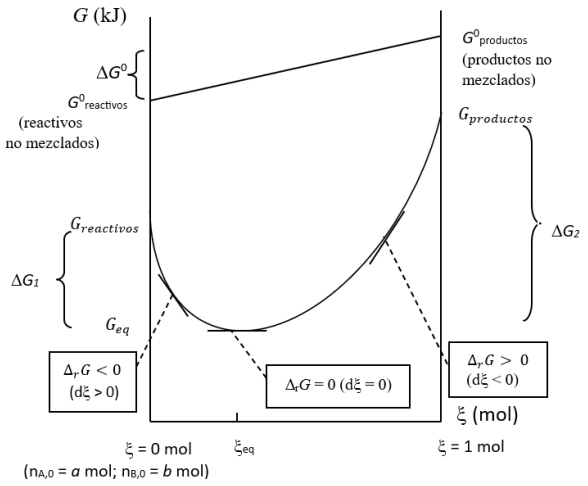


Figura 1. Variación de $G_{p,T}$ con ξ, para el proceso químico: *a* A(g) + *b* B(g) ⇌ *r* R(g) + *s* S(g). El signo de la pendiente en un punto de la curva: $\Delta_r G = \left(\frac{\partial G}{\partial \xi}\right)_{T,p}$ determina el sentido de la reacción espontánea: i) $\Delta_r G < 0$ ($d\xi > 0$): Reac. → Prod; ii) $\Delta_r G > 0$ ($d\xi < 0$): Prod. → Reac.; iii) $\Delta_r G$ (valor mínimo de *G*): equilibrio.

do de avance específico, ξ_{eq}). Por tanto, no tiene sentido definir ese estado para cualquier diferencia en la que $\Delta G = 0$.[10]

Para mostrar que $\Delta_r G$ y ΔG son magnitudes diferentes también se puede realizar el razonamiento matemático que se plantea a continuación. Partiendo de la definición de $\Delta_r G$:

$$\Delta_r G = \left(\frac{\partial G}{\partial \xi}\right)_{T,p}$$

podemos escribir $dG = (\Delta_r G)_{T,p}\, d\xi$, de modo que para obtener una variación ΔG entre dos estados, se procede a formular la correspondiente integral:

$$\Delta G = G_2 - G_1 = \int_{\xi_1}^{\xi_2} (\Delta_r G)_{T,p} d\xi$$

Teniendo en cuenta la dependencia de $\Delta_r G$ *con* ξ,[22] normalmente esta integral no se puede evaluar explícitamente.[23] A diferencia de lo que ocurre con otras funciones termodinámicas como la entalpía o la energía interna (en las que se cumple que $\Delta H = \Delta_r H \cdot \xi$, y que $\Delta U = \Delta_r U \cdot \xi$), no se puede establecer una relación análoga en el caso de $\Delta_r G$ y ΔG. Es decir, $\Delta G \neq \Delta_r G \cdot \xi$.[7]

Por otro lado, según la representación de la figura 1, también se debe aclarar que tampoco se debe confundir $\Delta_r G$ con la magnitud extensiva $\Delta G^0 = G^0_{productos} - G^0_{reactivos}$ (cambio hipotético desde el estado inicial de los reactivos no mezclados hasta el final de productos no mezclados);[22] $\Delta_r G \neq \Delta G^0$.

Como conclusión, sólo se debe considerar el signo de $\Delta_r G$ (o de $\mathcal{A}$) para determinar el sentido de la reacción espontánea. Análogamente, únicamente el valor nulo de $\Delta_r G$ (o de $\mathcal{A}$) significa que el sistema se encuentra en equilibrio. Las otras magnitudes representadas en la figura 1 (ΔG^0 y ΔG) no se deben considerar para estos fines.

En la Tabla 2 se muestra un resumen de las magnitudes termodinámicas introducidas, así como lo que corresponde al cálculo de $\Delta_r G$, que se desarrolla en el siguiente apartado.

Tabla 2. Definición, cálculo, significado de su valor y unidades de $\Delta_r G$, $\Delta_r G^0$, ΔG y ΔG^0.

Energía libre de reacción (magnitud intensiva; unidades: kJ mol^{-1}):

$$\Delta_r G = \left(\frac{\partial G}{\partial \xi}\right)_{T,p} = \sum_i \nu_i \mu_i$$

$\Delta_r G < 0$ (Reactivos → Productos); $\Delta_r G > 0$ (Productos → Reactivos);
$\Delta_r G = 0$ (equilibrio)
$\Delta_r G = \Delta_r G^0 + RT\ lnQ$
$\Delta_r G = RTln\ Q/K$
(si $Q < K$: Reactivos → Productos) (si $Q > K$: Productos → Reactivos)

Energía libre de reacción estándar (mag. intensiva; unid.: kJ mol^{-1}):

$$\Delta_r G^0 = \left(\frac{\partial G^0}{\partial \xi}\right)_T = \sum \nu_i \mu_i^0$$

$\Delta_r G^0 = \Delta_r H^0 - T\Delta_r S^0$
$\Delta_r G^0 = \sum_i \nu_i \Delta_f G^0$
$\Delta_r G^0 = -RT\ lnK$; $K = e^{-\Delta rG^0/RT}$ si $\Delta_r G^0 < 0$, entonces $K > 1$ y si $\Delta_r G^0 > 0$, se cumple que $K < 1$

Variación energía de Gibbs (magnitud extensiva; unidades: kJ):
$\Delta G = G_2 - G_1$
$\Delta G \neq \Delta_r G \cdot \xi$

Variación de la energía de Gibbs estándar (extensiva; unidades: kJ):
$\Delta G^0 = G^0_{productos} - G^0_{reactivos}$
$\Delta G^0 = \Delta_r G^0$ (1 mol)

Cálculo de $\Delta_r G$

Una vez definidos los criterios generales de espontaneidad y de equilibrio químico en función de $\Delta_r G$, el siguiente paso supone conocer cómo se puede realizar el cálculo de esta magnitud intensiva. En este apartado se va a desarrollar una ecuación que permite determinar el valor (y, por tanto, el signo) de $\Delta_r G$. En consecuencia, esta fórmula matemática resulta de mucha utilidad para conocer el sentido en el que se producirá un proceso químico (a temperatura constante), en unas condiciones iniciales de no equilibrio. Como se verá a continuación, a partir de esta expresión matemática, se va a concluir que el valor de $\Delta_r G$ depende, a una determinada temperatura, de dos factores: la energía libre de reacción estándar, $\Delta_r G^0$ y el cociente de reacción, *Q*.

Energía libre de reacción estándar, $\Delta_r G^0$

La magnitud intensiva **energía libre de reacción estándar**, $\Delta_r G^0$, se define, de forma análoga a $\Delta_r G$, como la rapidez de cambio de la energía de Gibbs estándar:

$$\Delta_r G^0 = \left(\frac{\partial G^0}{\partial \xi}\right)_T = \sum_{i=1}^{k} \nu_i \mu_i^0$$

En la figura 1 se puede comprobar que se trata de una magnitud intensiva:

$$\Delta_r G^0 = \frac{\Delta G^0(kJ)}{\Delta \xi(\text{mol})} = \frac{G^0_{prod} - G^0_{react}\ (kJ)}{(1-0)\text{mol}}$$

Esta relación entre ΔG^0 y $\Delta_r G^0$ también se puede obtener a partir de la definición de $\Delta_r G^0$:

$$dG^0 = \Delta_r G^0 \cdot d\xi$$

© 2025 Real Sociedad Española de Química

de modo que, integrando:

$$\Delta G^0 = \int_{\xi=0}^{\xi=1} \Delta_r G^0 d\xi \; ; \; \Delta G^0 = \int_{\xi=0}^{\xi=1} \left[\sum_{i=1}^{k} \nu_i \mu_i^0\right] d\xi$$

$$\Delta G^0 = \left(\sum_{i=1}^{k} \nu_i \mu_i^0\right) \int_{\xi=0}^{\xi=1} d\xi \; ; \; \Delta G^0 = \Delta_r G^0 (1\ mol)$$

[conviene de nuevo recordar que $\Delta G \neq \Delta_r G \cdot (1mol)$].

El cálculo de $\Delta_r G^0$ se puede realizar de varias formas.[24] Un método sencillo emplea la siguiente ecuación:

$$\Delta_r G^0 = \Delta_r H^0 - T\Delta_r S^0$$

ya que los valores de $\Delta_r H^0$ y de $\Delta_r S^0$ están tabulados, siendo sus unidades kJ/mol y J/(mol K), respectivamente. Alternativamente, también se puede calcular a partir de tablas termodinámicas de los valores de *energía libre de formación estándar*, $\Delta_f G^0$:

$$\Delta_r G^0 = \sum_i \nu_i \Delta_f G_i^0$$

Se ha de advertir que el signo del valor de $\Delta_r G^0$ no resulta válido como criterio general de espontaneidad. El valor de $\Delta_r G^0$ es fijo para a una determinada temperatura, a diferencia del valor de $\Delta_r G$, ya que éste también está afectado por la composición de la mezcla reaccionante, según se discute a continuación.

El cociente de reacción, *Q*

Ahora ya se está en condiciones de introducir la ecuación que permite el cálculo de $\Delta_r G$. Su expresión matemática parte de la siguiente relación: $\Delta_r G = \sum_{i=1}^{k} \nu_i \mu_i$. Para este desarrollo, se debe tener en cuenta la expresión matemática del potencial químico,

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT ln a_i$$

Para un comportamiento ideal, en el caso de una mezcla gaseosa, $a_i = \frac{p_i}{p^0}$ (p^0 = 1 bar) y en el de una disolución acuosa: $a_i = \frac{c_i}{c^0}$ (c^0 = 1 mol L^{-1}).

La actividad, a_i, es una magnitud termodinámica adimensional,[25,26] ya que la presión parcial de la especie química considerada (o su concentración en una mezcla en disolución acuosa) está dividida por el correspondiente valor estándar. Conviene insistir en este aspecto, ya que el logaritmo neperiano que se obtiene de la expresión

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT ln a_i$$

necesariamente tiene que ser de una cantidad adimensional.[27,28]

Una vez realizadas esas aclaraciones previas, para una reacción entre gases que se puede representar como

$$a\ A(g) + b\ B(g) \leftrightharpoons r\ R(q) + s\ S(g),$$

empleando la expresión

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT ln \frac{p_i}{p^0} \; (p^0 = 1 \text{ bar})$$

se obtiene finalmente la siguiente ecuación:[7,11,29]

$$\Delta_r G = \Delta_r G^0 + RT\, ln \frac{\left(\frac{p(R)}{p^0}\right)^r \left(\frac{p(S)}{p^0}\right)^s}{\left(\frac{p(A)}{p^0}\right)^a \left(\frac{p(B)}{p^0}\right)^b}$$

que se puede escribir en función de la magnitud adimensional denominada **cociente de reacción, *Q***:

$$Q = \frac{\left(\frac{p(R)}{p^0}\right)^r \left(\frac{p(S)}{p^0}\right)^s}{\left(\frac{p(A)}{p^0}\right)^a \left(\frac{p(B)}{p^0}\right)^b}; \; p^0 = 1 \text{ bar}$$

de forma que finalmente se obtiene la siguiente expresión:

$$\Delta_r G = \Delta_r G^0 + RT\, lnQ$$

Es decir, como se ha advertido previamente, el valor de $\Delta_r G$ está afectado de dos términos: el primero es un valor fijo a una determinada temperatura ($\Delta_r G^0$) y el segundo ($RTlnQ$) depende de la composición de la mezcla gaseosa de no equilibrio, según el valor de Q. Una vez determinados los valores de Q y de $\Delta_r G^0$, el cálculo de $\Delta_r G$ es inmediato. Se debe insistir en que únicamente el signo de $\Delta_r G$ informa del sentido espontáneo de reacción.

Sólo en el caso en que Q = 1 (reactivos y productos en condiciones estándar), se cumple que $\Delta_r G = \Delta_r G^0$. Por tanto, se recalca que el signo de $\Delta_r G^0$ no debe emplearse como criterio general de espontaneidad.

La constante de equilibrio termodinámica, *K*

En el caso particular en el que $\Delta_r G = 0$ (equilibrio), las presiones parciales de la mezcla gaseosa (o, en su caso, de las concentraciones de las sustancias en disolución) corresponden a las de equilibrio. Por ello, de nuevo para el equilibrio químico representado por la siguiente ecuación:

$$a\ A(g) + b\ B(g) \leftrightharpoons r\ R(q) + s\ S(g),$$

se puede escribir:

$$0 = \Delta_r G^0 + RT\, \frac{\left(\frac{p(R)_{eq}}{p^0}\right)^r \left(\frac{p(S)_{eq}}{p^0}\right)^s}{\left(\frac{p(A)_{eq}}{p^0}\right)^a \left(\frac{p(B)_{eq}}{p^0}\right)^b}$$

La **constante de equilibrio termodinámica, *K***, se define como la siguiente magnitud adimensional:

$$K = \frac{\left(\frac{p(R)_{eq}}{p^0}\right)^r \left(\frac{p(S)_{eq}}{p^0}\right)^s}{\left(\frac{p(A)_{eq}}{p^0}\right)^a \left(\frac{p(B)_{eq}}{p^0}\right)^b}; \; p^0 = 1 \text{ bar}$$

Finalmente, se puede escribir:

$$0 = \Delta_r G^0 + RT\, lnK$$

con lo que se cumple: $\Delta_r G^0 = -RT\, lnK$

La discusión precedente permite establecer de forma inequívoca las unidades de $\Delta_r G^0$ y de $\Delta_r G$. En cada una de las expresiones

$$\Delta_r G^0 = -RT\, lnK$$
$$\Delta_r G = \Delta_r G^0 + RT\, lnQ,$$

el logaritmo neperiano se refiere a sendas cantidades adimensionales, por lo que las unidades de $\Delta_r G^0$ y de $\Delta_r G$ son las del producto *RT*, que corresponden a J mol^{-1} en el Sistema Internacional.

La constante de equilibrio termodinámica se puede calcular a partir del valor de $\Delta_r G^0$:

$$K = e^{-\Delta_r G^0 / RT}$$

Una vez más, se debe hacer hincapié en que el signo de $\Delta_r G^0$ no informa de la espontaneidad de un proceso químico. De la ecuación anterior, se deduce que su signo está relacionado con el de *K*, de forma que si $\Delta_r G^0 < 0$, entonces $K > 1$ y si $\Delta_r G^0 > 0$, se cumple que $K < 1$.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Predicción de reacción espontánea: el cociente *Q/K*

La comparación de los valores de *K* y de *Q* resulta ser un criterio sencillo para determinar el sentido espontáneo de un proceso químico, sin necesidad de evaluar el signo de $\Delta_r G$.

Considerando que

$$\Delta_r G = \Delta_r G^0 + RT\,lnQ \;\; y \;\; \Delta_r G^0 = -RT\,lnK$$

se llega a la expresión:

$$\Delta_r G = RT\,lnQ/K$$

Esta ecuación nos permite predecir el sentido espontáneo (*T* = cte.) de una situación inicial de no equilibrio ($\Delta_r G \neq 0$, $Q \neq K$) hasta un estado de equilibrio ($\Delta_r G = 0$, $Q = K$), con la ayuda del cociente *Q/K*:

- **Si Q < K; Q/K < 1; $\Delta_r G < 0$**; reacción: React. → Prod.
- **Si Q > K; Q/K > 1; $\Delta_r G > 0$**; reacción: Prod. → React.

Estas relaciones son una alternativa segura y sencilla a las limitaciones, las dificultades de formulación precisa y los problemas de entendimiento de las reglas que los libros de texto utilizan con el nombre de principio de Le Châtelier.[3,30,31]

Con el objetivo de clarificar la discusión precedente, en el ejemplo 1 se desarrolla un caso práctico.

Ejemplo 1. Predicción del sentido en el que se produce una reacción es espontánea.

Para el equilibrio de obtención del metanol:

$$CO(g) + 2\,H_2(g) \leftrightharpoons CH_3OH(g);\; \Delta_r H^0 = -90{,}2\ kJ\ mol^{-1}$$

A partir de la siguiente composición de la mezcla gaseosa a 590 K y 500 bar: $n(CO)$ = 1,64 mol; $n(H_2)$ = 0,82 mol; $n(CH_3OH)$ = 0,95 mol, indica el sentido en el que la reacción es espontánea.

$S^0[CH_3OH(g)]$ = 239,7 J mol^{-1}K^{-1}; S^0 [*CO(g)*] = 197,6 J mol^{-1}K^{-1}

$S^0[H_2(g)]$ = 130,6 J mol^{-1}K^{-1}; *R* = 8,31 J mol^{-1} K^{-1}

Solución

Vamos a emplear la ecuación $\Delta_r G = \Delta_r G^0 + RT\,lnQ$ para determinar el signo de $\Delta_r G$. En primer lugar, calcularemos el valor de $\Delta_r G^0$ y después necesitaremos determinar también el valor de *Q*.

$\Delta_r G^0 = \Delta_r H^0 - T\,\Delta_r S^0$. Supondremos que los valores de entalpía de reacción y de entropía de reacción no varían con la temperatura.

$\Delta_r H^0 = -90{,}2$ kJ mol^{-1}

Calculemos el valor de $\Delta_r S^0$:

$\Delta_r S^0 = S^0[CH_3OH(g)] - [2\times S^0[H_2(g)] + S^0[CO(g)] = (239{,}7$ J mol^{-1} K^{-1}) – [2×(130,6 J mol^{-1} K^{-1}) + (197,6 J mol^{-1} K^{-1})]

$\Delta_r S^0 = -219{,}1$ J/(mol K). Por tanto,

$\Delta_r G^0$ = (–90.200 J/mol) – (590 K) × (–219,1 J/mol K) = 39.069 J/mol

Para la determinación de *Q*, se va a emplear la siguiente expresión:

$$Q = \frac{\left(\frac{p(CH_3OH)}{p^0}\right)}{\left(\frac{p(CO)}{p^0}\right)\left(\frac{p(H_2)}{p^0}\right)^2}$$

El cálculo de las presiones parciales de cada gas ($p_i = \chi_i\, p_T$), donde χ_i es su fracción molar y p_T es la presión total, es inmediato:

$p(CH_3OH)$ = 139,3 bar; $p(CO)$ = 240,5 bar; $p(H_2)$ = 120,2 bar

Por tanto, el valor de *Q* es:

$$Q = \frac{(139{,}3)}{(240{,}5)(120{,}2)^2} = 4{,}01\times10^{-5}$$

Ya podemos calcular el valor de $\Delta_r G$:

$\Delta_r G = \Delta_r G^0 + RT\,lnQ$ = (39.069 J/mol) + (8,31 J/K mol)(590 K) (ln 4,01 x 10^{-5}) = –10.568,6 J/mol.

Dado que $\Delta_r G < 0$, el sentido espontáneo de reacción es:

$$CO(g) + 2\,H_2(g) \rightarrow CH_3OH(g)$$

(Obsérvese que $\Delta_r G^0 > 0$; la única información que proporciona este signo es que $K < 1$)

A la misma conclusión se puede llegar si se determina el valor de *K*:

$$K = e^{-\Delta_r G^0/RT} = e^{-(39.069\frac{J}{mol})/(\frac{8{,}31J}{molK})(590K)} = 3{,}46\times10^{-4}$$

Se confirma el sentido de la reacción, ya que $Q < K$.

Análisis de las pruebas oficiales de Química

Antes de proceder al análisis de las pruebas de evaluación oficiales de Química, conviene resumir los resultados obtenidos en otros estudios previos:[4,5]

- Se confunde ΔG con $\Delta_r G$ y también ΔG^0 con $\Delta_r G^0$.
- Se indica que $\Delta G = 0$ (en ocasiones, $\Delta G^0 = 0$) es la
- condición de equilibrio químico.
- Se acepta $\Delta G^0 < 0$ como criterio general de espontaneidad.
- Se asume que si $\Delta G^0 > 0$, la reacción directa no está permitida.
- $\Delta_r G$ y $\Delta_r G^0$ se expresan en unidades de energía.

Particularmente, en los libros de química de primer curso universitario existe confusión generalizada en el entendimiento de lo que representan cada una de las siguientes magnitudes termodinámicas: $\Delta_r G$, $\Delta_r G^0$, ΔG, y ΔG^0, así como en su diferenciación, cómo se calculan y en lo referido al significado que representa el signo de su valor. Normalmente, en las distintas ecuaciones se suele emplear ΔG, en lugar de $\Delta_r G$, y ΔG^0 en lugar de $\Delta_r G^0$. En estos casos, $\Delta G = 0$ (en ocasiones, $\Delta G^0 = 0$), se señala como criterio de estado de equilibrio químico. Es decir, el signo Δ suele ser un elemento de confusión. En general, todas estas magnitudes se interpretan como incrementos (el resultado del cambio entre dos valores, final e inicial). Además, un porcentaje alto de estos libros expresan los valores de $\Delta_r G$ y de $\Delta_r G^0$ con unidades de energía, como si fueran magnitudes extensivas.

Para la recogida de los datos que corresponden a esta investigación, se han consultado páginas oficiales de distintas universidades de varias comunidades autónomas en las que se encuentran actualizados tanto los enunciados como las soluciones de cada una de las cuestiones y de los problemas que se han propuesto en las últimas convocatorias de pruebas de Química de acceso a la universidad. En particular, se han examinado exámenes que corresponden a los siguientes ámbitos universitarios: Comunidad Valenciana,[32,33] Cataluña,[34] Murcia,[35] Madrid,[36] Andalucía,[37] País Vasco[38] y Canarias.[39] Finalmente, dos libros de selectividad de Química[40,41] también se han incluido para comprobar si ha habido algún cambio en estas pruebas a lo largo de los últimos veinte años, sin encontrar ninguna variación reseñable. En lo que respecta a las Olimpiadas de Química, se ha tomado como referencia una de las últimas recopilaciones realizadas.[42]

La discusión que sigue es cualitativa. No se ha considerado necesario emplear porcentajes dada la naturaleza de la muestra analizada, aunque se debe indicar que los puntos principales que se discuten a continuación son comunes en la mayoría de las pruebas estudiadas.

En primer lugar, se debe destacar que en los exámenes de Química de acceso a universidad, la ecuación que se maneja para decidir si una reacción es espontánea, a una determinada temperatura, es $\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0$, aunque, a veces, también $\Delta G = \Delta H - T\,\Delta S$[40,41] e incluso $\Delta_r G^0 = \Delta_r H^0 - T\Delta_r S^0$.[39] Por su parte, en los de las Olimpiadas de Química también existe una gran variedad de problemas que emplean la primera fórmula referida. La única diferencia es que también incluyen ejercicios

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://10.62534/rseq.aq.2016

en los que se utiliza explícitamente la expresión $\Delta G^0 = -RT\ln K_p$ (o bien, $\Delta G^0 = -RT\ln K$). Con la ayuda de esa expresión matemática ($\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0$) se determina el signo del valor de ΔG^0, que se emplea como criterio general de espontaneidad. En concreto, como criterio general de reacción espontánea normalmente se escribe $\Delta G^0 < 0$. Por el contrario, si $\Delta G^0 > 0$, entonces se afirma que la reacción no es posible. Estas normas coinciden con los criterios asumidos por los autores de un porcentaje elevado de libros de texto de química general universitarios.

De esta forma, siguiendo lo especificado en el currículum oficial, se realizan discusiones, tanto cualitativas como cuantitativas, de la espontaneidad de un proceso. Para decidir de forma general la posible espontaneidad de una reacción se suelen proporcionar los valores de ΔH^0 (normalmente, en kJ/mol) y de ΔS^0 (normalmente, en J/mol^{-1} K^{-1}), lo que permite calcular, según la ecuación referida, el valor de ΔG^0 (y, por tanto, conocer su signo). Un ejemplo paradigmático que contiene cuestiones en las que se requiere realizar este tipo de discusión es el siguiente (Castilla y León, septiembre de 2015):

Conteste razonadamente las siguientes cuestiones:

a. Explique cómo se puede predecir si una reacción ocurrirá de forma espontánea en función de los valores de ΔH^0 y ΔS^0
b. Los valores de ΔS^0 y ΔH^0 para la descomposición térmica de un óxido de nitrógeno, según la reacción $N_2O(g) \rightarrow N_2(g) + \frac{1}{2} O_2(g)$ son, respectivamente 75,2 J/(mol K) y 43,9 kJ/mol. Determine a partir de qué temperatura la reacción anterior se producirá de forma espontánea.

En la contestación de cuestiones similares al enunciado del apartado a), habitualmente se suele realizar una tabla en la que se discute cualitativamente en qué casos la reacción será espontánea ($\Delta G^0 < 0$), teniendo en cuenta las combinaciones posibles de signos de ΔH^0 y de ΔS^0, en situaciones de temperaturas bajas y elevadas.

Para la contestación de problemas similares al apartado b), se admite que si $\Delta G^0 > 0$ el proceso no es espontáneo. Pero si la temperatura se aumenta, llega un valor a partir del que $\Delta G^0 < 0$. Para calcular este valor se asume que $\Delta G^0 = 0$, por lo que se escribe $0 = \Delta H^0 - T\,\Delta S^0$, despejando a continuación del valor de $T = \Delta H^0/\Delta S^0$. En este punto se debe destacar que en esta resolución algunos autores indican que cuando $\Delta G^0 = 0$ se alcanza el equilibrio.[33,37,38,42]

Otro aspecto a destacar corresponde a las unidades que se proporcionan en los enunciados para cada una de las diferentes magnitudes. En el caso de la entalpía, según se ha referido previamente, habitualmente se proporciona en kJ/mol, pero también se emplean unidades de energía, kJ. En ambos casos, acompañados de distinta simbología. Por ejemplo, en el caso una comunidad autónoma,[32,33] existe una variedad de combinaciones de símbolos y de unidades. En concreto, los valores de ΔH^0 se expresan tanto en kJ como en kJ/mol; en ocasiones, se escribe ΔH y $\Delta_r H^0$, expresadas en kJ. Además, en algún caso,[40,41] a pesar de que en el enunciado los valores de ΔH^0 se proporcionan en kJ/mol, en la resolución del problema se cambia la simbología (empleando tanto $\Delta_r H^0$ *como* ΔH), pero se expresa en kJ. En el caso de ΔS^0, ocurre lo mismo que con la entalpía,[32,33] proporcionando valores tanto en J/K como J/(mol K). Con estas unidades, es evidente que, al aplicar la ecuación referida, las unidades de los valores calculados de ΔG^0 estarán en función de cómo se hayan proporcionado los datos, obteniéndose, en consecuencia, bien cantidades expresadas en kJ/mol o kJ.[40,41]

Relacionado con la expresión de las unidades de las diferentes magnitudes, también se debe señalar que en algunos enunciados de problemas, los datos que se proporcionan corresponden a valores de entalpías de formación estándar y de entropías estándar de las diferentes sustancias, expresados en kJ/mol y J/(mol K), respectivamente. Algunos autores[34,35,37,40,41] calculan los correspondientes valores de entalpía de reacción estándar (simbolizada ΔH^0) y de entropía de reacción estándar (simbolizada ΔS^0) en unidades de kJ y J/K, respectivamente. Estas unidades las obtienen al asignar unidades de mol a los coeficientes estequiométricos en cada uno de los correspondientes cálculos.

Conclusiones

Un tratamiento termodinámico riguroso ha fundamentado el establecimiento del criterio general de espontaneidad ($\Delta_r G d\xi < 0$) y de equilibrio químico ($\Delta_r G = 0$) para el caso de un proceso químico. Este detallado estudio ha permitido posteriormente examinar el empleo inadecuado de distintas magnitudes termodinámicas para estos fines en libros de texto de Química y en pruebas de evaluación oficiales.

En general, los libros de química general no siguen las normas de la IUPAC[43] respecto a las magnitudes $\Delta_r G$, $\Delta_r G^0$, ΔG y ΔG^0. Los errores encontrados en estos textos se han reproducido tanto en los enunciados como en las resoluciones de las cuestiones y de los problemas de pruebas oficiales de evaluación. Se trata de un embrollo terminológico referido a la simbología empleada, a su cálculo, al significado de su valor y a las unidades con las que se expresan estas magnitudes.

Uno de los principales errores es tratar $\Delta_r G$ como si fuera un incremento, desconociendo, al parecer, el significado del símbolo $\Delta_r = \left(\frac{\partial}{\partial \xi}\right)$.[44] Por ello, para evitar que esta terminología siga produciendo los tratamientos incorrectos indicados, se sugiere emplear la afinidad ($\mathcal{A}$) para establecer los criterios de espontaneidad y de equilibrio químico.

Una incorrección muy extendida es utilizar el signo de $\Delta_r G^0$ (o de ΔG^0) como criterio general de espontaneidad, así como su valor nulo como condición de equilibrio químico.

Por todo lo señalado, convendría revisar el currículum de Química de segundo de bachillerato, ya que un estudio riguroso como el que se ha realizado en este trabajo está muy por encima del nivel exigible y del tiempo disponible de este curso de química. Dadas estas limitaciones, parece que los tratamientos que se pueden realizar en este nivel necesariamente deben ser muy simplificados, lo que cuestiona seriamente su presencia tradicional en el currículum oficial y anima, en consecuencia, a su eliminación, de forma análoga a lo sugerido para el principio de Le Châtelier.[3,30,31]

Bibliografía

[1] J. Quílez, *Ens. Cien.* **2006**, *24*(2), 219–240.
[2] J. Quílez, *An. Quím.* **2017**, *113*(4), 247-252.
[3] J. Quílez, *An. Quím. RSEQ* **2022**, *118*(3), 185-191.
[4] J. Quílez, *Ens. Cien.* **2009**, *27*(3), 317-30.
[5] J. Quílez, *J. Chem. Educ.* **2012**, *89*(1), 87-93, https://doi.org/10.1021/ed100477x.
[6] Real Decreto 1105/2014, de 26 de diciembre, por el que se establece el currículo básico de la Educación Secundaria Obligatoria y del Bachillerato, *BOE* 3 ene. **2015**, (3), disponible en https://www.boe.es/eli/es/rd/2014/12/26/1105/con (consultado: 16/01/2025).
[7] F. Brénon-Audat, C. Busquet, C. Mesnil, *Thermodynamique Chimique*, Hachette, Paris, **1993**.
[8] L. Schuffenecker, G. Scacchi, B. Proust, J.F. Foucaut, L. Martel, M. Bouchy, *Thermodynamique et Cinétique Chimique*, Langage et Informatique, Toulouse, **1991**.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

[9] P. Atkins, J. de Paula, *Physical Chemistry: Thermodynamics, Structure, and Change*, Freeman, Nueva York. **2014**.
[10] L.M. Raff, *J. Chem. Educ.* **2014**, *91*(3), 386–395, https://doi.org/10.1021/ed400453s.
[11] H. DeVoe, *Thermodynamics and Chemistry*, Prentice-Hall, New Jersey, **2015**.
[12] J. de Heer, *Phenomenological Thermodynamics with Applications to Chemistry*. Prentice-Hall, New Jersey, **1986**.
[13] J. Claret, F. Mas, F. Sagués, *Termodinàmica Química i Electroquímica*. Llibres de l'Índex, Barcelona, **1996.**
[14] E. Keszei, *Chemical Thermodynamics*. Springer, Berlin. **2012**.
[15] H.A. Bent, *J. Chem. Educ.* **1973**, *50*(3), 323-328, https://doi.org/10.1021/ed050p323.
[16] N. Spencer, *J. Chem. Educ.* **1974**, *51*(9), *577-579*, https://doi.org/10.1021/ed051p577.
[17] N. C. Craig, *J. Chem. Educ.* **1987**, *64*(8), 668-669, https://doi.org/10.1021/ed064p668.
[18] J.J. MacDonald, *J. Chem. Educ.* **1990**, *67*(5), 380-382, https://doi.org/10.1021/ed067p380.
[19] G.M. Anderson, *J. Chem. Educ.* **2015,** *92*(4), *774–776*, https://doi.org/10.1021/ed500704a.
[20] R.W. Cohen, J.C. Whitner, *J. Chem. Educ.* **1981**, *58*(1), 21-24, https://doi.org/10.1021/ed058p21.
[21] J. Borge, *J. Chem. Educ.* 2015, *92*(2), 296–304, https://doi.org/10.1021/ed5005992.
[22] E. Besalú, *Termodinàmica Química*, UdG Publicacions, Girona. **2010**.
[23] D. Margerison, *Ed. Chem.* **1973**, *10*(2), 61-65.
[24] R.J. Silbey, R.A. Alberty, M.V. Bawendy, *Physical Chemistry*, Wiley, Hoboken. **2005**.
[25] J. D. Cox, *Pure Appl. Chem.* **1982**, *54*(6), 1239-1250, https://doi.org/10.1351/pac198254061239.
[26] R. S. Treptow, *J. Chem. Educ.* **1999**, *76*(2), 212-215, https://doi.org/10.1021/ed076p212.
[27] J.E. Boggs, *J. Chem. Educ.* **1958**, *35*, 30-31, https://doi.org/10.1021/ed035p30.
[28] G. F. Matta, L. Massa, A.W. Gubskaya, E. Knoll, *J. Chem. Educ.* **2011**, *88*(1), *67-70*, https://doi.org/10.1021/ed1000476.
[29] I. N. Levine, *Principios de fisicoquímica*, McGraw-Hill, México, **2014**.
[30] J. Quílez, *Chem. Educ. Res. Pract.* **2004**, *5*, 281-300, https://doi.org/10.1039/B3RP90033A.
[31] J. Quílez, *Sci. & Educ.* **2021**, *30*, 1253-1288, https://doi.org/10.1007/s11191-021-00214-1.
[32] Universitas Miguel Hernández. "Banc de la Selectivitat. Química", disponible en https://bancdelaselectivitat.umh.es/examenes-resueltos/quimica/, **2025** (consultado: 16/01/2025).
[33] S. Menargues, A. Gómez, *37 años de problemas y cuestiones de Química en las pruebas de acceso a las universidades públicas de la Comunidad Valenciana (1987-2023)*, Colegio de Químicos, Valencia, **2023**.
[34] Cataluña. "Examenselectivitat", disponible en https://examenselectivitat.cat/selectivitat/Qu%C3%ADmica/per-temes/termodinamica, **2025** (consultado: 16/01/2025).
[35] Universidad de Murcia, "Exámenes de Química", disponible en https://www.um.es/web/estudios/acceso/estudiantes-bachillerato-y-ciclos-formativos/materias-y-coordinadores/quimica/examenes-anteriores, **2025** (consultado: 16/01/2025).
[36] Universidad Carlos III. "PAU. Exámenes de Química", disponible en https://www.uc3m.es/ss/Satellite/evau/es/TextoMixta/1371318182329/Examenes_de_Quimica, **2025** (consultado: 16/01/2025).
[37] A. García, M. García, A. Navarrete, M.L. Quijano, P. Azuara, J.L. Ballesteros, C. Díaz, M. Mayén, J.A. Navío, J. Rincón y P. Rodríguez *Iniciación a la Química. Preparación para el acceso a la universidad*. Junta de Andalucía. Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa, **2008.**
[38] Universidad del País Vasco, "Exámenes de la EAU", disponible en https://www.ehu.eus/es/web/unibertsitaterako-sarbidea/pruebas-de-acceso/examenes-de-cursos-anteriores/bachillerato-y-ciclos-formativos-de-grado-superior, **2025** (consultado: 16/01/2025).
[39] Gobierno de Canarias, "PAU Química" disponible en https://www.gobiernodecanarias.org/educacion/web/bachillerato/pau/pau/examenes-recursos-coordin-materias/materias-pau/quimica/recursos/, **2025** (consultado: 16/01/2025).
[40] S. Zubiaurre, J. M. Arsuaga, *Selectividad Logse Química. 2002*, Anaya, Madrid, **2003**.
[41] S. Zubiaurre, J. M. Arsuaga, *Selectividad 2012. Química*, Anaya, Madrid, **2013**.
[42] S. Menargues, A. Gómez, *La Biblioteca de las Olimpiadas de Química*, Colegio de Químicos, Valencia. **2023**.
[43] I. Mills, T. Cvitas, K. Homann, N. Kallay, K. Kuchitsu, *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*, Blackwell, Londres. **1988**.
[44] E. R. Cohen, T. Cvitas, J. G. Frey, B. Holmstrom, K. Kuchitsu, R. Marquardt, I. Mills, F. Pavese, M. Quack, J. Stohner, H. L. Strauss, M. Tamaki, A. Thor, *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry (Green Book) RSC*, Cambridge, **2007**.



Juan Quílez
Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Química y la Física – RSEQ – RSEF
C-e: jquilez@uji.es
ORCID: 0000-0001-5428-4617

Juan Quílez es doctor en Ciencias Químicas. Ha sido catedrático de Física y Química, director de instituto, asesor en centros de formación permanente y profesor de formación inicial del profesorado (primaria y secundaria) en las universidades de Valencia y Jaume I. Sus principales líneas de investigación educativa son el lenguaje de la química, la historia de la química (y su inclusión en el currículum de química de secundaria), el estudio didáctico del equilibrio químico y el análisis crítico del enfoque STEM integrado. También ha publicado libros de texto y complementarios de Física y de Química de bachillerato.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 32-37
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2015

La revista de la Real Sociedad Española de Química

ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

La química que se esconde en las tabletas efervescentes

The chemistry concealed in effervescent tablets

Fernando I. de Prada Pérez de Azpeitia*

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

PALABRAS CLAVE:
Tabletas efervescentes
Antiácidos
Gravimetría
Estequiometría
Reactivo limitante

RESUMEN:

Las tabletas efervescentes son comprimidos que contienen reactivos ácidos y básicos que, al combinarse con agua, interaccionan rápidamente mediante una reacción de neutralización, liberando dióxido de carbono gaseoso. Proporcionan una forma eficaz de tomar medicamentos y suplementos debido a que se distribuyen de forma más rápida y uniforme que las pastillas convencionales, lo que favorece su absorción y acción. En este artículo se tratan aspectos como las características de las tabletas efervescentes, los procesos de elaboración y de actuación, y un método de análisis cuantitativo (gravimetría) para determinar su composición. Las tabletas efervescentes, además de un interesante recurso didáctico, son un buen ejemplo de aplicaciones de la química relacionadas con la salud, la higiene y el bienestar general.

KEYWORDS:
Effervescent tablets
Antacids
Gravimetry
Stoichiometry
Limiting reagent

ABSTRACT:

Effervescent tablets are lozenges containing acidic and basic reagents which, when combined with water, quickly interact via a neutralization reaction, releasing gaseous carbon dioxide. They offer an efficient method of taking medications or supplements because they are distributed more quickly and evenly than conventional pills, resulting in faster absorption an action. This article covers such aspects as the characteristics of effervescent tablets, the manufacturing and acting process, and a quantitative analysis method (gravimetry) to determine their composition. In addition to being an interesting teaching resource, effervescent tablets are a good example of chemistry applications related to health, hygiene and general well-being.

Introducción

"La química del laboratorio y la química de nuestro cuerpo obedecen a las mismas leyes".
(Claude Bernard, fundador de la medicina experimental).

Las tabletas efervescentes son un ejemplo cotidiano de las aplicaciones de la química en sectores como la medicina, la salud y el bienestar. El término efervescencia procede del latín *fervere*, que significa hervir, debido a la semejanza con el efecto del burbujeo que se produce en la ebullición y al disolver la tableta en agua. Las primeras preparaciones efervescentes datadas se utilizaron hace más de dos siglos, en forma de polvo, como sales catárticas (purgantes).[1] Ya en el siglo XX fueron popularizadas por la marca Alka-Seltzer® como una forma fácil de ingerir un medicamento que neutralizase la acidez del estómago y aliviase el dolor. En su composición inicial, incluían ácido acetil salicílico, bicarbonato de sodio (hidrogenocarbonato de sodio) y un ácido orgánico. Las tabletas efervescentes presentan la ventaja de acelerar la disolución del principio activo, facilitando su rápida absorción y mejorando su efecto en el organismo.

Actualmente, las tabletas efervescentes comerciales contienen sustancias químicas muy variadas: medicamentos (antiácidos, analgésicos), suplementos nutricionales y electrolíticos (vitaminas, minerales), tensioactivos para la higiene de férulas y dentaduras postizas, detergentes para la limpieza del hogar y aceites esenciales para elaborar bombas relajantes para baño.

Desde el punto de vista didáctico las tabletas efervescentes han sido utilizadas con diferentes objetivos, p. ej., analizar la influencia de la temperatura sobre la velocidad de reacción y calcular la energía de activación,[2] ilustrar una reacción química en la que se forman gases, comprobar la ley de conservación de la masa recogiendo el CO_2 en un globo acoplado a un matraz, etc.[3] En este artículo se analiza el proceso de elaboración, la composición y el efecto de las tabletas efervescentes, concretamente las de acción antiácido, junto a diversas experiencias que pueden ser provechosas, tanto para el docente como para el discente.

¿Qué es una tableta efervescente?

En farmacología, pastilla, comprimido y tableta son términos utilizados para referirse a la forma sólida de un medicamento que se suministra por vía oral para suministrar el principio activo (sustancia química responsable de las propiedades farmacológicas). El componente principal se encuentra mezclado con los excipientes (sustancias inactivas que tienen como finalidad mejorar la liberación, absorción, estabilidad, consistencia, sabor,

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: F. Prada. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 32-37, http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2015

* C-e: fernando.pradaperez@educa.madrid.org

Manuscrito recibido: 10/01/2025 · aceptado: 10/03/2025

etc. del principio activo). Las pastillas más grandes y cilíndricas son las tabletas efervescentes que, cuando se encuentran disueltas en agua, se caracterizan por la formación del gas dióxido de carbono como resultado de una reacción de neutralización entre hidrogenocarbonato, o carbonato, de sodio y un ácido orgánico (ácido cítrico o tartárico).

Inicialmente, los comprimidos efervescentes se elaboraban de forma manual, mezclando el ingrediente activo con los excipientes y moldeándolos para conseguir el formato deseado. La revolución industrial, con el empleo de nuevas máquinas y tecnologías, permitió la producción en masa. Actualmente, la técnica más utilizada en la industria farmacéutica y alimentaria para fabricar tabletas duras y consistentes es la granulación. Durante este proceso, las pequeñas partículas en forma de polvo de los diferentes sólidos (granos) se mezclan y fusionan para formar estructuras más grandes y uniformes (gránulos). Si la granulación es por vía húmeda, se añade un líquido aglutinante para favorecer la cohesión entre las partículas. Esta tecnología se puede resumir en las etapas que se ilustran en la figura 1.[4]



Figura 1. Etapas del proceso de granulación por vía húmeda (figura extraída de la ref. [4]).

1ª. Preparación. Los componentes en forma de polvo (fármacos y excipientes: ácidos, bases, lubricantes, antiespumantes…), se mezclan dentro de una cámara giratoria para formar una mezcla homogénea.

2ª. Humectación. Mientras se agita la mezcla, se rocía con una pequeña cantidad de líquido aglutinante para que los granos se disuelvan parcialmente y comiencen a unirse (coalescencia). Si el líquido es agua, se añaden pequeñas cantidades (<1 %) con el fin de minimizar la reacción de pre-efervescencia. Por la misma razón, en todas las etapas de la elaboración se regula la humedad relativa del aire (< 25 %).

3ª. Aglomeración. Debido a la polaridad de la molécula de agua, existen fuerzas de atracción intermoleculares entre moléculas de agua y en la interfase líquido-sólido. A causa de las fuerzas de adhesión y cohesión, se crean uniones temporales (*puentes húmedos*) entre las partículas, formando gránulos de mayor tamaño, un requisito previo a la formación de uniones permanentes (*puentes sólidos*) al reducir la humedad.[5]

4ª. Secado y moldeado. Los gránulos húmedos se introducen en un secadero de lecho fluido hasta reducir el contenido en agua por debajo del 0,5 %.[6] Como resultado, se crea una estructura compacta, estable y resistente a la fractura. A continuación, la mezcla se comprime en moldes para reducir el área superficial y obtener la forma y el tamaño deseado.

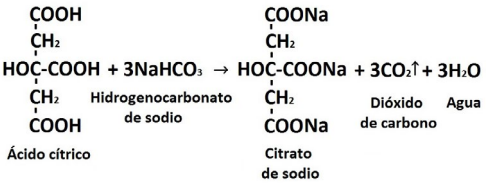
Una vez formados los comprimidos efervescentes se empaquetan asegurando su correcta conservación. Para este fin se utilizan tubos de aluminio con tapones que contienen gel de sílice como desecante, o blísters de papel de aluminio, un material impermeable al agua, luz y oxígeno.

Para garantizar la calidad de las tabletas efervescentes, se realizan controles semejantes a los de otro tipo de comprimidos farmacológicos. Entre los parámetros analizados se encuentran los siguientes: uniformidad (peso total, contenido de ingredientes, aspecto), efervescencia (tiempo de desintegración en agua), pH (acidez estable), friabilidad (resistencia a desmenuzarse), dureza y espesor, propiedades organolépticas (color, aroma, sabor…) y dióxido de carbono generado.[7]

- Fabricación manual de tabletas efervescentes

La preparación de tabletas efervescentes puede realizarse manualmente como una sencilla práctica de laboratorio, apta para todos los niveles. El método está basado en la granulación húmeda, empleando reactivos y materiales cotidianos: ácido cítrico anhidro, hidrogenocarbonato de sodio, agua, vaso de precipitados, espátula y molde de silicona.[8]

Si se desea preparar cantidades estequiométricas, hay que realizar previamente los cálculos para determinar las cantidades exactas de reacción entre el ácido cítrico y el hidrogenocarbonato, a partir de la ecuación ajustada:



La cual indica que la proporción molar entre el $NaHCO_3$ y el ácido cítrico es de 3:1, lo que significa que 252 g de hidrogenocarbonato reaccionarán con 192 g del ácido.

Una vez pesadas las proporciones adecuadas de los reactivos se añaden a un vaso donde se mezclan. A continuación, con un pulverizador, se rocían pequeñas gotas de agua sobre la superficie y se remueve bien la mezcla, proceso que hay que repetir varias veces hasta que formar un agregado que se pueda compactar y moldear con facilidad. La tensión superficial del agua, que rodea los granos y rellena los espacios vacíos, favorece la agregación. Es importante no añadir mucha agua para que no se produzca la pre-efervescencia. En este punto, las propiedades físicas de la mixtura se han modificado, ahora presenta plasticidad y puede ser moldeable. Para obtener la forma cilíndrica de tableta, se introduce la mezcla en un molde de silicona y se compacta, con ayuda de una espátula, dejándola reposar un par de horas (Fig. 2).



Figura 2. Tabletas efervescentes elaboradas de forma manual.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Las tabletas resultantes pueden ser aprovechadas con fines didácticos, como los ya citados en la introducción, o para elaborar una bebida carbonatada refrescante.[9]

Con este procedimiento es posible preparar tabletas de diferente composición a los comprimidos distribuidos por las farmacias, de forma que cualquiera de los dos reactivos se pueda encontrar en exceso. De esta forma se facilita la preparación de distintas experiencias de análisis cuantitativo que tienen como objetivo deducir el reactivo limitante y su porcentaje, como la que se describe en otro apartado para una tableta Alka-Seltzer®.

Tabletas antiácido efervescentes

Tradicionalmente, el bicarbonato de sodio comercial ha sido utilizado como un remedio rápido y casero para combatir la acidez gástrica. Cuando el exceso de ácido clorhídrico (HCl) entra en contacto con los nervios de la capa interna del estómago, originan una señal desagradable (ardor o pirosis) en el sistema nervioso central. Según la Fundación Española del Aparato Digestivo, la acidez es un síntoma común en la población: un 30 % de los españoles sufre acidez de estómago una vez a la semana a causa de malos hábitos alimentarios, sobrepeso o estrés.[10]

Actualmente, los fármacos para combatir la hiperacidez gástrica se encuentran entre los medicamentos más vendidos en el mundo. En el mercado se encuentran disponibles diferentes formulaciones que, según su mecanismo de actuación, se pueden clasificar en dos grupos:

- Neutralizadores de la acidez: bicarbonato de sodio (Alka-Seltzer®), hidróxido de magnesio (Leche de magnesia®) e hidroxicarbonato de aluminio y magnesio (Almax®),
- Inhibidores de la bomba de protones (Omeoprazol®), que reducen la producción de ácido gástrico.

Las tabletas antiácido que contienen como principio activo hidrogenocarbonato de sodio (mejor fuente de CO_2 que el carbonato), incluyen generalmente ácido cítrico anhidro (muy soluble y de sabor agradable) como excipiente necesario para producir la efervescencia. Ambas sustancias no reaccionan entre sí cuando se encuentran en estado sólido, la cinética de la reacción es tan lenta que no se producen colisiones eficaces que rompan los enlaces iniciales y superen la energía de activación.

Para que la reacción se produzca de forma rápida es necesario la acción del agua, que disuelva y ionice a los reactivos, al igual que sucede en los seres vivos para que se produzcan los procesos metabólicos:

$$NaHCO_{3\,(s)} \leftrightarrows Na^{+}_{\,(ac)} + HCO_{3\,(ac)}^{-}$$

$$H_3C_6H_5O_{7\,(s)} \leftrightarrows 3H^{+}_{\,(ac)} + C_6H_5O_{7\,(ac)}^{3-}$$

Un vez disueltos los aniones HCO_3^- reaccionan con los cationes oxonio H_3O^+, simplificando H^+) formando H_2CO_3.

$$HCO_{3\,(ac)}^{-} + H^{+}_{\,(ac)} \leftrightarrows H_2CO_{3\,(ac)}$$

El ácido carbónico es muy inestable y se descompone rápidamente formando agua y dióxido de carbono:

$$H_2CO_{3\,(ac)} \rightarrow H_2O_{\,(l)} + CO_{2\,(g)}$$

Las tabletas incluyen otros excipientes que no interfieren en la reacción, p. ej., aspartamo (E-951), manitol (E-421), acesulfamo potásico, amiflex (compuesto por aminoácidos, ácido glutámico y cloruro de sodio), esencias y aromatizantes (lima-limón, naranja y/o vainilla), etc.

Mecanismo de actuación en el estómago

Las células que recubren el interior del estómago segregan sustancias que actúan protegiendo el tejido epitelial, como el hidrogenocarbonato de sodio y la mucina, que forman la capa de mucosa. También liberan otras secreciones más agresivas: ácido clorhídrico y pepsinógeno (enzima inactiva o zimógeno), que en medio ácido (pH entre 1-2) se transforma en pepsina, una enzima que hidroliza los enlaces peptídicos de las proteínas.[11]

Cuando la bomba de protones de las células parietales gástricas segrega un exceso de ácido clorhídrico en el tracto gastrointestinal, el exceso de hidrogenocarbonato sódico que ha llegado al estómago, procedente de la tableta, lo neutraliza. Los iones HCO_3^- y Na^+ se combinan con los iones H_3O^+ y Cl^- generados por el ácido gástrico, formando cloruro de sodio, dióxido de carbono (gas que provoca eructación) y agua:

$$NaHCO_{3\,(ac)} + HCl_{\,(ac)} \rightarrow NaCl_{\,(ac)} + H_2O_{\,(l)} + CO_{2\,(g)}$$

Este proceso disminuye la concentración de iones oxonio en el estómago, lo que rebaja la acidez y equilibra el pH a un valor próximo a 3,5 lo que proporciona un alivio de las molestias gástricas. Del estómago al intestino delgado, la acidez disminuye alcanzando valores de pH entre 6 y 7,4.[12]

Por otro lado, el ion citrato (base conjugada del ácido cítrico) actúa como antiácido,[13, 14] formando una solución amortiguadora (Buffer o tampón) con el ácido débil de procedencia, según el equilibrio:

$$C_6H_5O_7^{\,3-}{}_{(ac)} + 3H^{+}_{\,(ac)} \leftrightarrows H_3C_6H_5O_{7\,(ac)}$$

Según el principio de Le Chatelier, el equilibrio se desplazará de forma que contrarreste el aumento de la concentración de iones oxonio causado por el ácido clorhídrico gástrico, lo que contribuye a reducir la acidez y aumentar el pH (Fig. 3).

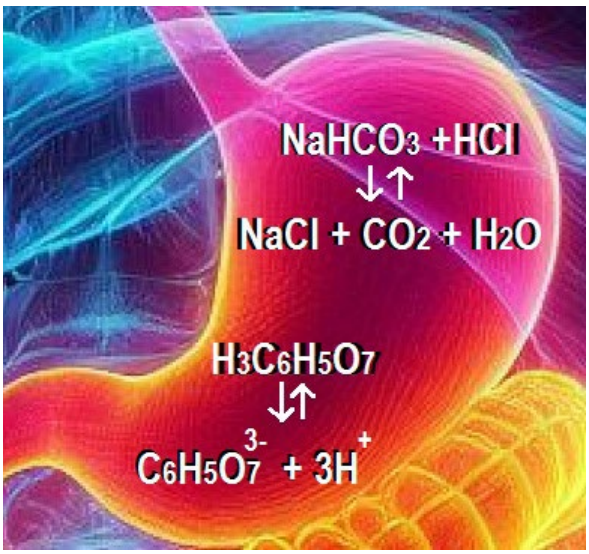


Figura 3. Procesos químicos implicados en la neutralización de la acidez estomacal.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

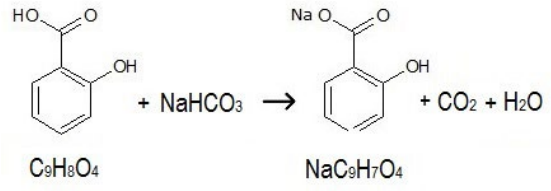
Análisis de una tableta Alka-Seltzer®

El análisis que se presenta es una alternativa a otros basados en el cálculo del porcentaje de hidrogenocarbonato en las tabletas antiácido efervescentes de Alka-Seltzer®.[15] Como esta cantidad ya se indica en el prospecto del fármaco, el objetivo es determinar (mediante gravimetría) la cantidad de CO_2 desprendida, el reactivo limitante y, por estequiometría, la masa de ácido cítrico (Fig. 4).



Figura 4. Formato de los comprimidos efervescentes Alka-Seltzer®.

La tableta analizada no contiene ácido acetilsalicílico ($C_9H_8O_4$). En caso contrario, habría que tener en cuenta que el grupo carboxilo de la molécula aportaría más cationes H_3O^+ para reaccionar con el hidrogenocarbonato de sodio y se formaría más ácido carbónico, aumentando la cantidad de CO_2 desprendido, según la ecuación:



Objetivos

- Determinar la cantidad de CO_2 que desprende una tableta aplicando un método de análisis cuantitativo.
- Determinar experimentalmente el reactivo limitante.
- Calcular la cantidad y el porcentaje en masa de ácido cítrico mediante cálculos estequiométricos.
- Calcular la masa y el porcentaje de hidrogenocarbonato de sodio presente en la tableta.

¿Cuánto dióxido de carbono desprende una tableta?

Uno de los controles de calidad de las pastillas efervescentes es la medida del dióxido de carbono liberado. Para ello, se utilizan diferentes métodos (gravimetría, volumetría, gasometría, colorimetría, etc). La gravimetría es la técnica cuantitativa más antigua de la química analítica, basada en la variación que tiene lugar entre la masa de los reactivos y la de los productos durante una reacción. Este es el caso de la medida de la masa de un producto gaseoso a partir de la disminución en la masa de una tableta de antiácido (gravimetría de volatilización). Este método es el más sencillo y realizable en todos los niveles.

Durante la reacción de neutralización entre el ácido y la base se libera CO_2, gas que escapa del sistema, por lo que la reacción es irreversible y se produce hasta que uno de los reactivos se consume totalmente. Durante este proceso se absorbe energía (ΔH° = 809 kJ/mol), según la ecuación:

$$H_3C_6H_5O_{7\,(ac)} + 3NaHCO_{3\,(ac)} \rightarrow Na_3C_6H_5O_{7\,(ac)} + 3H_2O_{\,(l)} + 3CO_{2\,(g)}$$

Procedimiento experimental

En una balanza, de sensibilidad 0,001 g, pesar un vaso de plástico con 45 mL de agua destilada a temperatura ambiente (≈ 25 °C). Por otro lado, pesar una pastilla de Alka-Seltzer®.

- Retirar el vaso de la balanza e introducir la pastilla para que se inicie la reacción.
- Con un agitador, remover la disolución suavemente durante unos minutos, sin derramar líquido, hasta que la reacción finalice y no se formen ni observen burbujas (acercar el oído para comprobarlo).
- Colocar el vaso en la balanza y anotar la masa final.

Como curiosidad, se observa que la tableta se hunde al introducirla en el agua, debido a su mayor densidad. Sin embargo, en el transcurso de la reacción llega el momento en que asciende hasta la superficie: su masa habrá disminuido lo suficiente para que las burbujas atrapadas en las oquedades de la tableta ejerzan una fuerza de empuje que venza a la gravitacional.

Resultados y conclusiones

Aplicando la ley de conservación de la materia, la disminución de la masa del sistema deberá ser igual a la masa que se forma del gas CO_2 y que se libera a la atmósfera. En una de las experiencias realizadas (Fig. 5), la masa inicial (suma de la masa del vaso con agua y de la tableta) resultó ser de 49,712 g y la masa final de 49,026 g, lo que indica una disminución en la masa de 0,686 g.

$$\Delta m = m_{final} - m_{inicial} = -0{,}686 \text{ g}$$



Figura 5. Variación de la masa al disolverse la tableta efervescente.

Una parte del CO_2 generado en la reacción se disuelve en el agua y no se libera a la atmósfera. Para calcular la cantidad de CO_2 disuelto en los 45 mL de agua, hay que tener en cuenta su solubilidad, 0,033 mol CO_2/ L H_2O, a 25 °C.

$$n^o moles\ CO_2 = 45\ mL \cdot \left(\frac{0{,}033\ mol\ CO_2}{1000\ mL}\right) \cdot \left(\frac{44\ g\ CO_2}{1\ mol\ CO_2}\right) = 0{,}065\ g\ CO_2$$

La suma de ambas masas de CO_2, la liberada y la disuelta en agua, indica la masa total de gas que se ha generado:

$$m_{Total} = m\ CO_{2\ disuelto} + m\ CO_{2\ liberado} = 0{,}065\ g + 0{,}686\ g = 0{,}751\ g$$

¿Cuál es el reactivo limitante?

Como no es conocida la masa de ácido cítrico que contiene cada tableta, a priori no se sabe si se encontrará en exceso, y

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://10.62534/rseq.aq.2015

todo el hidrogenocarbonato de sodio reaccionará, o si será el reactivo limitante, y quedará una parte de la sal sin reaccionar. Para averiguarlo, añadimos más cantidad de ácido. Por ejemplo, 5 mL de vinagre comercial (disolución de ácido acético, o etanoico, CH_3-COOH).

- Si el ácido cítrico fuese el limitante, se desprendería más gas de dióxido de carbono, según la ecuación:

$$CH_3\text{-}COOH_{(ac)} + NaHCO_{3\,(ac)} \rightarrow NaCH_3\text{-}COO_{(ac)} + H_2O_{(l)} + CO_{2\,(g)}$$

- Por el contrario, si el ácido cítrico fuese el reactivo en exceso, aunque se añada más ácido acético no se desprendería más CO_2, el $NaHCO_3$ habría reaccionado totalmente y sería el reactivo limitante (Fig. 6).

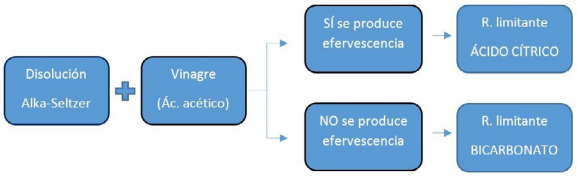


Figura 6. Esquema del procedimiento para identificar al reactivo limitante.

Si en vez de añadir vinagre, se añadiesen unos gramos de hidrogenocarbonato de sodio, la ausencia de burbujeo confirmaría que el ácido cítrico es el reactivo limitante.

-Conclusiones y cálculo del % de ácido cítrico

Al añadir vinagre a la disolución del antiácido, se observa la formación de nuevas burbujas de CO_2, indicando que contenía $NaHCO_3$ sin reaccionar. El nuevo desprendimiento de gas es una evidencia de que en la tableta analizada el hidrogenocarbonato de sodio es el reactivo que se encuentra en exceso y el ácido cítrico el reactivo limitante.

Conocido el reactivo limitante se puede determinar mediante cálculos estequiométricos la masa de ácido cítrico:

$$0{,}751\ g\ CO_2 \cdot \left(\frac{1\ mol\ \ CO_2}{44\ g\ CO_2}\right) \cdot \left(\frac{1\ mol\ C_9H_8O_4}{3\ mol\ CO_2}\right) \cdot \left(\frac{192\ g\ C_9H_8O_4}{1\ mol\ C_9H_8O_4}\right) = 1{,}092\ g C_9H_8O_4$$

Y con la masa total de la tableta (3,292 g), el porcentaje de ácido cítrico:

$$\%\ C_9H_8O_4 = \left(\frac{m_{\,Ácido}}{m_{\,Tableta}}\right) \cdot 100 = \left(\frac{1{,}092\ g}{3{,}292\ g}\right) \cdot 100 = 33{,}2\ \%$$

Cabría preguntarse, ¿por qué razón no se encuentran los reactivos en cantidades estequiométricas? Los químicos farmacéuticos determinan las proporciones del medicamento de forma que el $NaHCO_3$ se encuentre en exceso, asegurándose que no se agote durante la neutralización en el vaso con agua y que haya suficiente al llegar al estómago. Así, el principio activo puede ser eficaz en la neutralización de los ácidos responsables de la acidez y ardor estomacal.

-Análisis de errores

Aunque no se conozca el dato exacto de la masa de ácido cítrico de la tableta, en otras tabletas del mismo efecto y fabricante se indica que contienen 1000 mg de ácido cítrico.[16] Suponiendo que esta cantidad sea la misma que la contenida en la tableta analizada, es posible determinar el error relativo y la exactitud del resultado obtenido.

El principal error que afecta al resultado radica en la media del gas desprendido, que depende en buena medida de la sensibilidad y precisión de la balanza. Otros errores sistemáticos están relacionados con el procedimiento. Por ejemplo, la evaporación del agua, las pequeñas gotas que pueden salir salpicadas del recipiente durante la efervescencia y no esperar suficiente tiempo para que se desprenda todo el dióxido de carbono.

Determinación del porcentaje de bicarbonato de sodio

Como complemento al análisis realizado, se incluye la determinación experimental del porcentaje de hidrogenocarbonato de sodio. El procedimiento es semejante al anteriormente descrito, pero empleando distintas proporciones de agua y vinagre. En la primera mezcla se añaden 5 mL de vinagre a 40 mL de agua, en la siguiente 10 mL de vinagre a 30 mL de agua, y así sucesivamente, aumentando 5 mL de vinagre cada vez de forma que el volumen final de la disolución sea siempre de 45 mL. Los resultados obtenidos en una de las experiencias realizadas se representan en la siguiente gráfica (Fig. 7):

En la gráfica se observa que la masa de CO_2 desprendida

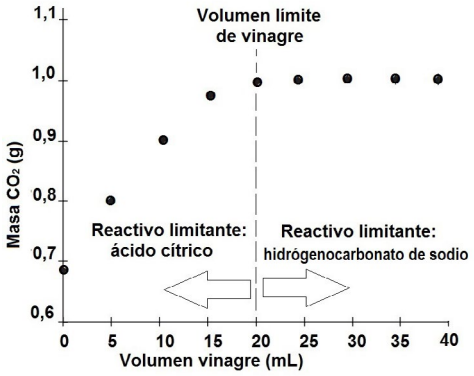


Figura 7. Gráfica de la masa de dióxido de carbono generado vs. volumen de vinagre añadido.

aumenta al hacerlo la cantidad de vinagre que contiene la muestra, hasta alcanzar un valor límite a partir del cual permanece constante. Por debajo de este volumen de vinagre, el ácido cítrico es el reactivo limitante. Por encima, el $NaHCO_3$ se convertirá en el reactivo limitante y ya no aumentará la cantidad de dióxido de carbono desprendido, permaneciendo constante por más vinagre que se añada. El CO_2 generado solo es proporcional a la cantidad de $NaHCO_3$ de la tableta. Como este tiene un valor fijo, una vez que ha reaccionado todo, la cantidad de gas muestra un valor constante. Como resultado, se confirma que el ácido cítrico es el reactivo limitante, ya que al añadir más cantidad de ácido etanoico, aumenta la masa de CO_2 generada, algo que no sucedería si se encontrase en exceso.

Conocida la masa de gas desprendido en cada experiencia, y por estequiometría, se determina la cantidad de $NaHCO_3$ que ha reaccionado en cada caso. Cuando adquiera un valor constante, indicará la cantidad de esta sal que contienen las tabletas. Con esta masa y la masa total de la tableta se obtiene el porcentaje de hidrogenocarbonato de sodio y, a partir del dato del prospecto, se determina el porcentaje de error.

Conclusiones

Los procesos relacionados con las tabletas efervescentes (elaboración, reacciones, efectos, análisis) son un sencillo e interesante recurso para la didáctica de la química, basado en

© 2025 Real Sociedad Española de Química

contenidos que aparecen en los currículos actuales de Física y Química del segundo ciclo de la ESO y del Bachillerato (formulación y nomenclatura, ecuaciones químicas, estequiometría, reacciones ácido-base, técnicas de laboratorio…), en diferente grado de profundidad. El hecho de que no intervengan principios activos complejos ni nocivos hace posible, de una forma fácil y segura, analizar las reacciones de neutralización y poner en práctica una técnica de análisis cuantitativo. Asimismo, son un buen ejemplo de la aplicación de la química en el sector farmacéutico, fundamental para el desarrollo de medicamentos que mejoren la salud y la calidad de vida de las personas. En resumen, este recurso favorece la adquisición de competencias claves, como la descripción de reacciones de interés y la valoración positiva de la química en la sociedad.

Bibliografía

[1] G. Bertuzzi en *Handbook of Pharmaceutical. Granulation Technology* (Ed. D.M. Parikh), Taylor-Francis Group, **2005**, pp. 374-375.
[2] G. Pinto. *Education in Chemistry* **2000**, *37*, 71-81.
[3] J. M. Vera, A. Cabrera, J. Pérez, A. Salazar. *Lat. Am. J. Phys. Educ.* **2010**, *4*(1), 1009-1014.
[4] Chumillas Technology "Entendiendo el proceso: Granulación", disponible en https://www.chumillastechnology.com/blog/en-que-consiste-el-proceso-de-granulacion/, (consultado 01/03/2025).
[5] M. E. Aulton, K. M. Taylor. *Aulton's Pharmaceutics. The Design and Manufacture of Medicines*, Elsevier. **2021**, pp. 484-486.
[6] S.G. Patel, M. Siddaiah. *J. Drug Delivery Ther.* **2018**, *8*(6), 296-303, https://doi.org/10.22270/jddt.v8i6.2021.
[7] K.G. Vanhere, D.V. Derle, S.B. Khatale, S.L. Nangude. *J. Drug Delivery Ther.* **2023**, *13*(7), 141-150, http://dx.doi.org/10.22270/jddt.v13i7.6120.
[8] M. E. Harris, B. Walker. *J. Chem. Educ.* **2003**, *80*, 1416. https://doi.org/10.1021/ed080p1416A.
[9] B. Rohrig. *J. Chem. Educ.* **2000**, *77*, 1608. https://doi.org/10.1021/ed077p1608A.
[10] "Fundación Española del Aparato Digestivo (FEAD)", disponible en https://www.saludigestivo.es, **2025** (consultado: 01/01/2025).
[11] V. Garg, P. Narang, R. Taneja. *J. Int. Med. Res.* **2022**, *50*(3), 1–22. https://doi.org/10.1177/03000605221086457.
[12] J. Fallingborg. *Danish Medical Bulletin* **1999**, 46(3), 183-196.
[13] N. Friedman. *J. Chem. Educ.* **1975**, *52*(9), 605. https://doi.org/10.1021/ed052p605.
[14] B. Z. Shakhashiri. *Chemical Demonstrations: A Handbook for Teachers of Chemistry*, vol. 3, **1989**, pp. 186-187.
[15] Y. H. Chen, J. F. Yaung. *J. Chem. Educ.* **2002**, *79*(7), 848-850.
[16] "Alka-Seltzer® Heartburn Relief Extra Strength Effervescent Tablets", disponible en https://www.alkaseltzer.com/products/extra-strength, **2025** (consultado: 01/03/2025).



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

Profesor de Física y Química en la Comunidad de Madrid y miembro del GEDH (RSEQ/RSEF) y de la DEDF (RSEF). Participa de forma activa en eventos de divulgación científica: Feria Madrid es Ciencia, Ciencia en Acción, El Pati de la Ciència (Universidad de Alicante), ConCienciarte (Círculo de Bellas Artes de Madrid), Jornadas de Divulgadores de Ciencia (DDD), etc. Entre sus colaboraciones se encuentran diversas instituciones y empresas: Aula Mentor (MEFPD), Centro de Innovación y Formación del Profesorado de la Comunidad de Madrid (CTIF), Grupo Editorial SM, Parque de Atracciones de Madrid, Real Sociedad Española de Química, Real Sociedad Española de Física y Museo Nacional del Prado.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://10.62534/rseq.aq.2015

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 38-41
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2025
La revista de la Real Sociedad Española de Química

HISTORIA DE LA QUÍMICA

50° aniversario del Instituto de Química Médica (IQM-CSIC)

50th Anniversary of the Institute of Medical Chemistry (IQM-CSIC)

José Elguero*
Instituto de Química Médica, CSIC.

PALABRAS CLAVE:
Recuerdos del CSIC
Ramón Madroñero
Manuel Lora Tamayo
UNED
Napoleón

RESUMEN:
Este pequeño texto fue leído el 27 de septiembre de 2024 en el Salón de Actos del CSIC. Solo difiere en las figuras que tratan de recordar a sus protagonistas. No es historia, solo recuerdos, que el autor quiso y le gustaría compartir con los químicos españoles, de entonces y de hoy.

KEYWORDS:
Memories of the CSIC
Ramón Madroñero
Manuel Lora Tamayo
UNED
Napoleon

ABSTRACT:
This brief text was read on September 27, 2024, in the CSIC Auditorium. It differs only in the figures who attempt to remember its protagonists. It is not history, but simply memories, which the author wanted and wishes to share with Spanish chemists, past and present.

Adaptación de la conferencia impartida el día 27 de septiembre de 2024 por el 50 aniversario del (IQM-CSIC).

Introducción

Tenía nuestro Instituto seis años …

Después de 25 años en Francia, en el CNRS, volví a España el 1 de enero de 1980. Tenía nuestro Instituto seis años. Unos meses antes, mi amigo y compañero de curso José María Fernández Navarro, que trabajaba en el Instituto de Cerámica y Vidrio, me escribió que había salido una plaza de acceso directo a Investigador (un nivel intermedio entre científico titular y profesor de investigación, hoy desaparecido) en el Instituto de Química Orgánica General. Así es que escribí a su director, Francisco Fariña. Me contestó que esa plaza se había pedido para Conrado Pascual, que debía regresar de la Autónoma al CSIC. Le escribí diciéndole que lo entendía y que no me presentaría (Figuras 1 y 2).



Figura 1. De izq. a dcha. y de arriba a abajo: José Mª Fernández Navarro, reproducido de Ref. [1]; Francisco Fariña y Conrado Pascual, fotos reproducidas con permiso del IQOG-CSIC; Ramón Madroñero, foto reproducida con permiso del IQM-CSIC y Manuel Lora Tamayo, foto reproducida con permiso del IQOG-CSIC.



Figura 2. Logo conmemorativo del 50 aniversario del IQM-CSIC, reproducida con permiso del IQM-CSIC

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: J. Elguero. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 38-41, http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2025

* C-e: iqmbe17@iqm.csic.es

Manuscrito recibido: 11/10/2024 · aceptado: 17/02/2025



Figura 3. Colaboradores e investigadores presentes en el Centro Nacional de Química Orgánica el día de su inauguración (17 de abril de 1967). Foto reproducida con permiso del IQOG-CSIC.

Resultaba que la correspondencia de Fariña la llevaba Natividad Palacios (Figura 3), la secretaria personal de Manuel Lora Tamayo, que por aquel entonces apenas visitaba el IQOG. Nati, por su cuenta, me escribió que había una plaza similar en el Instituto de Química Médica. Así es que escribí a su director, Ramón Madroñero, que amablemente me dijo que no tenía ningún inconveniente a que me presentara a la plaza.

Durante meses, ayudado por Carlos Corral, Profesor de Investigación (Figura 3), marido de Nati, preparé las oposiciones. Tenía yo 46 años y me resultó incómodo. Aún tengo los 25 temas escritos a mano con mucho cuidado. Los he olvidado casi todos. Recuerdo que había uno de pirimidinas.

Llegó el día. No se presentó nadie más. Me encerraron con llave en la biblioteca donde estaban todos los libros en los que estaban basados todos los temas. Y me volvieron a buscar pasadas tres horas. Me aprobaron.

Me dieron una mesa en el despacho 305 con Carlos Corral, Salvador Vega, Jaime Lissavetzky, Alberto Sánchez Álvarez-Insúa y Vicente Gómez Parra (Figura 4). Carlos me dio unas hojas de papel y unos lápices y me dijo "no te puedo dar nada más porque no hay ni para éter". Yo regresé con unas 325 publicaciones de mis años en Montpellier y Marsella (13 al año en promedio). Había en el ambiente un pensamiento no verbalizado "Ahora vas a ver lo que es publicar en España".

Ya desde el principio el grupo de la UNED, Rosa Claramunt, Pilar Cabildo, Dionisia Sanz, Concepción López y Dolores Santa María (Figura 5), cuyo edificio aún no estaba acabado, se instalaron en el laboratorio 311, con permiso del director. Algunas de ellas fueron nombradas doctoras vinculadas al CSIC.

Poco a poco se fueron estableciendo colaboraciones con muchas universidades españolas y extranjeras, incluidas con Francia. El resultado puede considerarse satisfactorio.

Naturalmente todo esto no hubiera sido posible sin gobiernos que creyesen en la investigación como fuente de riqueza nacional. En 1983 a petición del presidente del gobierno, los tres vicepresidentes del CSIC, el nuevo secretario general y yo, fuimos una mañana a Moncloa. Entre los muchos temas, recuerdo que Felipe González nos preguntó "¿Esos cuatro Institutos de Materiales que vamos a crear y que tanto dinero van a costar, nos van a permitir que paguemos menos patentes?" La pregunta puede parecer un poco ingenua, pero traduce como la sociedad percibe nuestro trabajo.

Sigo en el IQM y sigo feliz. Siempre, sin ninguna excepción, he recibido de todas las directoras y directores de este instituto un trato privilegiado. Han ocurrido tantas cosas.

He seleccionado un par de anécdotas.

El CSIC se creó, en primera aproximación, en Burgos en 1939. Fue su primer presidente José Ibáñez Martín que también era ministro de Educación mientras José María Albareda, sacerdote y miembro del Opus Dei, fue su primer secretario general (Figura 6). El que gobernaba el CSIC era el secretario general, hasta nuestra llegada lo era Lucio Rafael Soto.



Figura 4. De izq. a dcha. y de arriba a abajo: Salvador Vega Noverola, reproducida con permiso del IQM-CSIC; Jaime Lissavetzky, reproducida de Ref. [2]; Alberto Sánchez Álvarez-Insúa, reproducida de Ref. [3] y Vicente Gómez Parra, foto reproducida con permiso del IQM-CSIC.



Figura 5. De izq. a dcha. y de arriba a abajo: Rosa Claramunt, Pilar Cabildo, Dionisia Sanz, Concepción López y Dolores Santa María. Fotos reproducidas con autorización.

© 2025 Real Sociedad Española de Química



Figura 6. Izquierda: José Ibáñez Martín, reproducida con permiso. Derecha: José María Albareda, reproducida de Ref. [4].

Cuentan que, en 1983, Lucio Rafael Soto, fue un día al Centro del CSIC en Barcelona a dar una charla sobre nuestra institución. Al acabar, abrió un turno de preguntas.

¿Todo eso es muy bonito, pero cuando van a salir plazas?

Muy bien ¿pero cuando se van a convocar oposiciones para acceder a Profesor de Investigación?

No podemos ni pagar las facturas de nitrógeno líquido.

Rafael se enfadó, dio un puñetazo en la mesa y gritó estas palabras inmortales "*Que bien funcionaría el Consejo si no hubiera investigadores*".

Esa tensión entre gestión y ciencia, aunque muy atenuada, sigue. La administración quiere una máquina que funcione muy bien, aunque eso lleve tiempo a los investigadores. Los investigadores quieren que la máquina funcione de la manera más sencilla y con los menores cambios posibles.

En el año 2014 se celebró el 75 aniversario del CSIC. En aquellos años, el CSIC dependía del Ministerio de Economía y Competitividad cuyo ministro era Luis de Guindos. Para el acto, celebrado en presencia de los nuevos reyes, el presidente del CSIC, Emilio Lora-Tamayo me invitó a pronunciar el discurso institucional. Me advirtieron que no podía leerlo sin que el ministerio y la Casa Real lo examinaran y, si lo consideraban oportuno, lo corrigieran (¿lo censuraran?).

Entre otras muchas cosas, escribí que, al grupo muy reducido de grandes científicos españoles, los Margarita Salas, Antonio García-Bellido, Gines Morata, Avelino Corma (Figura 7), etc. no se les debía exigir que justificaran sus gastos (esto estaba en parte originado por la lata que le estaban dando a Margarita que se había comprado un ordenador diferente de los permitidos). Esa parte fue suprimida.

Pero lo sigo pensando. Creo que ellos, lo que aún viven, y sus sucesores se merecen un trato especial, un trato de confianza. Hay que confiar en las personas. Ya lo decía George Eliot "Las personas casi siempre son mejores de lo que sus vecinos creen" (Figura 8).



Figura 7. De izq. a dcha. y de arriba a abajo: Margarita Salas, reproducida de Ref. [5]; Antonio García-Bellido, reproducida de Ref. [6]; Ginés Morata, reproducida de Ref. [7] y Avelino Corma, reproducida con permiso.

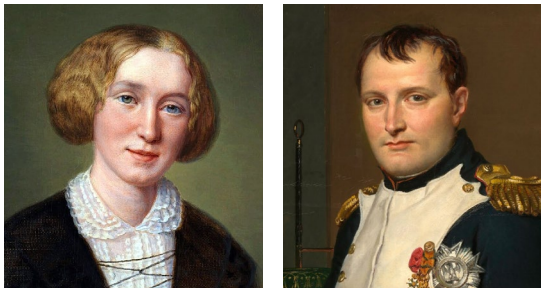


Figura 8. Izquierda: George Eliot, reproducida de Ref. [8]. Derecha: Napoleón Bonaparte, reproducida de Ref. [9].

A los que aun estáis al principio de vuestras carreras científicas quisiera deciros algo. Si queréis entrar en el Consejo para ganar un sueldo modesto pero razonable por trabajar 40 horas con unos horarios acotados y así hasta vuestra jubilación estáis equivocados.

Decía Napoleón que todo soldado francés lleva en su mochila un bastón de mariscal (Figura 8). Todo investigador debe llevar en su ordenador el premio Nobel. Lo más probable es que no lo alcance. Pero también se dice que en la búsqueda del Santo Grial lo más importante es la búsqueda no el encontrarlo.

Dije en el discurso de toma de posesión como presidente del CSIC (año 1983): "El porvenir del CSIC no puede decidirse por un grupo pequeño de personas aún dotadas de la mejor voluntad. El porvenir del CSIC depende de todo su personal y cada uno debe preguntarse, en conciencia, si está contribuyendo debidamente al desarrollo de la investigación científica española. Se puede contribuir indebidamente a esta tarea aun cumpliendo el horario, si se limitan a trabajar rutinariamente, sin inquietud, sin poner en duda sus propias líneas de trabajo. Un investigador digno de ese nombre es una persona que nunca olvida completamente el problema a resolver, que de cualquier actividad que realice, que de cualquier información que reciba, obtiene siempre algún elemento que contribuye a la realización de su proyecto de investigación"

Añado hoy: No es tan sencillo como trabajar más. Cuenta Judson, en su libro «El octavo día de la creación» (Figura 9), que Max Perutz (PNQ 1962) le dijo hablando de Jim Watson (PN de Fisiología o Medicina del mismo año) (Figura 10): «*Parte de su éxito es que nunca confundió trabajar mucho con pensar mucho, siempre se negó a sustituir lo uno por lo otro*».

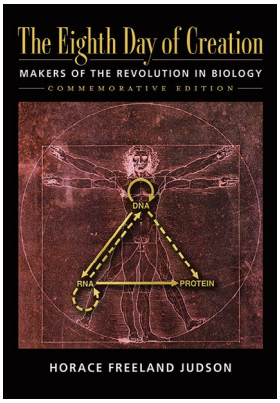


Figura 9. Portada de "El octavo día de la creación". Reproducido de Ref. [10].

© 2025 Real Sociedad Española de Química

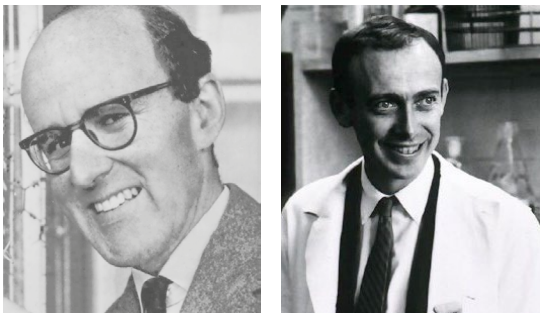


Figura 10. Izquierda: Max Perutz, reproducida de Ref. [11]. Derecha: James Watson, reproducida de Ref. [12].



Figura 11. Izquierda: José Ortega y Gasset reproducida de Ref. [13]. Derecha, Santiago Ramón y Cajal, reproducida de Ref. [14].

Decía Ortega que el premio Nobel en fisiología o medicina de Cajal (1906) era una vergüenza para España en lugar de un orgullo, porque constituía una excepción (Figura 11).

Quien sabe, quizás alguno de vosotros logre acabar con esa excepción.

Muchas gracias,

José Elguero

Bibliografía

[1] "Grupo de Procesado por Láser del Instituto de Óptica Daza de Valdés", disponible en https://lpg.io.csic.es/people/, **2024** (consultado: 22/11/2024).

[2] "Jaime Lissavetzky", disponible en https://es.wikipedia.org/wiki/Jaime_Lissavetzky, **2024** (consultado: 22/11/2024)

[3] "Alberto Sánchez Álvarez-Insúa, un hombre al servicio del conocimiento", disponible en https://elpais.com/diario/2011/11/07/necrologicas/1320620401_850215.html, **2011** (consultado: 12/02/2025).

[4] "José María Albareda Herrera [Material gráfico] por Anonymous - 1940 - Biblioteca Virtual de la Real Academia Nacional de Farmacia, Spain - Public Domain", disponible en https://www.europeana.eu/es/item/296/https__hispana_mcu_es_lod_oai_biblioteca_ranf_com_14329_ent0 (consultado: 12/02/2025).

[5] "Margarita Salas", disponible en https://es.wikipedia.org/wiki/Margarita_Salas, **2025** (consultado 18/02/2025).

[6] "Antonio García-Bellido", disponible en https://es.wikipedia.org/wiki/Antonio_Garc%C3%ADa-Bellido, **2024** (consultado 04/02/2025).

[7] "Ginés Morata", disponible en https://es.wikipedia.org/wiki/Gin%C3%A9s_Morata, **2024** (consultado 17/02/2025).

[8] "George Eliot", disponible en https://es.wikipedia.org/wiki/George_Eliot, **2024** (consultado 04/02/2025).

[9] "Napoleón Bonaparte", disponible en https://es.wikipedia.org/wiki/Napole%C3%B3n_Bonaparte, **2025** (consultado 04/02/2025).

[10] H. Freeland Judson, *The Eighth Day of Creation: The Makers of the Revolution in Biology,* Cold Spring Harbor Laboratory Press, Nueva York, **1996**.

[11] "Max Perutz", disponible en https://en.wikipedia.org/wiki/Max_Perutz, **2025** (consultado 13/02/2025).

[12] T. Fernández, E. Tamaro. "Biografía de James Dewey Watson", Editorial Biografías y Vidas, Barcelona, disponible en https://www.biografiasyvidas.com/biografia/w/watson.htm, **2004** (consultado 12/02/2025).

[13] "José Ortega y Gasset", disponible en https://es.wikipedia.org/wiki/Jos%C3%A9_Ortega_y_Gasset, **2025** (consultado 05/02/2025).

[14] "Santiago Ramón y Cajal", disponible en https://es.wikipedia.org/wiki/Santiago_Ram%C3%B3n_y_Cajal, **2025** (consultado 05/02/2025).



José Elguero Bertolini

Instituto de Química Médica, CSIC, Juan de la Cierva, 3, E-28006 Madrid

C-e: iqmbe17@iqm.csic.es

ORCID: 0000-0002-9213-6858

Licenciado (Universidad Central, 1957) y Doctor en Ciencias Químicas (Universidad de Montpellier, 1961; Universidad Complutense, 1971). Investigador del CNRS (1959-1979). Profesor de Investigación del CSIC (1980-2005). Profesor Emérito del Instituto de Química Médica del CSIC (desde 2005). Presidente de la Real Academia de Ciencias Exactas Físicas y Naturales entre 2015 y 2018. Presidente del Consejo Social de la Universidad Autónoma de Madrid (1986-1990); presidente del Foro Química y Sociedad (2008-2010). Miembro del Comité Científico Internacional del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona) (2007-2011). Autor de unos 2045 trabajos entre artículos científicos, libros, capítulos de libros, artículos de divulgación, entrevistas y discursos.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://10.62534/rseq.aq.2025

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 42-46
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2019
La revista de la Real Sociedad Española de Química

HISTORIA DE LA QUÍMICA

50 años de la Facultad de Química en Donostia / San Sebastián. De una iniciativa social a la semilla de una ciudad de Ciencia

50 years of the Faculty of Chemistry in Donostia / San Sebastian. From a social initiative to the seed of a city of Science

Juan J. Iruin Sanz*
Catedrático (jubilado) de Química Física. Facultad de Química. UPV/EHU. Donostia/San Sebastián
Jon Mattin Matxain Beraza
Profesor Pleno de Química Física. Facultad de Química. UPV/EHU. Donostia/San Sebastián

PALABRAS CLAVE:
Historia de la Facultad
Química en Euskadi
Investigación
Transferencia
Educación

RESUMEN:
Desde el final de los años 90, San Sebastián/Donostia ha conocido la progresiva implantación de Centros de investigación de todo tipo ligados, en muchos casos, a la Química y la Física. En esa implantación, han intervenido de forma activa diversos miembros de la Facultad de Química, que ahora cumple 50 años y localizada también en esa ciudad. En este artículo revisamos los precedentes históricos de la creación de la Facultad para, posteriormente, resaltar las características más relevantes de los Centros mencionados.

KEYWORDS:
History of the Faculty
Chemistry in Euskadi
Research
Transfer
Education

ABSTRACT:
Since the end of the 90's, San Sebastian/Donostia has seen the progressive establishment of research centers of all kinds linked, in many cases, to Chemistry and Physics. Several members of the Faculty of Chemistry, now celebrating its 50th anniversary and located in that city, have actively participated in this establishment. In this article we review the historical precedents of the creation of the Faculty and, subsequently, highlight the most relevant characteristics of the aforementioned Centers.

Antecedentes históricos de la creación de la Facultad de Química de Donostia/San Sebastián

La creación de la actual Facultad de la Química de Donostia recogió el legado del *Laboratorium Chemicum,* perteneciente al Real Seminario de Bergara, un laboratorio organizado por el químico francés L. J. Proust, uno de los pilares en la historia de la Química tal y como hoy la entendemos, recordado por su ley de las proporciones definidas.[1] Instalado en uno de los edificios de la villa, la Casa de Zabala, fue el sitio en el que los hermanos Fausto y Juan José Elhuyar llevaron a cabo, en el verano de 1783, una serie de experiencias que culminaron con la presentación a la Asamblea General de la Real Sociedad Bascongada de Amigos del País, en setiembre de ese año, de una minuciosa Memoria[2] en la que describían el análisis de la wolframita (químicamente un wolframato de hierro y manganeso) y, a partir de ese mineral y por primera vez, el aislamiento de un nuevo metal que los Elhuyar llamaron volfram (wolframio).

La misma Casa de Zabala fue también testigo de la primera lección de Química, entendida como tal disciplina científica, impartida por Proust el 20 de mayo de 1779. Y el lugar en el que se fue acumulando el material que los rectores del Real Seminario fueron adquiriendo a los principales productores y comercios europeos de equipamiento científico. Afortunadamente, todo ese material se mantuvo en la Casa de Zabala durante más de un siglo plagado de avatares (ver Ref. [1]) y pudo recuperarse y emplearse en el actual *Laboratorium* que en 2008, fue declarado sitio histórico de la European Physics Society.[3]

El interés por restaurar estudios de Química en Gipuzkoa puede rastrearse hasta 1918, con la creación de Eusko Ikaskuntza - Sociedad de Estudios Vasco que, desde sus inicios, se esforzó por lograr una Universidad para el País Vasco, aunque sus propuestas no lograron éxito. Años más tarde y tras el advenimiento de la República, una carta dirigida a la mencionada Eusko Ikaskuntza por el prestigioso matemático Julio Rey Pastor, a instancias de Carlos Santamaría Ansa, a quien dirigía su Tesis, le urgía a que solicitaran a los organismos oficiales la creación de un Centro de Estudios Matemáticos, que permitiera a los guipuzcoanos acceder a la titulación sin necesidad de costosos desplazamientos.[4]

Pero Santamaría, junto con José Oñate Guillén, Catedrático de Matemáticas en el Instituto de Segunda Enseñanza de San Sebastián, utilizaron la carta para elaborar un pequeño informe, en el que proponían que el Centro debiera denominarse Centro de Estudios Científicos (CEC) y que tendría que dar cabida a

CÓMO CITAR: J. Iruin, J. M. Matxain. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 42-46, http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2019

* C-e: jj.iruin@gmail.com

Manuscrito recibido: 11/10/2024 · aceptado: 17/02/2025

© 2025 Real Sociedad Española de Química

otras Ciencias, en especial las de aplicación a la técnica y que dispusiera de laboratorios, biblioteca y otras instalaciones que pudieran aprovecharse para la creación de una futura Universidad. La iniciativa fue apoyada por la Diputación guipuzcoana y el Ayuntamiento donostiarra y el Centro empezó a funcionar con celeridad, dividido en cinco secciones, entre las que estaba la Química. Pero la Guerra Civil acabó con el intento.

En los sucesivos años de la década de los sesenta, diversos sectores guipuzcoanos interesados por los estudios superiores en esta provincia confluyeron en 1967 en el Patronato Pro-Estudios Universitarios de Guipúzcoa, que contó con el apoyo de las instituciones provinciales.[5] En una de sus primeras gestiones como tal Patronato, en ese mismo año, se realizó una visita al Rector de la Universidad de Valladolid (distrito al que pertenecían las provincias vascas), para explorar la creación de Facultades en San Sebastián, barajándose, por primera vez, la posibilidad de una Facultad de Química.

En esos años finales de la década de los sesenta, la presión social para la creación de Universidades y Centros era generalizada en España. En Gipuzkoa tuvo el componente adicional de los intereses encontrados de la Universidad de Deusto y la Universidad de Navarra por instalar nuevos Centros en la provincia, en la que ya existían la ETSII y la Facultad de Físicas de la Universidad de Navarra y los Estudios Universitarios y Técnicos de Gipuzkoa (EUTG) de la de Deusto. En este último Centro, el ya mencionado Carlos Santamaría fue el Decano de la Sección de Ciencias. Existe constancia documental muy limitada (ver Ref. [4]) de que fue en esos EUTG donde germinó la idea de crear una Escuela Superior de Petroquímica, llegándose a elaborar una Memoria Técnica, con el concurso de técnicos del Instituto del Caucho francés. Sin embargo, el presupuesto elevado de esa propuesta hizo que los EUTG se echaran atrás en la idea.

Pero algunas de las personas implicadas en el proyecto y relacionadas con industrias de la provincia, decidieron enriquecer la Memoria original y presentársela a los gestores de la Cámara de Industria de Gipuzkoa, que había encargado y recibido en 1969 un estudio del Grupo Metra-Seis, titulado "Estructura Económico-Industrial de Gipuzkoa y su evolución", que consideraba como líneas de desarrollo industrial más prometedoras la Electrónica y la Petroquímica, esta última derivada de la situación estratégica de Gipuzkoa en el eje entre los yacimientos de la región francesa de Lacq y la refinería de Bilbao.

Basándose en ese estudio, en junio de 1970, la Cámara publicó un extenso trabajo de más de 100 páginas, en el que también participaron expertos franceses, que planteaba la creación de una Escuela Técnica Superior de Petroquímica. En los dos años siguiente se crea una Comisión para llevar adelante el Proyecto, que se publicita entre los industriales guipuzcoanos, a los que se insta a soportarlo económicamente. Se realizan entrevistas con el Ministro de Educación y Ciencia y el Director General de Enseñanza Universitaria y se presenta el estudio al Rector de Valladolid en mayo de 1972.

Por su parte, el arriba mencionado Patronato Pro-Estudios Universitarios de Guipúzcoa seguía en esos años con sus gestiones para la creación de otras Facultades hasta que, en febrero de 1973, se produce la confluencia de Patronato y Cámara que acelera el proceso para la creación de una Facultad de Ciencias Químicas, con especialidad de Petroquímica. Ello se concreta en la publicación en el BOE del 17 de octubre de 1973 de un Decreto por el que se crea una Facultad con esa denominación, dependiente de la Universidad de Valladolid.

Aunque probablemente el asunto ya se debatiera con ocasión de la formalización del Decreto, una importante reunión celebrada el 5 de julio de 1974, dejó clara la orientación que debería tener el Plan de Estudios de esa futura Facultad (ver Ref.[5]). A esa reunión además de autoridades provinciales y representantes de la Cámara y del Patronato, asistieron tres Catedráticos comisionados por el Ministerio para la puesta en marcha de la Facultad. Se trataba de los Profesores Mato y Alberola de la propia Universidad de Valladolid y el Prof. Gonzalo Martín Guzmán de la ETSII de Barcelona, que dejaron claro que no eran partidarios de unos estudios exclusivos de Petroquímica, proponiendo un Primer Ciclo de tres Cursos con las asignaturas que eran comunes a todas las Facultades de Química, dejando para el Segundo Ciclo y el Tercero (Doctorado) la planificación de esos estudios de Petroquímica.

Es en esa reunión donde aparece, por primera vez, la figura del Prof. Martin Guzmán, madrileño pero muy ligado a San Sebastián (su mujer era donostiarra). Licenciado y Doctor por la actual Complutense de Madrid, realizó una segunda Tesis en la Universidad de Birmingham. Pasó a formar parte del Instituto de Plásticos y Caucho del CSIC y entre los años 54 y 64 fue Profesor Visitante en las Universidades de Notre Dame y Filadelfia. En todos los casos, su docencia e investigación estuvo relacionada con el campo de la Química Macromolecular.[6] A finales de los 60 recaló en la ETSII de Terrassa.

Tras la reunión de Julio de 1974, el Ministerio nombró a Gonzalo Martin Guzmán Decano Comisario de la creada Facultad de Ciencias Químicas de San Sebastián. En el proceso se implicaron económicamente la Cámara, la Diputación y el Ayuntamiento, además de la Caja de Ahorros Provincial, que cedió los locales. Los primeros profesores fueron reclutados entre el personal de la Escuela de Ingeniería Técnica existente, la Escuela del Papel de Tolosa y jóvenes Licenciados seleccionados por el propio Prof. Martin Guzmán.

La Facultad empezó a impartir su Primer Curso en octubre de 1975, con arreglo al Plan de Estudios de Primer Ciclo vigente en la Universidad de Valladolid y 117 alumnos matriculados.[7] Posteriormente, en 1979, se aprobó el Plan de Estudios para el segundo Ciclo con dos especialidades, una de Química Fundamental y otra denominada Petroquímica (Opción Macromoléculas) que parecía dejar la puerta abierta a otras opciones en Petroquímica pero que nunca se concretaron porque, entre otras cosas, en 1979 se extiende el territorio de la Universidad de Bilbao a los Centros radicados en Gipuzkoa y Álava, incluyendo la Facultad de Ciencias Químicas de San Sebastián. Enseguida, en febrero de 1980, nace la Universidad del País Vasco / Euskal Herriko Unibertsitatea que engloba a los Centros dispersos en los tres Territorios Históricos del País Vasco.[8]

Un hito fundamental en la historia de la Facultad fue el traslado del Centro desde el originario edificio en Alza al Campus Universitario de Ibaeta. Un hecho que se produjo en el verano de 1987.

En setiembre de 2003 se puso en marcha el nuevo Plan de Estudios de la Licenciatura y siete años más tarde, en setiembre de 2010, el "Grado en Química" con el fin de adaptar los estudios al Espacio Europeo de Educación Superior (EEES). También en setiembre, pero de 2019, se adscriben los Másteres Universitarios de Química y Polímeros, Nanociencia y Química Teórica y Modelización Computacional a la Facultad de Química, que es como ahora se denomina el Centro tras el cambio de denominación producido en octubre de 2018.

Los inicios de la investigación en la Facultad de Química

La futura implantación de la especialidad de Petroquímica, opción Macromoléculas, hizo que, desde los inicios de la Facultad, el Prof. Martin Guzmán empezara a planificar la formación de personas que fueran capaces de impartir las ma-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

terias adecuadas. Para conseguirlo, ya en 1976, comenzó a dirigir Tesis Doctorales a jóvenes licenciados en Química, y también en Física, en temáticas relacionadas con la síntesis, la caracterización y el procesado de los materiales poliméricos. Las dos primeras Tesis Doctorales se leyeron en junio de 1979.

Incorporó también a jóvenes doctoras y doctores por otras Universidades, con formaciones menos relacionadas con los polímeros pero que acabaron iniciando sus propias líneas de investigación en temáticas relacionadas. Como los casos de José María Asua (Ingeniería de Polimerización), Juan Colmenero (Física de Polímeros Amorfos) o Toribio Fernández Otero (Polímeros y Electroquímica), que han jugado un papel clave en el desarrollo de Centros ligados a la Facultad de Química.

En esos mismos primeros años surgen otros Grupos de Investigación en temáticas relacionadas con la Química Orgánica, la Catálisis, la Química Inorgánica, la Química Analítica, la Química Computacional, la Química de la Contaminación, la Bioquímica y la Biología.

La Facultad de Química como semilla de Centros de Investigación en Donostia

A finales de los años 90 y principios de este siglo, se produjo una significativa eclosión de Centros situados fuera del marco del campus de Ibaeta, como consecuencia del impulso de profesores de la Facultad de Química. En los siguientes párrafos vamos a ir describiendo sus características y logros.

Cidetec

En marzo de 1997, por iniciativa del citado Prof. Toribio Fernández Otero, ya entonces Catedrático de Química Física en la Facultad de Química, y la implicación personal del Dr. Javier Rodríguez, un posdoc de su grupo de investigación, contando con el apoyo de la Diputación Foral de Gipuzkoa y de algunas empresas, inicia su actividad CIDETEC (Centro de Investigación de Tecnologías Electroquímicas), como Fundación sin ánimo de lucro. La actividad del Centro está centrada en el almacenamiento de energía, donde es toda una referencia internacional, y la ingeniería y el tratamiento de superficies.

Tras 28 años de actividad y bajo el liderazgo del mencionado Javier Rodríguez, CEO de la entidad, CIDETEC tiene actualmente una plantilla de casi 300 personas, de las cuales el 50% son doctores en diversas disciplinas y una gran parte de ellas provenientes de la Facultad de Química de San Sebastián. En el año 2024 los ingresos de CIDETEC han alcanzado la cifra récord de 24 millones de euros, la mitad de los cuales provienen de contratos de I+D con empresas de todo el mundo.

CIDETEC cuenta con más de 15.000 m^2 de instalaciones repartidas entre el Parque Científico Tecnológico de Gipuzkoa y el Polo de Electromovilidad de Gipuzkoa (MUBIL). Aun siendo la I+D con empresas su foco principal de actividad, CIDETEC ha mantenido desde su nacimiento una importante actividad científica, con la publicación de 700 artículos científicos y la realización de 70 tesis doctorales.

Por otro lado, el Centro mantiene 24 familias de patentes activas, y ha lanzado 6 startups: KERACOAT, dedicada a la producción de cerámicas para su aplicación en superficies metálicas, EMISSARY COSMETICS, que produce ingredientes para cosmética, CIDEcell, fabricante de celdas y electrodos a medida para baterías de mercados nicho, OBS, fabricante de sistemas BMS para packs de baterías, LANZO, que fabrica baterías para el sector aeroespacial, y KUDEbatt, centrada en el reciclado de baterías.

Polymat

En 1999, recogiendo la creciente demanda de investigación y servicios en materiales plásticos (polímeros) que algunos profesores de la Facultad de Química habían ido detectando en diversas empresas locales y nacionales, los profesores Juan J. Iruin, Catedrático de Química Física y José M. Asua, Catedrático de Ingeniería Química y Premio Euskadi de Investigación 2005, pusieron en marcha el Instituto Universitario de Materiales Poliméricos (POLYMAT). El Instituto fue el primero de los Institutos propios de la UPV/EHU y se creó para fortalecer las relaciones Universidad-Empresa en el ámbito de los polímeros.

En una posterior extensión de sus actividades a un ámbito más internacional, POLYMAT lanzó en 2001 el Industrial Liaison Program (ILP), un programa que hoy tiene quince empresas internacionales asociadas, que financian tesis doctorales en el campo de los polímeros dispersos en agua.

La oportunidad de compatibilizar, de forma más ambiciosa, investigación a más largo plazo e interacciones con industrias se presentó con el lanzamiento por el Gobierno Vasco del programa Basque Excellence Research Centers (BERCs), cuyo objetivo era desarrollar ciencia básica y al que haremos otras referencias en este texto. POLYMAT presentó una propuesta para constituir un Centro de investigación fundamental orientada al desarrollo de polímeros que permitiera hacer frente a los retos del siglo XXI en energía, salud y sostenibilidad. La propuesta fue aceptada y el nuevo Centro (Basque Center for Macromolecular Design and Engineering, POLYMAT Fundazioa) se puso en marcha en 2012.

Desde entonces, el Instituto y el BERC marchan de la mano presentando una imagen única hacia el exterior y son internacionalmente conocidos como POLYMAT, University of the Basque Country UPV/EHU, lo que ha permitido un notable desarrollo, pasando de tener unos 30 investigadores en 2011 a más de 210 en la actualidad, provenientes de más de 35 países. POLYMAT investiga en seis grandes áreas: Polímeros y Energía, Polímeros y Sostenibilidad, Física de Polímeros y Manufactura Avanzada, Materiales Supramoleculares, Polímeros y Salud e Ingeniería de la Polimerización y Simulación.

En estos 25 años, se han publicado más de 2.000 artículos (200 solo en 2023)[9], se han graduado más de 200 doctores, se ha participado en más de 55 proyectos europeos, incluidos tres ERCs, trabajando en contratos de larga duración con más de 45 empresas, obteniendo más de 20 patentes y organizando más de 30 congresos internacionales. Además, se han creado cuatro startups derivadas de este Instituto Universitario.

Y así, IKERLAT POLYMERS produce partículas poliméricas utilizadas principalmente en sistemas de diagnóstico clínico, permitiendo la magnificación de las reacciones antígeno-anticuerpo. POLIMERBIO es una empresa especializada en dispositivos médicos bioabsorbibles. Pionera en el uso de polímeros biodegradables en aplicaciones médicas, colabora con especialistas médicos para el desarrollo y fabricación de dispositivos biomédicos de nueva generación. SURPHASE dirige estratégicamente su actividad en el sector del tratamiento de aguas y, en concreto, en el mercado de la desalación de agua mediante membranas poliméricas, con un gran potencial de crecimiento debido al continuo aumento de la escasez de agua en el planeta. Finalmente, POLYKEY POLYMERS actúa como productor de polímeros y proveedor de soluciones de I+D en tres áreas establecidas como objetivos para una transición hacia un futuro sostenible: la industria de polímeros de base biológica, el reciclado químico de plásticos y la síntesis de materiales poliméricos innovadores para aplicaciones de almacenamiento de energía.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

El Donostia International Physics Center (DIPC) y el Centro de Física de Materiales (CFM) (1999/2000)

En el año 1987, el año del traslado de la Facultad al nuevo edificio en el Campus de Ibaeta, se crea el Departamento de Física de Materiales (DFM) de la UPV/EHU, tras la entrada en vigor de la Ley de Reforma Universitaria, agrupando principalmente a los profesores que impartían la docencia de las asignaturas de las áreas de Física y Matemáticas en la Facultad.

En ese mismo año, se incorpora al Departamento el Prof. Pedro Etxenike como Catedrático de Física de la Materia Condensada, con una reconocida carrera investigadora solo interrumpida por su participación como Consejero del primer Gobierno Vasco del Lehendakari Garaikoetxea. Tras una posterior estancia de dos años como Visiting Professor y Overseas Fellow del Churchill College en Cambridge, su primer objetivo, al hacerse cargo de la cátedra, se concretó en la creación de su propio Grupo de investigación, que se sumó a otro ya existente en el DFM y que, bajo la denominación de Polímeros y Materiales no Cristalinos, estaba liderado desde 1985 por el ya mencionado Prof. Juan Colmenero (más tarde Premio Euskadi de Investigación 2000).

A finales de los años noventa, el Prof. Etxenike es galardonado con el primer Premio Euskadi de Investigación (1996) y con otros prestigiosos premios como el Príncipe de Asturias de Investigación Científico Técnica y el Max Planck Physics (ambos en 1998).

Aprovechando la proyección de esos premios y la progresiva internacionalización de los Grupos de investigación del DFM, Etxenike consigue el apoyo de diversas Instituciones y empresas para concretar su visión de un Centro de Investigación singular. Nace así el Donostia International Physics Center (DIPC) que, en el momento de su creación, fue innovador por su estructura institucional. Su Patronato se encuentra participado tanto por instituciones públicas (Gobierno Vasco, Universidad del País Vasco UPV/EHU, Diputación Foral Gipuzkoa y Ayuntamiento de San Sebastián), como por empresas privadas (Kutxa Fundazioa, Fundación EDP, Telefónica, IBM y CAF).

EL DIPC fue en principio concebido como un centro de internacionalización, de dinamización de la actividad científica, capaz de atraer investigadores jóvenes y visitantes extranjeros y con un carácter periuniversitario, que aprovecha el núcleo de la actividad investigadora de la Universidad, pero con un funcionamiento austero, sencillo y ágil.

La idea original no era que el DIPC tuviera investigadores permanentes, sino que investigadores senior, con plazas estables en la Facultad de Química y otros Centros, estuvieran asociados al mismo, para ejercer como anfitriones de los investigadores extranjeros que se fueran incorporando como visitantes al Centro.

Pero ese funcionamiento no resultaba adecuado para la reincorporación al País Vasco de jóvenes investigadores, tras sus estancias postdoctorales en el extranjero. Para llenar ese hueco, se crea un Centro Mixto entre el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) y la Universidad del País Vasco / Euskal Herriko Unibertsitatea (UPV/EHU). Nace así (en 1999) el Centro de Física de Materiales (CFM) como iniciativa conjunta que posibilitara la creación de posiciones estables de investigación para esos investigadores. Y que se complementaba con el programa Gipuzkoa Fellows, patrocinado por la Diputación Foral de Gipuzkoa que, desde el año 2000, incorporaba jóvenes investigadores contratados para periodos de cinco años.

La creación en 2007, por parte del Gobierno Vasco, de Ikerbasque - Fundación Vasca para la Ciencia[9], ha permitido desde entonces la incorporación de investigadores senior como personal permanente en Centros y Departamentos universitarios del País Vasco, lo que ha supuesto un cambio sustancial en el funcionamiento del DIPC y el CFM.

DIPC y CFM están en la actualidad registrados como Centros de Investigación Básica y de Excelencia (BERC), dentro de la Red Vasca de Ciencia, Tecnología e Innovación. El DIPC fue el primero en ser aceptado como tal en 2008, mientras que el CFM lo fue en el año 2009, como una organización sin ánimo de lucro fundada por la mencionada Ikerbasque, la Diputación Foral de Gipuzkoa y el DIPC.

El DIPC cuenta con un equipo investigador de más de 250 personas con actuaciones en cuatro líneas genéricas denominadas Quantum, Nano, Life y Cosmos. Acoge un sólido y permanente programa de científicos visitantes**,** que hoy contabiliza más de 3500, entre los que se cuentan científicos internacionales del primer nivel incluidos 31 Premios Nobel. En 2024 ha publicado más de 500 publicaciones científicas (ver Ref. [9]), ha generado casi 30.000 citas y cuenta con varias ayudas ERC activas.

En lo que se refiere al Centro de Física de Materiales (CFM), el mismo engloba a casi 200 personas y cuatro líneas de investigación, tanto teóricas como experimentales: Física Química de Materiales Complejos, Propiedades Electrónicas en la Nanoescala, Fotónica y Polímeros y Materia Blanda, esta última recogiendo el legado del primitivo Grupo del Prof. Colmenero en el Departamento de Física de Materiales. En 2023 ha publicado más de 200 artículos científicos (ver Ref. [9]).

El DIPC actúa como catalizador del conocimiento en su ecosistema científico próximo, que incluye también el Centro de Investigación Cooperativa Nanogune, de cuya Patronato el DIPC es miembro permanente y en el que el Prof. Etxenike ha sido su Presidente desde su fundación hasta 2019.

El DIPC es también sede de un Centro de Supercomputación que ofrece sus servicios a toda la comunidad investigadora de la Red Vasca de Ciencia, Tecnología e Innovación. Gracias a ello, por ejemplo, desarrolla sus actividades el Grupo en Química Computacional y Teórica, liderado por el Prof. Jesús M. Ugalde, Catedrático de Química Física de la Facultad y Premio Euskadi de Investigación 2003.

Arrancando en el año 2005, como conmemoración del centenario del *Annus Mirabilis* de Einstein, el DIPC se ha convertido en un importante foco de divulgación científica en la ciudad, merced a la organización de los encuentros denominados *Passion for Knowledge* en los que se imparten conferencias plenarias por destacados investigadores (Premios Nobel incluidos) para el público en general, se llevan a cabo encuentros con estudiantes de secundaria y con jóvenes científicas y científicos, sesiones de la conocida plataforma de divulgación Naukas, sesiones streamers, exposiciones, talleres infantiles, espectáculos, proyecciones, etc.

Otras iniciativas

Las implicaciones de la investigación de la Facultad en ámbitos próximos a la ciudad donostiarra no acaban en los Centros que hemos mencionado hasta ahora. Sirva como ejemplo el caso del Departamento de Química Orgánica I de la UPV/EHU, que ilustra el nivel de investigación y transferencia al que han llegado Grupos originalmente constituidos en la Facultad de Química. El Departamento tiene su origen en el Prof. Ramón Mestres, que ocupó en 1976 una de las dos primeras cátedras creadas en la Facultad. Posteriormente, fue el Prof. Claudio Palomo (Premio Euskadi de Investigación 2006), a quien el Prof. Mestres dirigió su Tesis en 1983, quien asumió el liderazgo de ese Departamento.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://10.62534/rseq.aq.2019

El Departamento mantiene líneas de investigación en Catálisis asimétrica y sostenible, Síntesis Orgánica en Química Médica y Química Bioorgánica, que han dado lugar a interesantes procesos de transferencia tecnológica.

Así, la empresa MIRAMOON PHARMA SL se fundó en 2019 promovida por el Prof. Jesús Mª Aizpurua, Catedrático del mencionado Departamento y el Dr Adolfo López de Munaín del Instituto de Investigación Sanitaria Biogipuzkoa, también radicado en San Sebastián. Su objetivo es el desarrollo preclínico de nuevas moléculas para el tratamiento terapéutico de enfermedades neurodegenerativas y neuromusculares raras. Recientemente, la Agencia Americana de medicamento FDA y la europea EMA han otorgado sendas autorizaciones para el uso del nuevo compuesto MP-004 en el tratamiento de la retinosis pigmentaria por administración tópica no invasiva.

En 2006, los profesores Fernando Cossío (Catedrático de Química Orgánica, Premio Euskadi de Investigación 2020 y actual Director de Ikerbasque) y Ana Arrieta, Profesora Titular del mismo Departamento, crearon la empresa IKERCHEM, que en 2014 se refundó como QUIMATRYX, integrada en el grupo Oncomatryx. Su actividad se centra en el diseño y desarrollo de nuevas entidades químicas para el tratamiento de diversas formas del cáncer, especialmente mediante la inhibición de dianas epigenéticas. Uno de los productos desarrollados ha sido licenciado a un grupo chino (HiDiamond) y está a punto de iniciar los ensayos clínicos.

En el ámbito de otro Departamento, el de Química Aplicada, el Profesor Titular de Bioquímica Unai Ugalde fundó, en 2008, junto con la cooperativa Goizper, la empresa BIOFUNGITEK S.L. que produce fungicidas de residuo cero y ecológicos.

A modo de conclusión

A lo largo de estas últimas cinco décadas, la Facultad de Química ha desempeñado un papel fundamental tanto en el avance de la investigación científica como en el fomento de la cultura de la innovación en Donostia-San Sebastián y el País Vasco.

Su impacto en la sociedad donostiarra y guipuzcoana es indiscutible. 2000 licenciados, 650 graduados y 800 doctores trabajan en muchos ámbitos profesionales. Investigación científica, calidad de agua, suelo y alimentos, industrias farmacéuticas y químicas, educación secundaria y formación profesional, por citar algunas, con tasas de empleo y ocupación del 88% y 97%, respectivamente, a fecha de 2020. A este hecho se une el impacto económico de las 65 patentes y de los proyectos de investigación financiados logrados a lo largo de estos años. De hecho, se han traído millones de euros a Gipuzkoa que han servido para formar a muchos jóvenes investigadores. Actualmente, en 14 grupos de investigación de alto nivel reconocidos en la Facultad trabajan 186 investigadores. Hay 100 proyectos de investigación activos en marcha y alrededor de 20 son internacionales. Entre ellas destacan las 2 ERC otorgadas por la Comisión Europea (4 MM de euros).

En lo que se refiere a las publicaciones científicas, a lo largo del siglo XXI han salido de la Facultad más de 10.000 publicaciones, de las cuales más de 8.500 han sido en revistas científicas internacionales de reconocido prestigio. El impacto de estos trabajos en la comunidad científica ha sido muy grande. Prueba de ello es que en la conocida lista Standford, que nombra a investigadores influyentes, hay un buen número de miembros de nuestra Facultad.

Durante los días 28, 29 y 30 de mayo de 2025, como uno de los actos preparados para celebrar el aniversario que nos ocupa, tendrá lugar el evento *Donostia is Science*, coorganizado por la Facultad y los Centros de investigación mencionados anteriormente. Se trata de una magnífica oportunidad para rememorar los logros descritos en este artículo, acompañados de otros actores clave de la comunidad científica de la ciudad. De este modo, se espera establecer nuevas colaboraciones que consoliden los vínculos existentes entre la comunidad científica de la ciudad para abordar retos futuros.

Bibliografía

[1] M.C. Caballer Vives, I. Pellón González, I. Garaizar Axpe, *LLULL* **1997,** *38*, 93-95.

[2] J.J. de Luyart, F. de Luyart, *Extractos de las Juntas Generales celebradas por la Real Sociedad Bascongada de los Amigos del País,* Vitoria. **1783**, pp. 46-88.

[3] European Physical Society, "EPS Historic Sites - Laboratorium Bergara", disponible en https://www.eps.org/page/Distinction_sitesLB, (consultado: 08/02/2025).

[4] I. Olaizola Etxeberria, *Euskonews* **2009**, n. 512, disponible en https://www.euskonews.eus/0512zbk/gaia51201es.html, (consultado 08/02/2025).

[5] I. Barriola Irigoyen, *Gestiones guipuzcoanas por una universidad oficial en el País Vasco 1963-1979,* Servicio Editorial Universidad del País Vasco, Bilbao, **1985**.

[6] M. Valero, J.C. Bevington *Eur. Polym. J.* **1989**, *25*(12), HI.

[7] C. J. Almuiña Fernández, J. J. Martín González,*Universidad de Valladolid. Historia y Patrimonio,* Ediciones Universidad de Valladolid, Valladolid, **1986.**

[8] S. de Pablo Contreras, C. Rubio Porres, *Eman ta zabal zau. Historia de la UPV/EHU 1980-2005*, Servicio Editorial Universidad del País Vasco, Bilbao, **2006**.

[9] Ikerbasque "Presentado el Informe sobre la Ciencia en Euskadi 2024", disponible en https://www.ikerbasque.net/es/noticias/presentado-el-informe-sobre-la-ciencia-en-euskadi-2024, (consultado: 08/02/2025).



Juan J. Iruin Sanz

Catedrático de Química Física (jubilado)

C-e: jj.iruin@gmail.com

ORCID: 0000-0001-7369-6158

Lcdo. en Química (Universidad de Zaragoza 1974). Doctor por la UPV/EHU (1979). Ha dirigido 19 Tesis Doctorales y publicado dos libros y 132 artículos en revistas internacionales del ámbito de los Polímeros o Plásticos. Cofundador y Subdirector entre 1999 y 2013 del Instituto de Materiales Poliméricos (POLYMAT).



Jon Mattin Matxain Beraza

Profesor Pleno de Química Física

C-e: jonmattin.matxain@ehu.eus

ORCID: 0000-0002-6342-0649

Lcdo. en Química (UPV/EHU 1998). Doctor por la UPV/EHU (2002). Ha dirigido 7 Tesis doctorales, actualmente dirigiendo 4 más. Ha publicado 1 libro y dos capítulos de libro, además de 116 artículos en revistas internacionales en el ámbito de la Química Física. Actualmente, Decano de la Facultad de Química de la UPV/EHU.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 47-56
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2007
La revista de la Real Sociedad Española de Química

HISTORIA DE LA QUÍMICA

A todo color: los tintes a través de la historia

In full colour: dyes through history

Juan José Serrano Pérez*
IES Berenguer Dalmau, Departamento de Física y Química, Catarroja, Valencia

PALABRAS CLAVE:
Tintes
Colorantes
Historia de la Química
Color

KEYWORDS:
Dyes
Colourants
History of Chemistry
Colour

RESUMEN:
La vestimenta siempre ha sido clave en la primera impresión que causa una persona. En este sentido son muy importantes los tintes, utilizados para dotar a las fibras textiles de diversos colores estables y diferentes de los que tienen por naturaleza. A lo largo de la historia han ido evolucionando las sustancias empleadas para tal fin, así como las preferencias de los consumidores.

ABSTRACT:
Clothing has always been key to the first impression a person gives. In this sense, dyes, used to provide textile fibres with various stable colours different from those they have by nature, are very important. Throughout history, the substances used as dyes have evolved, as well as consumer preferences.

Introducción

La indumentaria es un componente fundamental de la percepción que tenemos de nosotros mismos y de los demás, con respecto a nuestra personalidad y estatus, algo que se ha reflejado a lo largo de la historia.[1,2] Aunque vestirse para protegerse del frío es una necesidad básica, en sociedades más urbanizadas, como las de la Baja Edad Media, pronto se relacionó la ropa y el modo de vestir con la clase social. Además, no solo era necesario invertir dinero para lucir las mejores telas, sino invertir tiempo para conocer las nuevas tendencias y "estar a la moda".

En este sentido, los **tintes** pronto adquirieron una gran importancia en la industria textil, que cuenta con más de 4000 años de existencia, obteniéndose exclusivamente de fuentes naturales (a partir de plantas, líquenes, insectos o moluscos) hasta hace apenas 150 años.[3] En general, siempre se han valorado los tintes duraderos, es decir, aquellos que no se alteran por el lavado o por exposición a la luz o al aire.[3]

Los colores más buscados fueron patrimonio de las clases altas, que podían permitirse, por ejemplo, comprar togas teñidas con la **púrpura de Tiro**,[4] asociadas con la riqueza y el poder. La historia de los tintes está marcada por el avance científico, pero también guarda relación con el comercio, la economía, el poder y el espionaje.

Por otro lado, es en el siglo XIX cuando se institucionaliza la ciencia, pasando a ser una actividad muy valorada por la sociedad en términos sociopolíticos y económicos, y se profesionaliza la actividad científica, en gran medida gracias a la física del electromagnetismo y a la química orgánica, especialmente la relacionada con la industria de los tintes.[5] A mediados de ese siglo, **William H. Perkin** (ver Figura 1) sintetizó la **malveína** (o mauveína), una sustancia de color violeta que pronto fue empleada para teñir fibras textiles, convirtiéndose en el icono de una importante industria.[6]

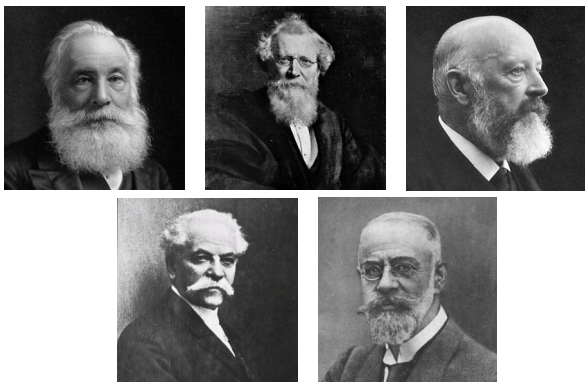


Figura 1. Algunos científicos destacados en el desarrollo de la química de los tintes (todas las imágenes son de dominio público). De izq. a dcha. y de arriba a abajo: William H. Perkin, August Wilhelm von Hofmann, Adolf von Baeyer, Heinrich Caro y Paul Friedländer.

En la actualidad,[7,8] los tintes son una parte esencial de la industria textil, que utiliza millones de toneladas de colorantes en un mercado que mueve billones de dólares, y en la que destaca la investigación sobre nuevos productos y procesos con un menor impacto en la salud y en el medio ambiente. En este sen-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: J.J. Serrano. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 47-56, http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2007

* C-e: jj.serranoperez@edu.gva.es

Manuscrito recibido: 02/09/2024 · aceptado: 16/01/2025

tido, los compuestos de los tintes son los que más contaminan el medioambiente[9], perjudicando la salud de los trabajadores de las fábricas textiles. Según estimaciones de la Unión Europea, la producción textil, a través de los tintes y los productos de acabado, es responsable de aproximadamente el 20 % de la contaminación mundial de agua potable.[10]

El color

El **teñido** es un proceso químico en el que se añade un colorante a los textiles y otros materiales, con el fin de que el producto final tenga un color diferente del original.

El **color**, desde un punto de vista fisiológico, es la sensación producida por los rayos luminosos que impresionan los órganos visuales y que depende de la longitud de onda de la radiación electromagnética. Alternativamente, desde un punto de vista físico, se puede interpretar como energía electromagnética comprendida dentro del espectro visible.[11,12] Se denomina **cromóforo** a la parte de una molécula (un átomo o un grupo de átomos) responsable de la **absorción de luz** de una determinada frecuencia y que, en el contexto de los tintes, es la causa principal del color que presenta la sustancia. Como onda (ver Figura 2a), la luz se puede caracterizar a partir de ciertas magnitudes, como la energía (*E*), la longitud de onda (λ), que es la distancia que separa dos puntos idénticos de la perturbación (verbigracia: dos máximos sucesivos, ver figura 2a) o la frecuencia (*f*), inversamente proporcional a la anterior, que es el número de veces que un determinado punto repite cierto estado de la perturbación por unidad de tiempo. La interacción de la luz con un objeto dependerá de la estructura microscópica del material y del tipo de radiación incidente.

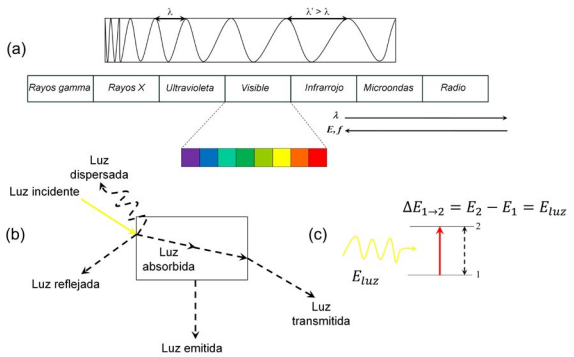


Figura 2. (a) El espectro electromagnético es la distribución del conjunto de las ondas electromagnéticas según su energía, su frecuencia o su longitud de onda. (b) Diferentes fenómenos de interacción luz – materia. (c) Cuando incide radiación electromagnética de la energía adecuada, correspondiente a la diferencia de energía entre dos estados, el compuesto químico absorbe la radiación y se excita pasando del estado 1 (estado fundamental) al estado 2 (uno de los posibles estados excitados).

La luz presenta una **naturaleza dual onda-partícula**: se propaga por el espacio como una onda (experimentando fenómenos de reflexión, refracción, polarización, interferencia, difracción, etc.) e interacciona con la materia como un conjunto de partículas denominadas **fotones** (como se pone de manifiesto, por ejemplo, en el efecto fotoeléctrico). Aunque las causas del color son muy diversas, todas ellas tienen el mismo origen: la interacción de los fotones de la luz con los electrones del material. Así, la luz puede interaccionar con un cuerpo de diferentes formas (ver Figura 2b) y experimentar, como consecuencia, diferentes fenómenos que pueden dar lugar al color que percibimos.

El estudio de la interacción entre la radiación y la materia es una de las aplicaciones más importantes de la **mecánica cuántica**. Los fenómenos derivados de dicha interacción dependen del tipo de radiación empleada, pero principalmente de la estructura electrónica de la sustancia.[12] Así, la absorción de luz por un compuesto químico puede provocar cambios en su estructura electrónica, con lo que el sistema pasa de su estado fundamental, el más estable, a un estado excitado de mayor energía (ver Figura 2c). Básicamente, lo que ocurre es que un fotón luminoso interacciona con un electrón del compuesto, y este electrón se excita pasando a un estado excitado de energía superior. El compuesto en estado excitado tenderá a relajarse y regresar al estado fundamental (el electrón volverá a ocupar su lugar original), y puede hacerlo, entre otras vías, emitiendo luz, cuyo color, en caso de emitir en el rango del visible, dependerá de la separación entre los estados permitidos de energía.

Como el color de una sustancia depende de su estructura microscópica, no poseerá el mismo color una sustancia que una mezcla. Por ejemplo, los colores de la esmeralda, el rubí y el zafiro se deben a la presencia de impurezas metálicas (cromo en los dos primeros casos y titanio en el último), sin las cuales serían tan transparentes como el diamante. Asimismo, en algunos casos, un determinado material se puede ver de un color determinado a la luz del día, pero bajo luz ultravioleta (UV) su color cambia, debido a la emisión de luz visible en forma de fluorescencia, como ocurre con minerales como la calcita, la willemita o el ópalo. La luz emitida es casi siempre de menor energía (mayor longitud de onda) que la luz excitante.

Por otro lado, cuando un haz de rayos luminosos paralelos se refleja en una superficie lisa, como un espejo, todos los rayos salen en la misma dirección (**reflexión especular**). Sin embargo, la mayoría de las superficies son rugosas y, como resultado, la luz se refleja prácticamente en todas las direcciones (**reflexión difusa**). Puesto que la reflexión difusa envía la luz en todas direcciones, podemos ver los objetos iluminados desde cualquier dirección. La mayoría de los objetos reflejan algunas longitudes de onda de la luz más que otras, y esa es una de las razones de los colores que percibimos.

La dispersión de la luz también puede jugar un papel importante. Si un fotón de la energía adecuada (correspondiente a la diferencia de energía entre dos estados permitidos por las reglas de la mecánica cuántica) interacciona con una molécula, por ejemplo, esta se excita y pasa a un estado excitado. Pero si un fotón interacciona con una molécula y su energía no es suficiente para producir la excitación, entonces la molécula permanece en su estado fundamental, y el fotón se dispersa. Si la longitud de onda de la luz incidente (luz solar) es grande comparada con el tamaño de la molécula (como ocurre con las moléculas que constituyen los gases de la atmósfera), la intensidad de la **luz dispersada** es proporcional a la cuarta potencia de la frecuencia. Por tanto, la intensidad dispersada correspondiente al azul y al violeta es considerablemente mayor que la del rojo (porque la luz roja, al ser de mayor longitud de onda, tiene menor energía y, por ende, menor frecuencia), y por eso vemos el cielo de color azul (y si no lo vemos violeta es porque la sensibilidad del ojo al violeta es mucho menor que al azul). De no haber atmósfera, veríamos el cielo de color negro.

En general, cuando un material iluminado con luz blanca presenta un determinado color, es porque ha absorbido todas las demás radiaciones, salvo la correspondiente a ese color, que o bien es reflejada (si el material es opaco) o es transmitida (si es transparente) hasta emerger por el lado opuesto. A este proceso se le denomina **absorción selectiva**. Así, el color observado, **reflejado** o **transmitido**, es el complementario del color ab-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

sorbido (ver Tabla 1). Cuando la absorción del espectro visible es total, el objeto aparece de color negro; si rechaza todas las radiaciones, reflejándolas, es de color blanco.

De este modo, las zanahorias y las hojas rojas en otoño son de color naranja porque contienen caroteno, una molécula que absorbe en la zona azul del espectro visible, reflejándose la luz que resulta de la absorción de las "frecuencias azules". Tenemos otro ejemplo con el oro y el cobre, los únicos metales que no exhiben ese característico color metálico porque absorben luz azul y violeta, quedando el amarillo. Del mismo modo, una disolución de un colorante alimentario rojo tiene este color porque absorbe luz cian (azul-verdosa) y transmite rojo. Asimismo, si mezclamos un pigmento rojo con uno amarillo lo veremos naranja porque en esa mezcla se absorben todos los colores excepto el rojo y el amarillo, lo que combinado da como resultado el color naranja.

Tabla 1. Zona visible del espectro electromagnético.

λ de luz absorbida (nm)	Color de la luz absorbida	Color visible
400-420	Violeta	Verde-amarillento
420-450	Violeta-azulado	Amarillo
450-490	Azul	Naranja
490-510	Azul-verdoso	Rojo
510-545	Verde	Púrpura
545-580	Verde-amarillento	Violeta
580-630	Naranja	Azul
630-720	Rojo	Azul-verdoso

Tintes y pigmentos

Los tintes y los **pigmentos** son los **colorantes** más importantes utilizados para dar color o cambiar el color de las cosas.[11] Se utilizan en muchas áreas, incluyendo la industria textil. Tanto tintes como pigmentos conducen a una **absorción selectiva** de la luz. Los pigmentos favorecen, además, la **dispersión** de la luz.

Los tintes, de naturaleza orgánica y formados por partículas relativamente pequeñas, suelen ser solubles en agua (lo cual es importante para impregnar íntimamente las fibras) y reaccionan químicamente con el material. Los tintes proporcionan colores más brillantes que los pigmentos, aunque son menos estables. En ocasiones se necesita la acción de un **mordiente** para facilitar esta unión.[7,8,13,14] Un mordiente es una sustancia que favorece la fijación del colorante en las fibras textiles, como el ácido tánico o ciertas sales metálicas como el alumbre (generalmente se refiere al sulfato de aluminio y potasio) y el acetato de calcio. Comúnmente se utilizan con los mordientes otras sustancias como el cremor tártaro (hidrogenotartrato de potasio) o el ácido oxálico, que sirven para dar brillo a los colores, proteger las fibras y/o ayudar a la absorción del mordiente.[3] En cambio, los pigmentos están constituidos por partículas más grandes, orgánicas o inorgánicas, que generalmente son insolubles en el medio en el que se incorporan, fijándose a su superficie sin que se produzca una reacción química.

Podemos encontrar diferentes tipos de tintes naturales.[3,13–15] Entre otros, los **tintes de cuba o a la tina** (como el **índigo**) son insolubles en agua, por lo que no se pueden utilizar directamente. Sin embargo, se pueden reducir a una forma "leuco", soluble en disoluciones acuosas alcalinas, que puede penetrar en las fibras textiles. Por exposición al aire son oxidados a su forma insoluble, de modo que quedan atrapados en la fibra. Por otro lado, los **tintes de mordiente** requieren que las fibras textiles sean tratadas con un mordiente. Durante el proceso de teñido, el tinte interacciona con el complejo mordiente–fibra formando una especie insoluble coloreada. Para llevar a cabo la tinción de las fibras con **quermes** o con **granza** es absolutamente imprescindible el empleo de mordientes.

Se pueden emplear diferentes técnicas de **análisis químico**[3,16,17] para determinar la composición de los tintes utilizados en muestras antiguas de tejido, como espectrometría de masas, cromatografía en capa fina, espectrofotometría ultravioleta–visible, espectrometría infrarroja y espectroscopía Raman, aunque el método más eficiente para separar e identificar mezclas de tintes es la **cromatografía líquida de alta resolución** (HPLC), debido a que las fibras textiles, de naturaleza orgánica, pueden interferir en el análisis del compuesto de interés (el tinte), presente en menor proporción en la muestra.

Desarrollo histórico

La preparación de colorantes (ver Tabla 2 y Figura 3) estuvo, inicialmente, relacionada con la alquimia.[13] Los primeros pigmentos utilizados, ya en el Paleolítico, eran de origen natural, principalmente de naturaleza inorgánica. Respecto al teñido de los tejidos, con la excepción de algunas arcillas, el reino mineral ofrece pocas sustancias tintóreas, aunque sí proporciona sales metálicas, los mordientes, como el alumbre, utilizado para aumentar la afinidad entre las fibras textiles y los colorantes.[18] En cambio, los seres vivos sí que pueden aportar una gran variedad de colores, y se empezaron a producir tintes naturales a partir de moluscos, insectos, plantas o líquenes.

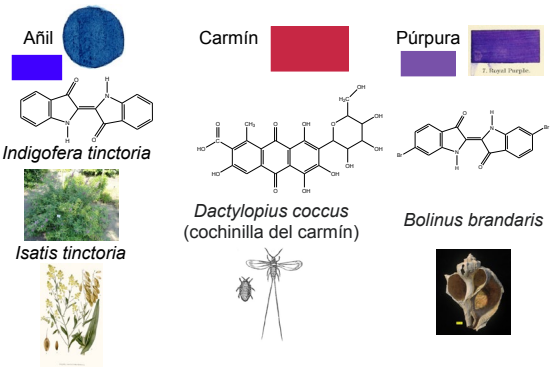


Figura 3. Algunos tintes de importancia histórica (todas las imágenes son de dominio público). También se representan sus fuentes naturales y las moléculas responsables del color.

En el Neolítico aparecen las primeras aplicaciones relacionadas con la transformación de la materia, y ya en el siglo IV antes de la era común (a.e.c.) se conocía el carácter corrosivo del vinagre sobre el cobre y el plomo, lo que permitió obtener pigmentos artificiales de gran interés artístico.[13] Por ejemplo, uno de los pigmentos de origen sintético más antiguos, el **azul egipcio**, fue sintetizado hacia 3100 a.e.c. Asimismo, en Mesopotamia y Egipto surgieron técnicas para extraer sustancias que sirviesen como tintes a partir de plantas, insectos y moluscos. En tales casos, dichas sustancias eran de naturaleza orgánica.

En relación con los procesos de tinción, **Plinio el Viejo** (siglo I) alabó las técnicas de los egipcios, conocedores de la venta-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Tabla 2. Algunos tintes con tradición histórica y principales moléculas responsables de su color. En ocasiones, la fuente y el tinte reciben la misma denominación. Asimismo, un mismo tinte puede tener diferentes fuentes.

Color	Tinte/Fuente	Molécula protagonista del color
Azul	Índigo, añil, glasto	Indigotina
Púrpura	Púrpura de Tiro	6,6' – dibromoindigotina
	Orchilla	Orceína
Rojo	Carmín de cochinilla	Ácido carmínico
	Quermes	Ácido quermésico
	Tinte laca	Ácidos lacaicos
	Granza o rubia	Alizarina y purpurina
	Caoba de las Indias Occidentales	Rubiadina
	Palo de Brasil	Brazileína
	Cártamo o alazor	Cartamina
Amarillo	Gualda	Luteolina y apigenina
	Bayas persas	Quercetina y kaempferol
	Quercitrón	Quercitrina
	Azafrán	Crocina
	Cúrcuma o turmérico	Curcuminas
Negro/ Marrón	Gallaritas	Ácido gálico
	Palo de Campeche	Hematoxilina

ja que suponía la aplicación de mordientes como el alumbre. Asimismo, los Papiros de Leyden y de Estocolmo contienen información relacionada con la tinción de tejidos[13] en forma de recetas.

Durante la Edad Media,[13] la destilación mejoró los procesos de extracción de las sustancias colorantes a partir de sus materias primas: plantas (hojas, troncos, raíces, estigmas) o insectos. Asimismo, los procesos de tinción[13] mejoraron significativamente, al introducir notables avances en el uso del alumbre. Sin embargo, su precio era elevado, así que para los trabajos más económicos se utilizaban otras sustancias como el cremor tártaro, residuo que deja el vino en los recipientes en los que se conserva. A finales de la Edad Media, resultó frecuente emplear una mezcla de alumbre y tártaro, lo que permitía obtener un mordiente de suficiente calidad sin resultar excesivamente caro.

El ascenso de la clase media de comerciantes y artesanos en el siglo XVI originó un notable aumento de la demanda de materiales colorantes,[13] lo cual se vio favorecido, por una parte, por los avances en los procesos de obtención y, por otro, por las grandes exploraciones marítimas y la colonización de América.

De hecho, la llegada de productos americanos a Europa supuso grandes cambios en el mercado de los tintes para tejidos.[19,20] Antes de que se exportara la **cochinilla** (*Dactylopius coccus*) y el índigo (a partir de *Indigofera suffruticosa Mill* o de *Indigofera jamaicensis*) desde el continente americano, el **quermes** (en concreto, a partir de la especie *Kermes vermilio* que crece en la coscoja, *Quercus coccifera*) y el **glasto** (*Isatis tinctoria*) se utilizaban en Europa para conseguir el color rojo y el azul, respectivamente. Este rojo era el "carmín" con el que comerciaban los fenicios desde el II milenio a.e.c. A partir de mediados del siglo XVI, la cochinilla y el índigo se popularizaron en detrimento del quermes y del glasto, mucho más caros. Este hecho provocó importantes repercusiones económicas en los países productores de glasto (Alemania y Francia) y de quermes (Italia, Grecia y Francia), los cuales intentaron oponerse a la expansión de los nuevos tintes con diferentes medidas coercitivas,[19] aunque su éxito era ya imparable.

En el siglo XVIII, los materiales colorantes fueron clasificados en dos grandes grupos según sus características y calidades:[21] los colorantes de **tinte mayor** o bueno, y los colorantes de **tinte menor** o falso. Como ejemplo del primer grupo tenemos la cochinilla, considerado precioso por sus colores y matices, y muy empleado en España para teñir las fibras, incluso de seda.

En el siglo XIX, la expansión de la industria textil obligó a buscar nuevas fuentes de colorantes,[18] lo que dio lugar a la tala masiva de maderas tintóreas en Colombia o Brasil, y a problemas sociales y económicos en la India e Indonesia, donde el uso de millones de hectáreas para el cultivo del índigo en detrimento de plantaciones para cultivar alimentos provocó la **Revuelta del Añil** en Bengala (India) en 1859. Asimismo, el célebre creador de Sherlock Holmes, **Sir Arthur Conan Doyle**, cuenta en sus memorias que por un saco de cochinillas se pagaba en 1881 lo que él ganaba en dos años como médico en la marina mercante.[22]

Como ya se ha comentado, la **química de los tintes sintéticos** jugó un papel decisivo en la profesionalización de la actividad científica, especialmente en Alemania,[5] donde la producción de tintes figura como la primera en la historia que alcanzó proporciones gigantescas, contando con miles de fábricas y de obreros, y generando pingües beneficios en exportaciones.

Color azul

El colorante azul índigo (añil) era muy conocido en la antigüedad, habiéndose encontrado evidencias de su uso en Egipto y la India en el período 2600 – 2000 a.e.c. Se trata de un tinte muy estable y duradero. Plinio el Viejo menciona que, después del tinte púrpura, el índigo era el siguiente en valor.[15]

Entre otras fuentes, se extrae de las hojas de la *Indigofera tinctoria*, una vez ha sido recolectada, y mediante una serie de reacciones químicas[3,13], el indicán (un β-glucósido) se transforma en **indigotina** (ver Figura 4), principal componente del índigo (la forma sulfonada se conoce como **carmín de índigo**, que también se utiliza para teñir la lana[23]).

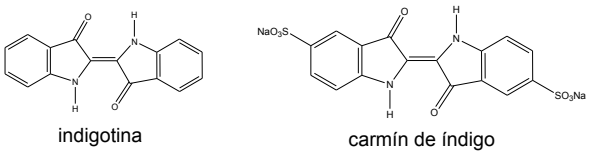


Figura 4. Compuestos químicos relacionados con el tinte azul.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

La forma **ceto** del compuesto (ver Figura 5) se reduce a la forma **leuco** (se suele emplear como agente reductor el hidrosulfito de sodio) en medio fuertemente básico (utilizando hidróxido de sodio). La forma leuco es incolora y muy soluble en agua (puede desprotonarse fácilmente con hidróxido de sodio formando una sal sódica soluble). De este modo penetra en el tejido, desarrollando una gran afinidad por las fibras de celulosa, lo cual resulta clave en el proceso de teñido de, por ejemplo, el algodón. Su oxidación posterior por el oxígeno del aire conduce a la forma ceto, que es intensamente coloreada e insoluble en agua, y que queda atrapada en el tejido.

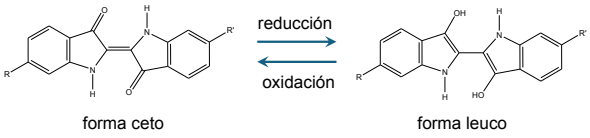


Figura 5. Transformación entre las formas ceto y leuco en la indigotina (R = R′ = H), constituyente fundamental del índigo, y la 6,6′-dibromoindigotina (R = R′ = Br), constituyente fundamental de la púrpura de Tiro.

Por otro lado, el índigo no se obtiene exclusivamente de las plantas, sino que puede obtenerse también del molusco *Murex trunculus*.[15]

El **azul glasto** o pastel tiene una composición y características similares al índigo y, al igual que este, también es conocido desde la antigüedad. De hecho, **Julio César**[15] destacó su uso por parte de los *Britanni* (habitantes de la isla de Gran Bretaña) en los "Comentarios sobre la guerra de las Galias". Procede de las hojas de la planta *Isatis tinctoria*. De nuevo, una serie de transformaciones químicas permiten obtener indigotina.[3,13] La planta productora del índigo (*Indigofera*) se cultivaba en la India, mientras que la *Isatis tinctoria*, de la que se extrae el glasto, es muy abundante en toda Europa, por lo cual era mucho más popular durante la Edad Media. A mediados del siglo XVII las importaciones de índigo desde la India se redujeron gracias a las plantaciones que se establecieron en América.

El comercio del índigo en el siglo XIX estaba controlado por Inglaterra, aunque esto cambió cuando la compañía BASF, con **Adolf von Baeyer**, **Heinrich Caro** y **Carl Heumann** a la cabeza (ver Figura 1), consiguieron sintetizarlo en 1897,[15,22] tras décadas de investigación (Baeyer había empezado sus trabajos en 1865, determinando su fórmula química en 1883). Además, la **serendipia**[a] desempeñó un papel crucial: Heumann intentaba mejorar el proceso de síntesis original de Baeyer, que había conseguido la primera patente en 1880. Accidentalmente se rompió un termómetro de mercurio en la mezcla de reacción, y resultó que el mercurio era un excelente catalizador del proceso, lo cual permitió su producción a gran escala. Posteriormente, Baeyer fue galardonado con el **Premio Nobel de Química** en 1905 por "el avance de la química orgánica y de la industria química, a través de su trabajo en colorantes orgánicos y compuestos hidroaromáticos".

Aunque el gobierno británico protegió el índigo natural aplicado a la coloración de los uniformes militares, pronto el índigo sintético dominó el mercado, y la producción de índigo natural prácticamente ha desaparecido desde entonces.

Un problema del índigo es su desgaste por fricción, como suele suceder en los "tejanos" o "pantalones vaqueros". A mediados del siglo XIX, **Levi Strauss**, un empresario alemán que había emigrado a Nueva York siendo muy joven, fundó la primera compañía productora de pantalones vaqueros. Estos pantalones se hicieron muy populares porque, debido a su desgaste, no había dos pares iguales,[20] y su éxito entre los consumidores ha sido continuo desde finales de la década de 1960.

Color púrpura

El origen de la **púrpura de Tiro** o púrpura imperial[4,13,15] se remonta a los fenicios, que destacaron por la producción de telas de intensos colores, estableciendo una importante industria del tinte en el siglo XIV a.e.c.[3] El color púrpura se convirtió muy pronto en un símbolo de estatus social, estando reservado exclusivamente a los altos dignatarios (emperadores, reyes y papas). En la célebre batalla de *Actium* (31 a.e.c.), el barco de **Cleopatra** lucía una vela púrpura, y en el siglo I **Nerón**, a la sazón emperador romano, decretó que únicamente el emperador tenía derecho a vestir prendas de color púrpura imperial.[24,25] La primera mención a la "púrpura real o imperial" se encontró en una tableta de barro de Cnossos, en Creta, fechada en el siglo XIII a.e.c.[17] Plinio el Viejo describió con detalle el proceso de producción del tinte, desde la misma captura de los moluscos. En algunos momentos su valor fue de 10 a 20 veces su peso en oro.[24,25] La industria de este tinte se desplomó hacia el siglo VII, y su producción en masa cesó en el siglo XV.

El líquido que producía el tinte se extraía de la glándula mucosa de algunas especies de moluscos que habitaban la región mediterránea (ver Figura 3), como *Bolinus brandaris* (también llamado *Murex brandaris*). Tal y como ocurría con la planta del índigo, el tinte no está presente en el molusco vivo, sino que se obtiene por hidrólisis enzimática de precursores presentes, en este caso, en una estructura glandular del molusco. El fluido extraído es inicialmente de color blanquecino (forma leuco), pero por la acción combinada del aire y de la luz adquiere, en etapas sucesivas, las coloraciones amarilla, azul, verde y, finalmente, púrpura. De entre las sustancias formadas destaca la **6,6′-dibromoindigotina,** de color violeta rojizo (ver Figura 6).

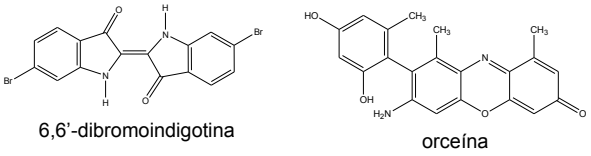


Figura 6. Compuestos químicos relacionados con el tinte púrpura. La púrpura de Tiro, cuyo componente principal es la 6,6′-dibromoindigotina, tuvo una gran importancia histórica, aunque ya no está disponible comercialmente.

Existe una gran similitud entre las moléculas responsables del color del índigo y la púrpura de Tiro (ver Figura 5), incluyendo la posibilidad de reducción a una forma leuco que es muy soluble en agua[15]. La presencia de los dos átomos de bromo en la púrpura de Tiro es la causa del desplazamiento hipsocrómico,[15] esto es, a una menor longitud de onda, del máximo de absorción con respecto al índigo, lo que conduce al cambio de color de azul a púrpura. La forma leuco es absorbida por el tejido, y la oxidación posterior por exposición al aire produce el tinte coloreado, y en aquella época se debía conocer por la experiencia que el proceso era más eficiente en presencia de luz solar.[24,25]

La obtención era muy costosa, ya que se necesitaban 10 000 ejemplares del molusco para obtener 1 g de tinte,[18,24] lo

[a] Hallazgo valioso que se produce de manera accidental o casual.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

cual explica su alto precio. Los ejemplares, una vez capturados y depositados en estanques artificiales, se machacaban hasta convertirlos en una pasta. Seguidamente, se llenaba el estanque con sal y se dejaba secar al sol durante unos días, dejando que una reacción fotoquímica convirtiera esa mezcla en un intenso tinte de color púrpura.

Efectivamente, al requerirse la acción de la luz, el proceso clave debía ser de tipo fotoquímico. En 1685, **W. Cole** descubrió que un fluido incoloro en las glándulas hipobranquiales de ciertos moluscos marinos se tornaba rojo por exposición a la luz. En 1908 **Paul Friedländer** (ver Figura 1) consiguió aislar el compuesto principal de la **púrpura de Tiro** del molusco *Murex brandaris*.[15,24] Después se comprobó que el compuesto 6,6'-dibromoindigotina también era un componente mayoritario de los tintes procedentes de otras especies de moluscos del Mediterráneo y de otras regiones.

Ya en el siglo XIX se utilizaba un colorante púrpura extraído del guano, la **muréxida**, que tuvo un gran éxito entre 1855 y 1863, presentándose como la púrpura de Tiro redescubierta.[4,22,26] Sin embargo, su síntesis era cara, y pronto encontró competencia con nuevos colorantes obtenidos a partir del alquitrán, un subproducto de la producción del gas de alumbrado por destilación de la hulla.

Por otro lado, los tintes procedentes de líquenes fueron utilizados para imitar la púrpura procedente de los moluscos. Estos tintes se obtenían por fermentación de extractos procedentes de líquenes de diferentes especies en presencia de amoniaco y aire. Un ejemplo es la orchilla, un liquen del cual se extrae la **orceína** (ver Figura 6), un colorante de color rojo violáceo (púrpura). Este compuesto tiene una larga tradición en su uso como colorante para teñir fibras textiles, como la lana. Precisamente, en la misma época que la muréxida apareció otro tinte conocido como **púrpura francés**, un colorante de origen vegetal preparado en 1856 por un tintorero de Lyon a partir de la orchilla, y que podía aplicarse sobre seda y lana sin necesidad de mordiente,[26] aunque tampoco tuvo mucho éxito

La fabricación industrial a gran escala de tinte púrpura representa otro famoso caso de serendipia[5,26,27]. En 1856, **William Henry Perkin**, discípulo de **August Wilhelm von Hofmann** (ver Figura 1), intentaba sintetizar quinina para tratar la malaria. Hofmann se había trasladado a Londres en 1845, por la intervención personal del príncipe consorte Alberto de Sajonia, esposo de la Reina Victoria,[5] para convertirse en el primer director del *Royal College of Chemistry*, lo cual le permitió formar a muchos de los químicos británicos involucrados en la próspera industria de los tintes.

En uno de sus experimentos para sintetizar quinina, al oxidar anilina con dicromato de potasio y ácido sulfúrico, Perkin obtuvo un precipitado negruzco que se disolvió parcialmente en alcohol, dando lugar a un bello color púrpura: había descubierto la malveína, el primer colorante orgánico sintético que se comercializó con éxito,[4,6,14] vendiéndose como sal de acetato, aunque también se utilizaron otros iones, como sulfato y cloruro[15,27]. Ya no se utiliza en procesos de teñido, pero tiene una gran importancia histórica. Aunque se sabía que la anilina se coloreaba en presencia de sustancias oxidantes, fue mérito de Perkin sintetizar el colorante y descubrir su capacidad tintórea. De hecho, con anterioridad Hofmann había descubierto una nueva clase de colorantes de la anilina,[22] los "violetas de Hofmann", que adquirieron gran importancia. El éxito de Perkin se debió a que también prestó mucha atención a las necesidades de los potenciales consumidores, ideando métodos para fijar el tinte al algodón, la seda y la lana.

Perkin fue capaz de proponer una fórmula molecular para la malveína, pero su estructura molecular no fue determinada hasta 1994.[26–29] De hecho, el tinte estaba constituido, en realidad, por una mezcla compleja de compuestos, donde destacan las denominadas malveínas A y B,[4] y cuya composición puede variar según el proceso de preparación del tinte y los materiales de partida utilizados (ver Figura 7a). De hecho, parece ser que Perkin utilizó sulfato de anilina que, sin él saberlo, contenía impurezas de diferentes isómeros de toluidina,[4,6] por lo que la carta de patente original ofrece solo información limitada para su síntesis.

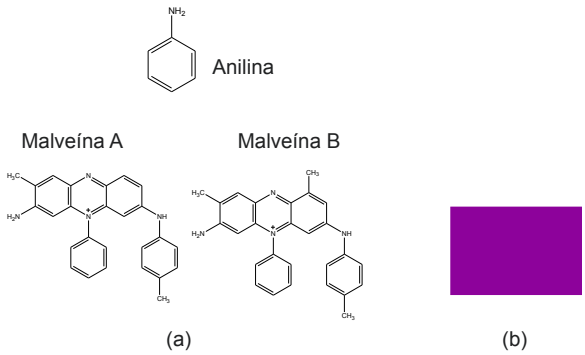


Figura 7. (a) Estructuras de la anilina, la malveína A y la malveína B. (b) Color de la malveína.

La **púrpura de Perkin**[4,5,22,26] fue el primer tinte estrictamente sintético de la historia, y popularizó el malva (ver Figura 7b) entre la aristocracia europea, fascinando a la Reina Victoria del Reino Unido o a la Emperatriz Eugenia de Francia. El interés comercial de este tinte abarcó el período entre 1857 y 1864. **Perkin** registró sus patentes entre 1856 y 1857. Ese mismo año se extendió su patente a Francia, pero por un error el colorante pasó a ser de dominio público. Paradójicamente, este problema resultó ser una ventaja, ya que hizo crecer la demanda del producto original, contribuyendo decisivamente al éxito de la empresa Perkin&Sons, que el propio Perkin había fundado con su padre y su hermano. El tinte cumplía todos los requisitos para constituir un éxito comercial: exhibía un color atractivo, y era resistente al lavado y también al deterioro por causa de la luz o de la polución.[27] La **m**alveína teñía la seda con facilidad, sin requerir de mordiente. Para la lana Perkin utilizó aluminio o hierro.

El trabajo de Perkin estimuló nuevas investigaciones tomando como base la **anilina**. En 1859, el químico francés **Emmanuel Verguin** logró un colorante rojo por oxidación de la anilina con tetracloruro de estaño: la **fucsina**.[15,22,26] La síntesis de la malveína o de la fucsina eran el resultado de investigaciones empíricas, en gran parte basadas en el ensayo y error, ya que por aquel entonces se estaban sentando las bases de la química moderna. A partir de la segunda mitad del siglo XIX, gracias a las nuevas herramientas conceptuales que fueron desarrollándose, especialmente en la teoría atómica y molecular, la base teórica de la química mejoró, permitiendo a la industria alemana superar a la francesa, con lo que se sintetizaron múltiples colorantes a precios asequibles. De hecho, pronto se logró la síntesis de dos colorantes naturales complejos: la alizarina y el índigo.[15,22]

Color rojo

Hasta principios del siglo XVI, la mayoría de los tintes rojos[3,4,13,20,30] se producían a partir de plantas como la **rubia roja** (*Rubia tinctorum*) y, en menor medida, el bigotillo (*Caesalpinia pulcherrima*). Respecto a los tintes procedentes de insectos, destacan la **cochinilla** americana o del carmín (*Dactylopius coccus*), el quermes o cochinilla de las encinas (*Kermes vermilio*), la co-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

chinilla polaca (*Porphyrophora polonica*), la cochinilla armenia (*Porphyrophora hamelii*) y la cochinilla laca (*Kerria lacca*). En general, se trata de tintes de mordiente. Los tintes de insectos producían mejores colores, pero eran mucho más caros. Las moléculas responsables del color de estos tintes, tanto de origen entomológico como vegetal, son derivados de la **antraquinona** (ver Figura 8).

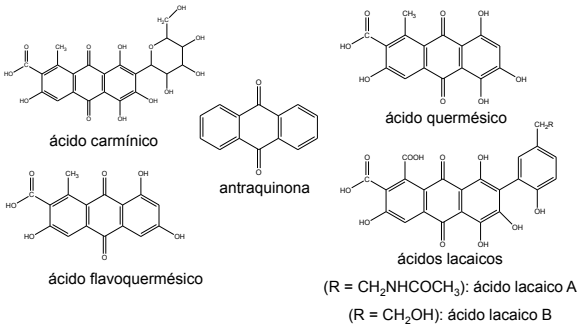


Figura 8. Compuestos químicos, procedentes de insectos, relacionados con el tinte rojo.

Durante la Edad Media los tintoreros usaban el quermes para obtener el tinte rojo. Ya se venía utilizando en Europa desde la época de los romanos, y Plinio el Viejo lo menciona como un tinte reservado a los uniformes de los generales del ejército.[30] En 1996 se halló en Francia un sarcófago[18] que contenía los restos del padre o del abuelo de **Guillermo III Tallaferro** (947 – 1037), conde de Tolosa, encontrándose restos de ropa teñida de rojo que habrían requerido el sacrificio de al menos 50 000 insectos del género *Kermes*. El colorante se extraía machacando el insecto seco y tratándolo con lejía. Este tinte es de color rojo carmesí y sus principales componentes son los **ácidos quermésico y flavoquermésico** (ver Figura 8). El producto se obtenía de diminutas larvas que se encontraban en gallaritas (excrecencias de tipo tumoral que salen en los robles, inducidas por insectos, para aislar el tejido externo de un ataque o de una infección) y de cochinillas presentes en gran parte de Europa, aunque las que producían el mejor tinte se hallaban en Alepo,[31] en Siria. Cabe destacar que la grana (quermes) se ofrecía como tributo a Roma desde Oriente Medio.[31]

Por otro lado, el papa Pablo II decidió en 1467 que las vestiduras de los cardenales, otrora teñidas de púrpura, fueran teñidas con cochinilla[3,4,21,30,32] cuando el comercio con la industria de los tintes procedentes de moluscos declinaba por su sobreexplotación.

El colorante procedente de la cochinilla armenia ya era empleado en Armenia, Turquía e Irán desde el siglo VIII a.e.c.,[3,21] con uso de mordientes de estaño. También se utilizaba el tinte procedente de la cochinilla polaca desde, al menos, el siglo VI en el centro y norte de Europa, especialmente cuando el quermes era difícil de obtener, como ocurría en épocas de conflictos militares. Asimismo, el tinte procedente de cochinillas laca, cuyo componente principal lo constituyen los **ácidos lacaicos** (ver Figura 8), fue muy popular en Asia cientos de años antes de ser introducido en Europa, hacia el siglo XVIII.

Sin embargo, a principios del siglo XVI, con la introducción de la cochinilla americana, criada sobre los nopales o tunas (un tipo de cactus), se produjo una revolución en la tinción de tejidos y su uso se extendió en detrimento de los otros tintes rojos.[30] Este producto consiste mayoritariamente en ácido carmínico (ver Figura 8), igual que el procedente de la cochinilla armenia. Históricamente existe cierta confusión con estos productos, dada la gran cantidad de nombres comerciales y, más recientemente, los problemas científicos en desentrañar sus estructuras moleculares. Así, los términos "cochinilla", "extracto de cochinilla", "ácido carmínico", "carmín", o "ácido aminocarmínico" se han venido utilizando sin una descripción precisa.[31] Lo que conocemos como **carmín** es un complejo de aluminio con **ácido carmínico** (ver Figura 9).

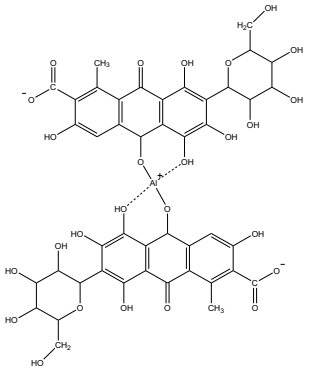


Figura 9. Estructura química del carmín.

En América se han encontrado evidencias del uso de la pasta de cochinilla en épocas muy anteriores a la conquista española, entre los aztecas, los mayas y los incas,[30,31] constituyendo además un importante tributo en las sociedades precolombinas. Los españoles pronto mostraron un gran interés en identificar el origen del precioso tinte. El color era originario de los panes de *nocheztli*, como era conocido en el mercado azteca.[21] El misionero franciscano **Bernardino de Sahagún**, autor de la "Historia general de las cosas de la Nueva España" (entre 1540 y 1585), describe cómo se vendía a pintores y tintoreros el *nocheztli*, preparado en forma de panes formados por una masa compacta de insectos, que se preparaba y dejaba secar, con la finalidad de garantizar la conservación del producto y facilitando también el transporte. Como mordiente se solía utilizar el alumbre.[30] Estos insectos parasitan ciertas especies de cactus, pero solo unas cuantas son favorables para propósitos comerciales, destacando la especie *Opuntia indicamil*. En México y Sudamérica se practicó la selección artificial conjunta de cactus e insectos, específica para ciertas regiones geográficas, con la finalidad de mejorar el producto obtenido.[31] En 1599, **Gonzalo Gómez de Cervantes**[30] documentó el cultivo, recolección y secado de las cochinillas en un informe preparado para el virrey de Nueva España, **Don Luis de Velasco**, incluyendo también información sobre el cuidado de los cactus. Y en 1653, el misionero español **Bernabé Cobo**[30] describió el uso del tinte, incluyendo el mordiente y la adición de otras sustancias ácidas o alcalinas para cambiar el color natural rosa brillante de la cochinilla al carmesí (y a otras tonalidades) en su obra "Historia del Nuevo Mundo". En el siglo XVIII la cochinilla se usaba en Europa para obtener dos colores: el carmesí y el escarlata.[30]

El primer cargamento documentado de cochinilla enviado a España data de 1523, y su comercio durante la época colonial constituyó un recurso económico equivalente al del oro y la plata. De hecho, entre 1758 y 1858 se exportaron 27 000 toneladas de cochinilla desde México a Europa.[3] Durante mucho tiempo España mantuvo el monopolio del tinte rojo procedente de América, pese a que muchas naciones intentaron obtenerlo mediante el espionaje y el robo. Por ejemplo, en 1776, el botánico francés **Thierry de Menonville** fue enviado a México para robar el insecto. Sin embargo, el origen químico del tinte era desconocido, lo cual complicaba la tarea de saber qué y dónde buscar. Dado que las plantaciones de cochinilla esta-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

ban muy vigiladas, los ladrones cazaban cochinillas salvajes (cuyo contenido en tinte era insuficiente), y luego las utilizaban con cactus plantados en cualquier lugar donde pudieran crecer. Llevó mucho tiempo percatarse de que se requerían cepas específicas de insectos y cactus que, además, habían sido deliberadamente optimizadas para los requerimientos de un área geográfica concreta.[30,31]

La cochinilla de América, que tiene su origen en México, presenta una gran similitud con el insecto mediterráneo, la grana o quermes, no solo por pertenecer a la misma familia de los coccidios, sino porque su principio colorante, el ácido carmínico, es muy similar al principio tintóreo del quermes, el ácido quermésico (que no contiene el fragmento de carbohidrato, ver Figura 8).

Respecto al carmín de cochinilla, hay que destacar la aportación del ingeniero holandés **Cornelius Drebbel**, que a principios del siglo XVII introdujo el uso del cloruro de estaño como mordiente,[3,13] lo cual mejoraba la calidad, en cuanto a brillo y durabilidad, de los tintes obtenidos.

Actualmente, el principal productor de cochinilla es Perú, aunque también destaca la **cochinilla de Canarias**,[21] importada de América y criada en el archipiélago desde el siglo XIX, que es un producto que cuenta con Denominación de Origen Protegida.[33]

Por otro lado, respecto a los tintes rojos de origen vegetal, destaca la granza rubia, que procede de la granza o rubia roja (*Rubia tinctorum*). Los colores obtenidos no eran tan brillantes como los obtenidos a partir del quermes, y por ello se utilizaba como tinte rojo para las clases bajas.[31] La rubia roja procede de la India, pero en períodos de alta demanda fue extensivamente cultivada en Europa y en Oriente Próximo. De nuevo, las moléculas responsables del color pertenecen al grupo de las antraquinonas,[3,13] mayoritariamente **alizarina** y **purpurina** (ver Figura 10), también presentes en las raíces de otras especies de la familia de las rubiáceas. Originariamente, la primera se encuentra en forma glucosídica (ácido ruberítrico) y la segunda en su forma carboxilada (**pseudopurpurina**). Con el paso de tiempo y una vez seca la raíz, la pseudopurpurina experimenta un proceso de descarboxilación y se transforma en purpurina. El colorante se extrae de la raíz seca que, una vez reducida a polvo, se trata con agua caliente. El color amarillento inicial de la disolución adquiere finalmente un color rojizo, debido a la hidrólisis del ácido ruberítrico y su transformación en alizarina y glucosa.

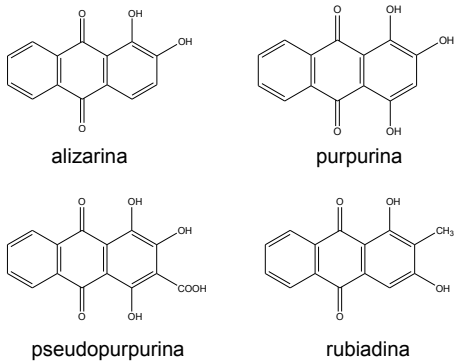


Figura 10. Compuestos químicos, procedentes de plantas, relacionados con el tinte rojo.

La alizarina es otro tinte que precisa de mordiente y sirve para teñir el algodón, la lana y la seda. Es un tinte rojo muy apreciado y con una larga tradición histórica. En el siglo XVIII se utilizaba para teñir de rojo el uniforme del ejército inglés[32] (y de ahí el sobrenombre de "casacas rojas"). Fue aislada en el laboratorio en 1826, y también fue empleada desde 1835 para teñir los uniformes de la infantería y de la caballería del ejército francés.[22] En 1869, **Karl Graebe** y **Karl Libermann**, ayudantes de Adolf von Baeyer en Berlín, determinaron la estructura molecular del compuesto, lo que les permitió sintetizarla a partir del antraceno, gracias a la colaboración de Heinrich Caro. De nuevo, estamos ante un caso de serendipia, ya que su síntesis se basaba en la oxidación del antraceno con ácido nítrico para formar antraquinona. Después, la antraquinona debía reaccionar con ácido sulfúrico. Graebe y Libermann no consiguieron culminar la síntesis, y Caro también tuvo muchas dificultades. En un ensayo, Caro se ausentó un momento de su laboratorio. Al regresar, observó que se había producido un recalentamiento, y parte de la mezcla de reacción se había incrustado en el techo del laboratorio,[22] pero el resto del matraz constituía el producto deseado. Sin este feliz accidente, Caro no habría conseguido deducir que la reacción que buscaba solo se producía a una temperatura muy elevada, que ningún químico razonable habría utilizado por temor a destruir la antraquinona, y por el peligro del uso de ácido sulfúrico.

Curiosamente, Perkin patentó su proceso de síntesis de la alizarina por esa misma época, lo que les condujo a colaborar e intercambiar información. Esto llevó a una mejora del proceso y a un abaratamiento del producto. De hecho, hacia 1871 su precio era tan competitivo comparado con la rubia roja que se considera el origen de la expansión de la industria química en Alemania.[3]

Por otra parte, la **rubiadina**[3,34] (ver Figura 10), también derivada de la antraquinona**,** se puede extraer de la corteza de la caoba de las Indias Occidentales (*Swietenia mahagoni*) y de la planta conocida como mora de la India (*Morinda citrifolia*), y resulta especialmente adecuada para teñir seda usando como mordiente el dicloruro de magnesio o el sulfato de hierro (II). También se pueden extraer tintes rojos de otros árboles[3], como la **brazilina** (en realidad, la molécula responsable del color es la **brazileína**, una forma oxidada del compuesto anterior) del palo de Brasil o del brasilete de la India, o de otras plantas, como la **cartamina**, procedente del cártamo o alazor (ver Figura 11).

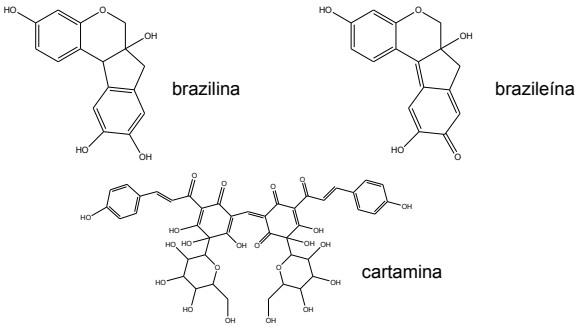


Figura 11. Otros compuestos químicos, procedentes de plantas y árboles, relacionados con el tinte rojo.

Color amarillo

Los tintes amarillos [3,4,20] presentan flavonoides (flavonas y flavonoles) como responsables de su color (ver Figura 12). Son tintes de mordiente.

La **gualda** (*Reseda luteola*), crece y se cultiva en gran parte de Europa, por lo que su uso fue muy común hasta finales del siglo XIX. Cuando se utiliza con alumbre como mordiente produce colores amarillos muy brillantes debido a la presencia de **luteolina** y **apigenina**. También destaca la hiniesta (*Genista tinctoria*), a partir de la cual se extrae un tinte amarillo cuyos componentes principales son la **luteolina** y la **genisteína** (ver Figura 12).

© 2025 Real Sociedad Española de Química

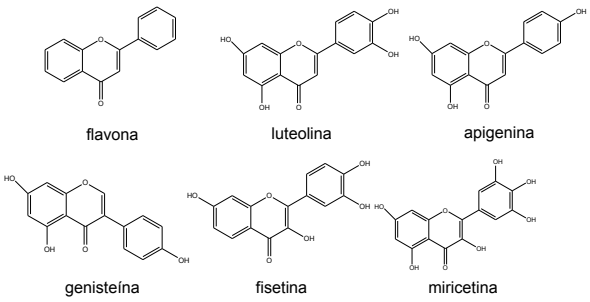


Figura 12. Compuestos químicos relacionados con el tinte amarillo.

Por otro lado, el árbol de las pelucas (*Cotinus coggygria*), presente en el sureste de Europa (Italia, Francia y España), entre otras regiones, se ha utilizado desde la Edad Media para producir tinte amarillo gracias a la acción de la **fisetina**, la **miricetina** y la **sulfuretina** (ver Figuras 12 y 13).

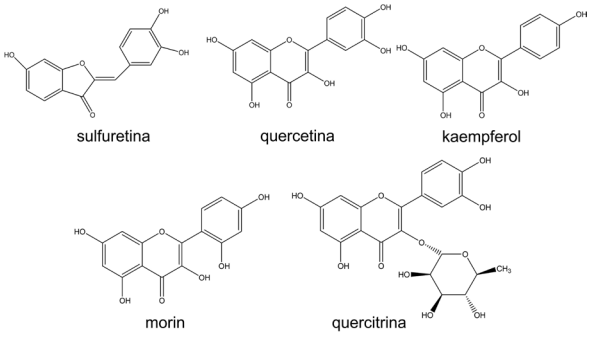


Figura 13. Otros compuestos químicos relacionados con el tinte amarillo.

Además, las bayas persas (arbustos y pequeños árboles del género *Rhamnus*) contienen un gran número de flavonoides, entre los que destacan la **quercetina** y el **kaempferol** (ver Figura 13). Por otro lado, el árbol conocido como brazo de fuego (*Maclura tinctoria*), presente en Cuba, Jamaica o Puerto Rico, y que se introdujo en Europa en el siglo XVI, proporciona un tinte amarillo brillante (gracias al morin y el kaempferol), que actúa con rapidez en los tejidos cuando se usa con mordientes.

El principio activo del **quercitrón**[20] es la quercitrina (ver Figura 13), glucósido formado a partir del flavonoide quercetina y el monosacárido ramnosa. Se obtiene de la encina tintórea (*Quercus velutina*), importada de Norteamérica a finales del siglo XVIII y con un contenido en tinte muy interesante.

Por otro lado, el **azafrán**, obtenido de los estigmas secos de las flores de *Crocus sativus*, tiene una larga historia de uso como tinte directo (esto es, se puede aplicar directamente sobre las fibras), produciendo un color amarillo anaranjado gracias a la **crocina** (ver Figura 14). Se puede utilizar con alumbre como mordiente.

Finalmente, la **cúrcuma** o turmérico, también conocida como azafrán indio, se obtiene de las raíces de la planta *Curcuma domestica*. Se utilizaba como tinte directo en algodón, lana o seda, en combinación con otros tintes, gracias a la acción de su mezcla de **curcuminas I, II y III** (ver Figura 14).

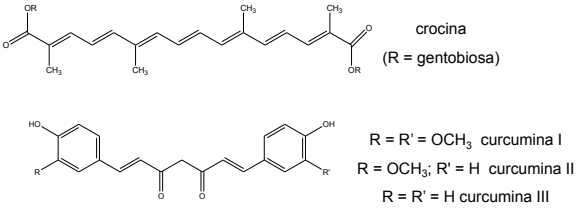


Figura 14. Más compuestos químicos relacionados con el tinte amarillo.

Otros colores

Varios colores diferentes de los ya citados se pueden obtener mezclando diferentes tintes. Por ejemplo, los colores verdes se obtienen mezclando tintes azules y amarillos.[3]

A diferencia de las luces de diferentes colores, que se mezclan de forma **aditiva** (así, la adición, en igual intensidad, de los tres colores primarios de la luz, verde, azul y rojo, resulta en grises claros, que tienden idealmente al blanco), la mezcla de tintes y pigmentos es **sustractiva**: algunas de las longitudes de onda de la luz blanca son eliminadas por absorción, y la luz reflejada (por ejemplo, desde una superficie pintada o un tejido coloreado) o la luz transmitida (como se ve a través de un cristal o de una disolución) es coloreada.[12] Esta **síntesis sustractiva** es la que tiene lugar al imprimir documentos en color, y los tres colores primarios son la tríada cian (C) - magenta (M) - amarillo (AM), a los que se une el color negro (N). Si un material absorbe los tres colores primarios, no queda prácticamente luz para ser reflejada o transmitida y el material se muestra negro o casi negro (C + M + A = N). El negro generado por la mezcla de colores primarios sustractivos no es tan profundo como el color negro puro (uno que absorbe todo el espectro visible). Por ello se utiliza el cartucho negro en las impresoras, lo cual genera un mejor contraste.

Aparte de mezclar otros colores, también se puede extraer tinte negro de fuentes naturales.[3,20] Como fuentes vegetales de marrón y negro destacan las gallaritas o las plantas del género *Rhus*, a partir de los que se obtienen tintes de mordiente. La clave de su color la proporcionan los taninos, debido a la presencia en estos polímeros de estructuras como la del **ácido gálico** o el **ácido elágico** (ver Figura 15).

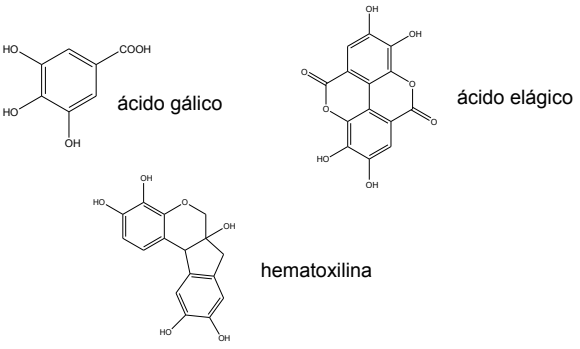


Figura 15. Compuestos químicos relacionados con tintes marrones y negros.

Las gallaritas constituyeron una fuente importante de tintes marrones y negros gracias a su alto contenido en taninos. En este caso, se produce un tinte de color negro que se puede utili-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

zar con un mordiente de hierro. Estas gallaritas se forman como reacción de brotes del roble *Quercus infectoria* a los huevos de un insecto, en concreto una avispa del género *Cynips*. Por otro lado, diferentes especies de *Rhus* presentan altos niveles de taninos en sus hojas. Este tinte fue conocido y utilizado en Egipto, Grecia y Roma.

Asimismo, el negro también se puede obtener a partir del palo de Campeche[20] o palo de tinte (*Haematoxylum campechianum*), del cual se obtiene la **hematoxilina** (ver Figura 15).

Conclusiones

Los tintes han sido muy importantes desde la antigüedad, y en muchos casos han destacado como artículos de lujo. Durante mucho tiempo estos compuestos eran obtenidos a partir de seres vivos: vegetales, insectos y moluscos. El avance de la química como disciplina científica permitió entender los procesos químicos subyacentes en la elaboración de los tintes y en su aplicación a los tejidos, así como la síntesis de estos compuestos en el laboratorio y la producción de nuevos tintes con mejores propiedades.

Bibliografía

[1] N. Hester, E. Hehman, *Pers. Soc. Psychol. Rev.* **2023**, *27*, 414–433.
[2] J. V. García Marsilla, *Anales de Historia del Arte* **2014**, *24*, 227–244.
[3] E. S. B. Ferreira, A. N. Hulme, H. McNab, A. Quye, *Chem. Soc. Rev.* **2004**, *33*, 329–336.
[4] D. García Bello, *La Química de Lo Bello*, Editorial Paidós, Barcelona, **2023**.
[5] J. M. Sánchez Ron, *El Jardín de Newton: La Ciencia a Través de Su Historia*, Editorial Crítica, Barcelona, **2009**.
[6] T. F. G. G. Cova, A. A. C. C. Pais, J. S. Seixas De Melo, *Sci. Rep.* **2017**, *7*, https://doi.org/10.1038/s41598-017-07239-z.
[7] T. A. Khattab, M. S. Abdelrahman, M. Rehan, *Environ Sci Pollut Res* **2020**, *27*, 3803–3818.
[8] J. Che, X. Yang, *Heliyon* **2022**, *8*, https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2022.e10979.
[9] A. Marcos, "Las sustancias químicas de la ropa pueden perjudicar la salud" disponible en https://www.agenciasinc.es/Reportajes/Las-sustancias-quimicas-de-la-ropa-pueden-perjudicar-la-salud, **2019** (consultado 29/11/2024).
[10] Parlamento Europeo "El impacto de la producción textil y de los residuos en el medio ambiente," disponible en https://www.europarl.europa.eu/topics/es/article/20201208STO93327/el-impacto-de-la-produccion-textil-y-de-los-residuos-en-el-medio-ambiente, **2024** (consultado 29/11/2024).
[11] A. Gürses, M. Açıkyıldız, K. Güneş, M. S. Gürses, in *Dyes and Pigments*, Springer, Cham., **2016**, pp. 13–29.
[12] J. J. Serrano-Perez, *An.Quim.* **2019**, *115*, 314–320.
[13] M. San Andrés, N. Sancho, J. M. De la Roja, *An.Quim.* **2010**, *106*, 58–65.
[14] A. Kumar, U. Dixit, K. Singh, S. Prakash Gupta, M. S. Jamal Beg, in *Dyes and Pigments - Novel Applications and Waste Treatment* (Ed.: Raffaello Papadakis), IntechOpen, **2021**.
[15] R. J. H. Clark, C. J. Cooksey, M. A. M. Daniels, R. Withnall, *Endeavour* **1993**, *17*, 191–199.
[16] Z. C. Koren, *Dye Hist. Archaeol.***1995**, 27–37.
[17] I. Karapanagiotis, *Sustainability* **2019**, *11*, https://doi.org/10.3390/su11133595.
[18] D. Cardon, *Investigación y Ciencia Temas 27 El color* **2002**, *27*, 36–41.
[19] M. Vázquez de Agredos Pascual, M. Domenech Carbo, D. Yusa Marco, S. Vicente Palomino, L. Fuster López, *Arché* **2007**, 131–136.
[20] K. G. Gilbert, D. T. Cooke, *Plant Growth Regul.* **2001**, *34*, 57–69.
[21] A. Batista Dos Santos, S. Vicente Palomino, D. Yusa Marco, *Arché* **2007**, 103–108.
[22] G. Bram, N. T. Anh, *Investigación y Ciencia Temas 27 El color* **2002**, *27*, 42–47.
[23] S. Komboonchoo, T. Bechtold, *J. Clean. Prod.* **2009**, *17*, 1487–1493.
[24] P. E. McGovern, R. H. Michel, *Acc. Chem. Res.* **1990**, *23*, 152–158.
[25] P. E. McGovern, R. H. Michel, *Anal. Chem.* **1985**, *57*, https://doi.org/10.1021/ac00291a002.
[26] A. S. Travis, *Technol. Cult.* **1990**, *31*, 51–82.
[27] M. M. Sousa, M. J. Melo, A. J. Parola, P. J. T. Morris, H. S. Rzepa, J. Sérgio Seixas De Melo, *Chem. Eur. J.* **2008**, *14*, 8507–8513.
[28] J. Seixas De Melo, S. Takato, M. Sousa, M. J. Melo, A. J. Parola, *Chem. Comm.* **2007**, 2624–2626.
[29] O. Meth-Cohn, M. Smith, *J. Chem. Soc. Perkin 1* **1994**, *5–7*.
[30] E. Phipps, *Metropolitan Museum of Art Bulletin* **2010**, *67*, 4–48.
[31] R. W. Dapson, *Biotech. Histochem.* **2007**, *82*, 173–187.
[32] C. G. Wood, *ChemMatters* **1986**, 4.
[33] Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación "D.O.P. Cochinilla de Canarias," disponible en https://www.mapa.gob.es/es/alimentacion/temas/calidad-diferenciada/dop-igp/cochinilla/Cochinilla_de_Canarias.aspx, **2016** (consultado 29/11/2024).
[34] M. Ahsanul Haque, G. M. Arifuzzaman Khan, M. Ahsanul Haque, S. M. Abdur Razzaque, K. Khatun, A. Kumar Chakraborty, M. Shamsul Alam, *Indian J. Fibre Text. Res.* **2013**, *38*, 280–284.



Juan José Serrano Pérez

IES Berenguer Dalmau, Departamento de Física y Quí-mica, c/Blasco Ibáñez, 46470, Catarroja, Valencia

C-e: jj.serranoperez@edu.gva.es
ORCID: 0000-0002-2203-7758

Doctor en Química, en la especialidad de Química Teórica y Computacional, cuyas áreas de investigación son el estudio teórico de la fotofísica y fotoquímica de compuestos de interés biológico y farmacéutico, mecanismos de reacciones fotoquímicas y propiedades optoelectrónicas de materiales orgánicos. Ha ocupado diferentes puestos como investigador y docente en la Universitat de València, la Universitat de Barcelona, el Imperial College London, la Universidad Isabel I y la Universidad Europea de Valencia. En 2019 obtuvo por oposición una plaza en el Cuerpo de Profesores de Enseñanza Secundaria, en la especialidad de Física y Química.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 57-61
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.1994

La revista de la Real Sociedad Española de Química

HISTORIA DE LA QUÍMICA

Breve estudio histórico sobre el sentido del momento dipolar eléctrico en química

A brief historical study on the direction of the electric dipole moment in chemistry

Juan Quílez*

Grupo Especialzado de Didáctica e Historia de la Química y de la Física. RSEQ - RSEF. Valencia, España

PALABRAS CLAVE:

Momento dipolar eléctrico
Sentido vectorial
Criterio histórico en química
Libros de texto de química

RESUMEN:

Se realiza un breve análisis histórico acerca de la representación vectorial que se realiza del momento dipolar eléctrico en química. Este criterio, que es el opuesto al adoptado en física, tiene como origen los trabajos que Sidgwick publicó a principios de los años treinta del siglo pasado y que se consolidó a lo largo de las siguientes décadas. Específicamente, los autores de libros de texto de química adoptaron de forma mayoritaria el sentido químico de este vector. A finales del siglo pasado, algunos autores de libros de química física empezaron a usar el criterio físico, pero en los libros de química orgánica y de química general todavía se sigue mayoritariamente la tradición histórica.

KEYWORDS:

Electric dipole moment
Vector direction
Historical convention in chemistry
Chemistry textbooks

ABSTRACT:

A brief historical analysis is carried out concerning the vectorial representation of the electric dipolar moment in chemistry. This convention, which is the opposite of the one adopted in physics, has its origin in the works that Sidgwick published in the early 1930s and was consolidated in the following decades. Specifically, authors of chemistry textbooks mostly adopted the chemical direction of this vector. At the end of the last century some authors of physical chemistry textbooks started to use the physical convention, but organic chemistry and general chemistry textbooks still mainly follow the historical tradition.

Introducción

Un artículo reciente de esta revista[1] critica que en los libros de texto de química general se emplee una representación para el momento dipolar eléctrico con el sentido opuesto al establecido en física. En ese trabajo se cita otro estudio previo sobre el error conceptual que,[2] según sus autores, supone la forma en la que habitualmente se representa vectorialmente el momento dipolar en química. En otras publicaciones se apoya esta visión,[3] señalando que esta orientación causa confusión o que resulta una creencia errónea sin fundamento.[4]

El artículo referido cita algunos trabajos de autores que iniciaron el estudio del momento dipolar en química.[1] Sin embargo, no presenta un análisis histórico completo, lo que impide conocer específicamente cómo se originó su estudio dentro de esta disciplina. Tampoco aporta una visión amplia acerca de cómo se desarrolló en los estudios de química centrados en este concepto. Además, la muestra de libros empleada se compone en su mayoría de libros de texto recientes de química de segundo de bachillerato, lo que no permite entender cómo se ha perpetuado en el tiempo este criterio químico.

Por todo ello, este trabajo se plantea como propósito establecer el contexto en el que se inició esta representación química. En particular, tiene como objetivo clarificar y aumentar la perspectiva histórica referida a la orientación del momento dipolar de enlace y molecular, en la que el sentido del vector apunta de la carga parcial positiva a la negativa. También se ampliará la muestra de libros de texto, con el fin de analizar si los autores de libros de texto de distintas áreas de la química han mantenido a lo largo del tiempo este criterio.

Origen del momento dipolar de enlace y molecular

Para explicar el cambio de la polarizabilidad con la temperatura de sustancias como el agua o el cloruro de hidrógeno, Debye conjeturó que ciertas moléculas poseían un momento dipolar eléctrico permanente.[5] De forma análoga, dos años más tarde, Thomson,[6] en su estudio del comportamiento eléctrico de sustancias moleculares en estado gaseoso, estableció que existían dos tipos de moléculas: a) polares, que poseían un momento dipolar determinado (H_2O, NH_3, SO_2, HCl, CH_3OH); b) apolares, que eran eléctricamente simétricas y, por tanto, esta magnitud física tomaba un valor nulo (H_2, O_2, CO_2, CH_4, C_6H_6).

La existencia de un momento dipolar eléctrico asociado a un enlace químico fue una idea introducida en 1923 por Thomson.[7] Según este autor, el momento dipolar de una molécula era la suma vectorial de todos los momentos de enlace existentes en su estructura. Esta concepción la aplicó teóricamente al caso de bencenos sustituidos, particularizada a las situaciones que se pueden presentar cuando dos sustituyentes iguales ocupan las posiciones *orto*, *meta* y *para*, respectivamente. Cuando los dos sustituyentes idénticos se encontraban en posiciones *para*, la

CÓMO CITAR: J.Quílez. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 57-61, http://doi.org/10.62534/rseq.aq.1994

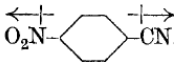
* C-e: jquilez@uji.es

Manuscrito recibido: 02/09/2024 · aceptado: 12/01/2025

© 2025 Real Sociedad Española de Química

molécula era *apolar*; en los otros dos casos, estableció sencillas fórmulas matemáticas a partir de los ángulos de un hexágono que corresponden a cada posición. Este método aproximado de determinación del momento dipolar molecular de distintas sustancias derivadas del benceno tenía como ventaja que no presentaba dificultades geométricas de cálculo, por estar circunscrito a un plano. Esta idea fue desarrollada posteriormente por diferentes autores para varios compuestos aromáticos.[8-11]

Conocido el momento dipolar de una molécula, con dos sustituyentes diferentes en posición *para*, y determinado el momento dipolar cuando en el anillo bencénico sólo existe uno de estos dos grupos, el cálculo del momento dipolar que corresponde al segundo grupo se obtiene a partir de la escritura de la correspondiente suma de valores vectoriales. Para realizar esta suma vectorial de momentos dipolares de enlace, Sidgwick estableció el criterio de representar el correspondiente vector tomando como origen el átomo que soporta la carga parcial positiva, apuntando hacia el átomo con la carga parcial negativa.[12,13] Este criterio también lo aplicó cuando, en lugar de un átomo, debía considerar un grupo de átomos (-NO_2, -CH_3, -OH, -CN). En su artículo de 1930, razonó de la siguiente forma:

> Se sabe que los momentos de los grupos -NO_2 y -CN en compuestos aromáticos son 3,9 y 3,84 respectivamente. El bajo valor de 0,66 del *p*-nitrobenzonitrilo muestra que en esta molécula los momentos de los dos grupos se oponen entre sí, es decir, se dirigen de manera similar con respecto al anillo; por lo tanto, dado que en -NO_2 el polo negativo se dirige hacia fuera del anillo, lo mismo debe ser cierto para el grupo -CN,
>
> 
>
> (Este símbolo ⊣⟶ para el dipolo evita la ambigüedad de la simple flecha, que los físicos escriben con la cabeza apuntando hacia el lado positivo y los químicos hacia el lado negativo del dipolo) (p. 1880).[12]

Posteriormente, este razonamiento lo aplicó para determinar el momento dipolar del grupo isonitrilo, -NC:

> En las dos isocianidas examinadas, el grupo -NC se encuentra en la posición *para* respecto al CH_3 y Cl, respectivamente, y el momento en el primer caso es 4,0 y en el segundo 2,07. El momento de CH_3-C< (⊣⟶) es 0,5 y el de Cl-C< (⟵⊣) 1,55. Por lo tanto, si el polo negativo del grupo >C-NC se orienta hacia afuera del anillo, su momento se verá incrementado por el de un grupo *para*-metilo, y disminuido por el del *para*-cloro:
>
> 
>
> Esto es lo que encontramos que ocurre. El momento de >C-NC calculado del compuesto *p*-tolil es 4,0 - 0,5 = 3,5; del compuesto *p*-cloro es 2,07 + 1,55 = 3,62; valor medio 3,6 (⊣⟶) (p. 1880).[12]

Más tarde, Sidgwick, en su libro *Some physical properties of covalent link in chemistry*[14] eligió el mismo ejemplo (con algunos valores ligeramente diferentes), realizando las representaciones que se presentan en la figura 1.

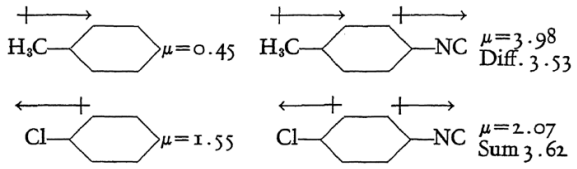


Figura 1. Representaciones de momentos dipolares correspondientes a grupos unidos al anillo de benceno, según Sidgwick (Figura extraída de la ref. [14]).

En esta ocasión, Sidgwick proporcionó una explicación más detallada para el sentido del momento dipolar:

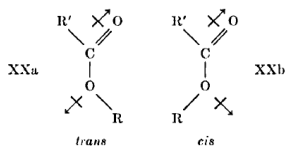
> Es natural considerar que los momentos se deben a un desplazamiento de los electrones compartidos desde la posición media del momento cero, y representar el sentido del momento mediante una flecha que apunta en la dirección en la que se puede imaginar que se produce este desplazamiento, es decir, hacia el extremo negativo del dipolo. Esta norma se adopta aquí. Algunos físicos, sin embargo, consideran que la electricidad positiva debe considerarse, por el hecho de su nombre, de mayor dignidad y, por lo tanto, adoptan el criterio opuesto, con la flecha apuntando hacia el extremo positivo. Para evitar confusiones, la flecha se escribe aquí con un + en su cola para que quede claro cuál es el extremo positivo (p. 139).[14]

El criterio del sentido del momento dipolar de Sidgwick encontró aceptación explícita en el área de la química orgánica.[15,16] Por ejemplo, Ingold se pronunció de la siguiente forma:

> El empleo de los signos + y – en los átomos, con otro significado que el de marcar los centros iónicos, tiende a causar confusión. Se puede utilizar la notación δ+ y δ- sin ambigüedad para representar la adquisición de polaridad a través del desplazamiento de electrones, y el signo de N. V. Sidgwick (⊣⟶) para un dipolo molecular (el extremo cruzado es el extremo positivo) también es útil (p. 231).[15]

En la década de los años cincuenta del siglo pasado, diferentes trabajos revisaron cómo el conocimiento del momento dipolar de los enlaces de una molécula permitía dilucidar la estructura de un compuesto orgánico. En todos los casos, se siguió empleando el criterio químico para señalar el sentido del vector que representa el momento dipolar.[17-19] Por ejemplo, Sutton señaló:

> Los momentos observados de los ésteres carboxílicos alifáticos, que varían de 1,6 a 1,9 D, concuerdan aproximadamente con el momento 1,5 D calculado para la configuración *trans* (XXa), con los grupos alquilo alejados entre sí (p. 405).[19]



En los años 70 del siglo pasado, dos nuevos estudios específicos se publicaron sobre el momento dipolar en química

© 2025 Real Sociedad Española de Química

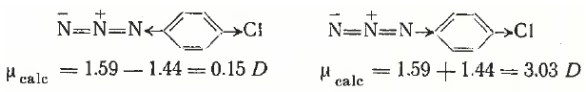
orgánica (*Dipole Moments in Organic Chemistry*),[20] y en química inorgánica (*Dipole Moments in Inorganic Chemistry*).[21] En el primero de ellos, se define el momento dipolar:

> Como se mencionó anteriormente, el momento dipolar eléctrico queda definido por la relación
>
> $$\vec{\mu} = q\vec{l}$$
>
> donde $\vec{l}$ es el radio vector dirigido desde el centro de gravedad de la carga eléctrica negativa al centro de gravedad de la carga eléctrica positiva (p. 41).[20]

Pero en la nota del pie de la página, se aclara:

> Se debe señalar que en la literatura química y en el presente libro se toma la dirección opuesta del vector del momento dipolar (p. 41).[20]

En este punto, se debe mencionar que esta aclaración no está recogida en el artículo referido,[1] ni los ejemplos que emplean estos autores, en los que el criterio del sentido del momento dipolar es el que corresponde al criterio químico, como a continuación se ejemplifica. Por ello, resultaría erróneo referirse a esta monografía para concluir que los artículos de química sobre el momento dipolar han seguido el criterio físico. Particularmente, veamos cómo se razona en este libro para determinar el sentido del grupo azida en un anillo bencénico:

> El valor del momento del grupo en la serie aromática se toma como el valor del momento dipolar del benceno mono sustituido. La dirección del vector del momento del grupo se puede establecer comparando los valores experimentales del *p*-cloro- o nitrobenceno con los valores calculados para las dos posibles orientaciones del vector del momento dipolar del otro grupo presente. Así, a partir de una comparación del valor experimental del momento dipolar de la *p*-clorofenilazida de 0,30 D con el calculado a partir de los momentos dipolares del clorobenceno (1,59 D) y la fenilazida (1,44 D),
>
> 
>
>
> queda claro que el vector del momento del grupo azido está dirigido del anillo al grupo azido (p. 90).[20]

Como ejemplo de la segunda publicación,[21] centrada en el estudio de los momentos dipolares de moléculas inorgánicas, en la figura 2 se justifica la diferente polaridad de dos moléculas con la misma geometría (NH_3 y NF_3) en las que el sentido del momento dipolar del enlace $N^{\delta-} - H^{\delta+}$ (⟵) es el opuesto al del enlace $N^{\delta+} - F^{\delta-}$ (⟶).

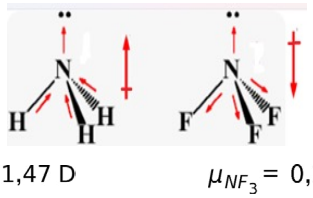
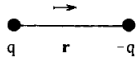


Figura 2. Representaciones en las que se muestra la diferente polaridad de dos moléculas con la misma geometría, NH_3 y NF_3 (Figura adaptada de la ref. [21]).

En concreto, en este libro se indica que:

> Suponiendo la posición de carga del enlace como se muestra, el vector neto de 3(N ← H) momentos refuerza el dipolo del átomo, mientras que los momentos 3(N → F) actúan en el sentido opuesto al dipolo del átomo, lo que ocasiona un momento bajo (p. 62).[21]

Un ejemplo más reciente, en el que también se emplea el criterio químico para el sentido del momento dipolar, es libro titulado *Theoretical Organic Chemistry*.[22] Inicialmente, define el momento dipolar de la siguiente forma:

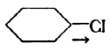
> El momento dipolar eléctrico ***μ*** es un vector y se define como ***μ*** = q ***r***, donde q es la magnitud de la carga y ***r*** es la distancia vectorial entre los centros de la carga positiva y la carga negativa
>
> 
>
>
> En este capítulo, la dirección positiva del momento dipolar se define como la dirección desde el centro de la carga positiva hacia el centro de la carga negativa (p. 234).[22]

Sin embargo, más adelante matiza lo siguiente:

> Como se mencionó en la introducción, en química orgánica la dirección positiva del momento dipolar normalmente se define como la dirección desde el centro de la carga positiva hacia el centro de la carga negativa. Este criterio también prevalece en química orgánica física y en química inorgánica. Sin embargo, en química física la dirección positiva del momento dipolar se define de manera opuesta, es decir, en la dirección de la carga negativa a la carga positiva (p. 239).[22]

Libros de texto

Libros de química orgánica, como el citado de Waters,[16] publicados en los inicios de los años cuarenta del siglo pasado,[23,24] adoptaron el criterio químico establecido la década anterior. Como ejemplo, Branch y Calvin razonaron de la siguiente forma:



> Es bastante seguro que la dirección del dipolo en C_6H_5Cl es la misma que en HCl y que las flechas dibujadas representan la dirección de desplazamiento de los electrones; es decir, que la punta de la flecha sea negativa. A partir de los datos disponibles es posible colocar un gran número de elementos y grupos en una serie según su tendencia a atraer electrones hacia ellos; es decir, según su electronegatividad (p.133).[23]

En el campo de la química física, Glasstone se adhirió explícitamente al criterio establecido por Sidgwick, realizando representaciones como las que se presentan en la figura 3.[25]

Por su parte, Pauling, en sus dos libros de Química (*General Chemistry* y *College Chemistry*),[26,27] representó el momento dipolar de la molécula de agua de la forma que se indica en la figura 4.

Además, en su libro *The Nature of Chemical Bond*,[28] empleó la misma simbología que Sidgwick (⟶) para representar el sentido del vector.

Nuevos ejemplos del criterio químico para el sentido del vector que representa el momento dipolar se pueden encontrar

© 2025 Real Sociedad Española de Química

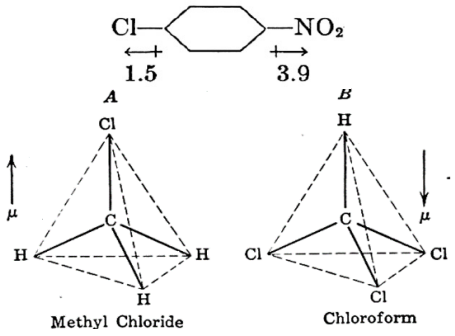


Figura 3. Representaciones de Glasstone de los momentos dipolares de enlace en el *p*-cloronitrobenceno y de la diferente polaridad del CH_3Cl y $CHCl_3$ (Figura extraída de la ref. [25]).

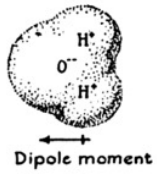


Figura 4. Representación del momento dipolar de la molécula de agua, según Pauling (Figura extraída de las ref. [26,27]).

en libros de texto de finales del siglo XX, tanto de química física[29-32] como de química orgánica.[33-35] Sin embargo, en este tiempo algunos autores del área química física no emplearon el criterio químico.[36,37]

Los autores de libros de texto de química orgánica publicados a lo largo de este siglo siguen manteniendo el criterio químico.[38-43] Sin embargo, no se han encontrado en este periodo libros de texto de química física que sigan esta norma, por lo que cuando este concepto se trata, se emplea el criterio físico.[44-46] En concreto, Atkins y de Paula señalan lo siguiente:

> Representamos los momentos dipolares mediante una flecha con una longitud proporcional a μ y que apunta desde la carga negativa a la carga positiva. (Tenga cuidado con esta convención: por razones históricas, todavía se adopta ampliamente la convención opuesta) (p. 353).[45]

Estos autores detallan esta precaución en otra publicación de la siguiente forma:

> En química elemental, un momento dipolar eléctrico está representado por la flecha $-\!\!\mid\!\!\longrightarrow$ añadida a la estructura de Lewis de la molécula, con el + marcando el extremo positivo (p. 621).[44]

Efectivamente, uno de estos dos autores, en su libro de química general emplea el criterio químico,[47] al igual que ocurre en otros libros de química general preuniversitaria[1] y de primer curso universitario,[48-51] aunque en algún caso,[51] también se advierte de que el sentido que se otorga al vector es el opuesto al que corresponde a la representación en física.

Conclusiones

El breve recorrido histórico realizado en este estudio sobre el sentido del vector que representa el momento dipolar eléctrico que se ha otorgado tradicionalmente en química ha permitido conocer el origen del criterio adoptado, así como comprender cómo se fue consolidando a lo largo del siglo XX. Su representación en un enlace covalente con una fecha apuntando hacia el átomo más electronegativo da idea del sentido del desplazamiento electrónico; el signo + de la cola de esta flecha refuerza esta visión cualitativa, lo que resulta particularmente intuitivo para entender propiedades de sustancias, explicadas a escala molecular.

La mayor parte de los trabajos iniciales sobre la determinación del momento dipolar molecular y de enlace se centraron en el estudio de moléculas y de grupos orgánicos. Los avances experimentados en este terreno pronto se incorporaron a los libros de texto de esta área de la química. Esta práctica de enseñanza ha continuado hasta nuestros días, ya que ninguno de los libros consultados de esta especialidad de la química emplea el criterio físico. Esta situación también se produce de forma muy amplia en el caso de libros de texto de química general tanto de nivel universitario como de segundo de bachillerato.

Sin embargo, en el campo de la química física, si bien inicialmente los autores de libros de texto adoptaron el criterio químico, a finales del siglo XX ya varios autores de esta área empezaron a utilizar el criterio físico, lo que parece que se ha consolidado a lo largo de este siglo.

En varias publicaciones a lo largo del siglo pasado se fue advirtiendo explícitamente de que en química y en física el vector que representa el momento dipolar eléctrico se simboliza con sentidos opuestos.[12-14,20,22] En este siglo, varios autores de libros de texto también han realizado esta aclaración.[44,45,51]

Esta disparidad también se recogió en las ediciones segunda y tercera del *Green Book* de la IUPAC.[52,53] Una vez establecido el criterio de su sentido, se realizaba la siguiente recomendación:

> Cuando un dipolo está compuesto por dos cargas puntuales Q y -Q separadas por una distancia r, se considera que la dirección del vector dipolo es de la carga negativa a la positiva. A veces se utiliza el criterio opuesto, pero no se recomienda (p. 14).[52]

En la edición electrónica actual, correspondiente al *Gold Book*,[54] ese consejo ya no está presente. Si bien proporciona como referencia la segunda edición del *Green Book* (p. 24),[52] omite la definición matemática previa ($\mu = \sum Q_i \boldsymbol{r}_i$) (p. 14),[52] así como la nota explicativa referida.

El único criterio admitido por la IUPAC para el sentido del momento dipolar es el que tiene como origen la carga negativa en la dirección de la carga positiva. Por tanto, su utilización con sentido opuesto en el campo de la química, aunque justificada suficientemente desde su representación inicial y utilizada durante mucho tiempo tanto en trabajos de investigación como en su enseñanza, no está avalada por este organismo regulador. En la actualidad, la comunidad educativa de la química, con la excepción del área de la química física, sigue respetando ampliamente la extensa tradición histórica existente, por lo que la adopción de este criterio unificador con la física está lejos de producirse en la práctica docente.

Bibliografía

[1] O. Val-Castillo, *An. Quím. RSEQ* **2024**, *120*(1), 32-35, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.1963.
[2] J.W. Hovick, J.C. Poler, *J. Chem. Educ.* **2005**, *82*(6), 889, https://doi.org/10.1021/ed082p889.
[3] A. Stone, *The Theory of Intermolecular Forces*, Oxford, 2013.
[4] J.M. Herbert, *J. Phys. Chem. A* **2021**, *125*, 7125–7137, https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c05962.
[5] P. Debye, *Physik. Z.* **2012**, *13*, 97-100, https://doi.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

org/10.1002/andp.19123441404
[6] J.J. Thomson, *Philos. Mag.* **1914**, *27*, 757-789, https://doi.org/10.1080/14786440508635150.
[7] J.J. Thomson, *Philos. Mag.* **1923,** *46*, 497-514, https://doi.org/10.1080/14786442308634273.
[8] C.P. Smyth, S.O. Morgan, *J. Am. Chem. Soc.* **1927**, *49*(4), 1030–1038, https://doi.org/10.1021/ja01403a022.
[9] J.W. Williams, *J. Am. Chem. Soc.* **1928**, *50*(9), 2350–2357, https://doi.org/10.1021/ja01396a005.
[10] J.W. Williams, *Chem. Rev.* **1930**, *6*(4), 589–619, https://doi.org/10.1021/cr60024a008.
[11] L.E. Sutton, *Trans. Faraday Soc***. 1934**, *30*, 789-801, https://doi.org/10.1039/TF9343000789.
[12] D. Ll. Hammick, R.C.A. New, N.V. Sidgwick, L.E. Sutton, *J. Chem. Soc.* **1930**, 1876-1887, https://doi.org/10.1039/JR300001876.
[13] N.V. Sidgwick, *Chem. Rev.* **1931**, *9*(1), 77–88, https://doi.org/10.1021/cr60032a003.
[14] N.V. Sidgwick, *Some Physical Properties of the Covalent Link in Chemistry*, Cornell University Press, **1933**.
[15] C.K. Ingold, *Chem. Rev.* **1934**, *15*(2), 225-274, https://doi.org/10.1021/cr60051a003.
[16] W.A. Waters, *Physical Aspects of Organic Chemistry*, Routledge, **1935**.
[17] H.R. Davidson, *J. Chem. Educ.* **1950**, *27*, 598-603, https://doi.org/10.1021/ed027p598.
[18] H. Lumbroso, *Annales de la faculté des sciences de Toulouse 4e série*, **1950**, *14*, 7-130.
[19] L.E. Sutton, en *Determination of Organic Structures by Physical Methods* (*Eds.*: E.A. Brande, F.C. Nachod), Academic Press, **1955**, pp. 373-425.
[20] V.I. Minkin, O.A. Osipov, Y.A. Zhsanov, *Dipole moments in organic chemistry*, Plenum Press, **1970**.
[21] G.J. Moody, J.D.R. Thomas, *Dipole moments in inorganic chemistry*, Edward Arnold, **1971**.
[22] C. Párkányi, *Theoretical Organic Chemistry*, Elsevier, **1998**.
[23] G.E.K. Branch, M. Calvin. *The Theory of Organic Chemistry*, Prentice-Hall, **1941**.
[24] A. Bernthsen, J.J. Sudborough. *A Textbook of Organic Chemistry*, Blackie & Son, **1941**.
[25] S. Glasstone, *Physical Chemistry*, MacMillan, **1946**.
[26] L. Pauling. *General Chemistry*, Allied Pacific, **1953**.
[27] L. Pauling. *College Chemistry,* Freeman, **1957**.
[28] L. Pauling, *The Nature of Chemical Bond*, Cornell University, **1960**.
[29] G.M. Barrow, *Química Física*, Reverté, **1975**.
[30] M. Díaz, A. Roig, *Química Física*, Alhambra, **1978**.
[31] A.W. Adamson, *A Textbook Physical Chemistry*, Academic Press, **1979**.
[32] K.J. Laidler, J.M. Meiser, *Physical Chemistry*, Benjamin, **1982**.
[33] J. Levisalles, B. Castro, *Química Orgánica*, Dossat, **1980**.
[34] T.W.G. Solomons, *Química Orgánica*, Limusa, **1982**.
[35] K.P C. Vollhardt, N.E. Shore, *Química Orgánica*, Omega, **1996**.
[36] G.W Castellan, *Physical Chemistry*, Addison-Wesley, **1971**.
[37] J. Casabó, *Estructura Atómica y Enlace Químico*, Reverté, **1996**.
[38] L.G. Wade, *Química Orgánica*, Pearson, **2004**.
[39] J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, *Organic Chemistry*, Oxford, **2012**.
[40] R.J. Ouellette, J.D. Rawn, *Organic Chemistry. Structure, Mechanisms and Synthesis*, Elsevier, **2014**.
[41] F.A. Carey, R.M Giuliano, *Química Orgánica*, McGrawHill, **2014**.
[42] P. Yukanis, *Fundamentos de Química Orgánica*, Pearson, **2015**.
[43] J. McMurry, *Organic Chemistry*, Cengage, **2016**.
[44] P. Atkins, J. de Paula. *Atkins' Physical Chemistry*, Oxford University Press, **2006**.
[45] P. Atkins, J. de Paula. *Elements of Physical Chemistry*, Oxford University Press, **2009**.
[46] R.G. Mortimer, *Physical Chemistry*, Elsevier, **2008**.
[47] P. Atkins, L. Jones. *Principios de Química. Los caminos del descubrimiento*, Panamericana, **2006**.
[48] R.H. Petrucci, F.G. Herring, J.D. Madura, C. Bisonnette, *Química General. Principios y aplicaciones modernas*, **2011**.
[49] T.L. Brown, H.E. LeMay, B.E. Bursten, C.J. Murphy, P.M. Woodward, *Chemistry. The central science*, Pearson, **2012**.
[50] R. Chang, J. Overby. *Química*, McGrawHill, **2020**.
[51] W. Whitten, R. Davis, M.L. Peck, G.G. Stanley. *Química*, Cengage, **2015**.
[52] I. Mills, T. Cvitaš, K. Homann, n. Kallay, K. Kuchitsu. *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*, Blackwell, **1993**.
[53] E.R. Cohen, T. Cvitaš, J.G. Frey, B. Holmström, K. Kuchitsu, R. Marquart, I. Mills, F. Pavese, M. Quack, J. Stohner, H.L. Strauss, M. Takami, A.J. Thor. *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*, Blackwell, **2007**.
[54] IUPAC *Compendium of Chemical Terminology - the Gold Book*, disponible en https://old.goldbook.iupac.org/html/E/E01929.html, **2014** (consultado 16/11/2024).



Juan Quílez
Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Química y la Física – RSEQ – RSEF
C-e: jquilez@uji.es
ORCID: 0000-0001-5428-4617

Juan Quílez es doctor en Ciencias Químicas. Ha sido catedrático de Física y Química, director de instituto, asesor en centros de formación permanente y profesor de formación inicial del profesorado (primaria y secundaria) en las universidades de Valencia y Jaume I. Sus principales líneas de investigación educativa son el lenguaje de la química, la historia de la química (y su inclusión en el currículum de química de secundaria), el estudio didáctico del equilibrio químico y el análisis crítico del enfoque STEM integrado. También ha publicado libros de texto y complementarios de Física y de Química de bachillerato.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 62-66
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2029
La revista de la Real Sociedad Española de Química

IMÁGENES DE LA QUÍMICA

Erlenmeyer y su matraz

Erlenmeyer and his flask

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.

Erlenmeyer y su erlenmeyer

> Es una de esas piezas de vidrio que todo el mundo reconoce. Si sostienes un *Erlenmeyer*[a] en la mano y llevas puesta una bata de laboratorio te conviertes en *El Científico* (si haces lo mismo con pantalones tejanos y una camiseta serás arrestado como fabricante de anfetas).
>
> Andrea Sella[1]

El matraz cónico de Erlenmeyer es, como dice Andrea Sella, uno de los más reconocibles símbolos de la química y de la ciencia en general. Sin embargo, no fue hasta 1860, aproximadamente, que los químicos pudieron disponer de este artilugio en sus laboratorios. Hasta entonces tenían que arreglárselas con los "vasos de precipitados cónicos" (Figura 1), menos esbeltos que los erlenmeyers y sin cuello, llamados por Faraday "vasos de precipitados de Phillips".[2] A pesar del nombre, esos vasos cónicos se usaban también para hacer valoraciones con una bureta, a juzgar por las ilustraciones de la época. Es de justicia, antes de hablar del erlenmeyer, hacer un breve esbozo biográfico de su progenitor, Emil Erlenmeyer, y dejar que sea él quien nos explique las principales características de su invento.

Texto

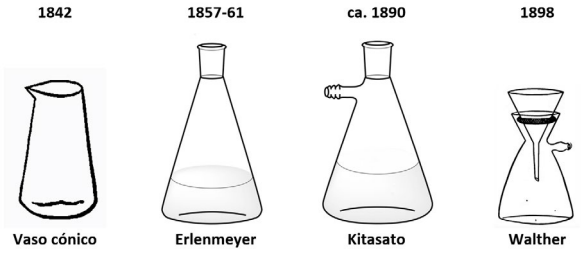


Figura 1. Matraz de Erlenmeyer junto con su predecesor, el vaso de precipitados cónico y dos productos de su metamorfosis: el kitasato y el matraz de filtración de Walther.

Emil Erlenmeyer (1825-1909) debía ser un culo de mal asiento. Nacido en Wiesbaden, estudió química durante un año en Giessen. Al año siguiente se desplazó a Heidelberg para estudiar física, botánica y mineralogía,[3] y volvió a Giessen para continuar sus estudios de química bajo la supervisión de Liebig. En 1848 se estableció en Wiesbaden como Asistente del químico analítico Carl Fresenius, un año después adquirió una oficina de farmacia en el cercano pueblo de Katzenelnbogen, y al año siguiente obtuvo su doctorado en Giessen, trasladó su farmacia a Wiesbaden y contrajo matrimonio.

Durante los siguientes cinco años simultaneó el trabajo en la farmacia con la docencia de física y química en una escuela de formación profesional, hasta que en 1855 abandonó la práctica de la farmacia, vendió el negocio y se desplazó a Heidelberg para preparar su habilitación. En esa ciudad trabajó con Bunsen y coincidió con científicos como Kirchhoff, Roscoe, Helmholtz, Kopp, Butlerov y Kekulé, llegando a forjar una amistad duradera con este último. También instaló un laboratorio para la docencia, por el que pasaron como alumnos futuras figuras como Borodin y Markownikoff.[1] En esos años su interés se centraba en procesos industriales, como asesor y como empresario. Se interesaba particularmente en el pigmento conocido como Azul de Prusia y en la utilización de superfosfatos como fertilizantes. Desarrolló, por ejemplo, un nuevo método para la producción de cloruro de hierro(III), que se usaba en pequeñas cantidades como astringente y agente hemostático, pero en grandes cantidades para la preparación del Azul de Prusia.

En 1860 Erlenmeyer asistió al histórico Congreso de Karlsruhe, organizado por Kekulé y Wurtz. Además, ese mismo año, en sendas publicaciones, dio muestras de su dominio del trabajo en el laboratorio químico y de su inventiva. En una de esas publicaciones presentaba una gradilla para tubos de ensayo con estas palabras:

> El siguiente dibujo es la forma de una gradilla para tubos de ensayo que vengo utilizando desde hace unos 10 años. Como tiene algunas ventajas sobre los que todavía son de uso casi general, y sobre todo porque Bunsen lo encontró práctico y lo introdujo en su laboratorio, pensé que sería apropiado darlo a conocer a nuestros lectores.[4]

El otro artículo, titulado "Sobre tecnología química y farmacéutica", empieza así:

[a] En este artículo escribo "Erlenmeyer" con mayúscula cuando me refiero al químico alemán o a sus parientes, pero "erlenmeyer" con minúscula para el matraz.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

* C-e: santiago.alvarez@qi.ub.es

> En la reunión de farmacéuticos celebrada en Heidelberg en 1857, presenté un matraz que utilizo para la precipitación de diversos compuestos químicos en análisis cuantitativos. Se diferencia de los llamados matraces verticales en que la panza (bola) y el cuello (cilindro) se juntan y forman un cono. La base es como la de un matraz de fondo plano, ligeramente rebajada y luego ligeramente redondeada para formar un cono. El diámetro de la base es = 3 si la altura del frasco desde el centro de la base hasta la boca es = 6 y el diámetro de la boca es = 1. Esta última está provista de un reborde; la forma de todo el recipiente recuerda a los frascos de farmacia.[5]

Explica luego que ha hecho fabricar matraces con esta forma a proveedores de material de vidrio de Frankfurt y Heidelberg, destaca que estos matraces combinan las ventajas de los vasos de precipitados con las de los matraces convencionales y enumera sus principales características:

- Se pueden calentar con una llama fuerte sin temor a las salpicaduras.
- Es tan fácil eliminar las partículas de precipitado adheridas a las paredes y al fondo como en un vaso de precipitados, porque se puede acceder a cualquier parte del interior del recipiente con una espátula o varilla.
- Los precipitados que se adhieren frecuentemente a las paredes y son muy difíciles de introducir en el filtro incluso después de repetidos enjuagues desde un vaso de precipitados, pueden eliminarse con la mayor facilidad agitándolo bien con el agua de lavado.
- Es también muy adecuado para la decantación y para separar dos líquidos inmiscibles de densidades diferentes.
- Es muy útil para la descomposición de sales de ácido carbónico por ácidos más fuertes –yo lo utilizo para alcalimetrías– para la descomposición de metales y sulfuros metálicos por ácido clorhídrico, ácido nítrico, agua regia, para realizar determinaciones cuantitativas, etc.

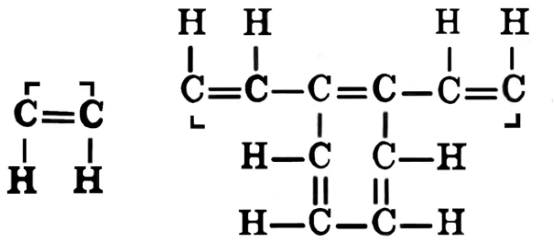
Este matraz, conocido universalmente con el nombre de su inventor[b], tiene también otras características favorables que escaparon a los elogios de Erlenmeyer, algunas porque se deben a modificaciones posteriores:

- Su cuello estrecho permite asirlo fácilmente con una mano para agitar su contenido y también sujetarlo a un soporte con una pinza.
- El cuello permite usar tapones de corcho o plástico o, en su versión con el cuello esmerilado, su pueden acoplar otras piezas de vidrio.
- Pueden estar graduados y a menudo tienen zonas esmeriladas o esmaltadas que permiten marcarlos con un lápiz o un rotulador.
- Pueden ser de vidrio o de plástico, y se presentan en una gran variedad de tamaños, con capacidades de entre 10 ml y 5 l.
- Resulta adecuado para hervir líquidos, ya que los vapores calientes se condensan en la parte superior del matraz, y se reduce la pérdida de disolvente.
- Puede sostener en su cuello embudos de forma alemana de varias medidas.
- Su fondo plano le da estabilidad al tiempo que permite calentarlo de forma homogénea con un mechero Bunsen y una rejilla, o bien con una placa calefactora eléctrica.
- Son muy indicados para realizar valoraciones de soluciones.
- También se usan en microbiología para la preparación de cultivos, pudiendo taparse fácilmente con algodón hidrófobo.
- El uso de rejillas con asbesto primero, y la fabricación de erlenmeyers con vidrio de borosilicato desde finales del siglo XIX,[c] evitan su rotura por los cambios de temperatura.

El mercado parece haber adoptado rápidamente el matraz de Erlenmeyer, ya que aparece en 1866 en el catálogo de material de laboratorio de la casa Griffins,[7] aunque no se hace alusión a Erlenmeyer, y se les llama "matraces triangulares".

El año de publicación del nuevo diseño de Erlenmeyer marca un punto de inflexión en su carrera, ya que a partir de 1862 prácticamente abandona la farmacia, las asesorías y sus actividades empresariales para dedicarse de lleno a la investigación y la docencia y convertirse en uno de los químicos académicos más prolíficos e influyentes de Europa, desde Heidelberg primero y entre 1868 y su jubilación en 1883 desde la Escuela Politécnica de Múnich. Algunos de los aspectos más destacados de la investigación de Erlenmeyer en esa época son: la síntesis del ácido isobutírico, la guanidina y la tirosina, así como el descubrimiento de la transformación espontánea de alcoholes α-insaturados en aldehídos o cetonas ("regla de Erlenmeyer").[8-9]

Desde el punto de vista conceptual, Erlenmeyer introdujo la expresión "química estructural" (*Strukturchemie*), así como las palabras "monovalente", "divalente", etc., en lugar de las usadas entonces, "monoatómico", "diatómico", etc. También modificó las fórmulas gráficas de Crum Brown, dando paso a la notación moderna. Así, introdujo el concepto de doble enlace para explicar la constitución del etileno y del triple enlace para la del acetileno (Figura 2a).[10] Adoptó enseguida la estructura cíclica de Kekulé para el benceno y propuso la fórmula del naftaleno como dos anillos de benceno compartiendo dos átomos de carbono (Figura 2b).



a) Acetileno b) Naftaleno

Figura 2. Fórmulas propuestas por Erlenmeyer para el acetileno y el naftaleno. Fuente: Referencia [10].

Evoluciones del Erlenmeyer

Con el tiempo, el versátil erlenmeyer se fue incorporando a numerosos montajes, acoplándole diversas piezas mediante un tapón de caucho agujereado o con juntas esmeriladas. Por otro lado, pequeñas variaciones en su diseño han ido dando lugar a nuevos matraces con propósitos específicos. El derivado más

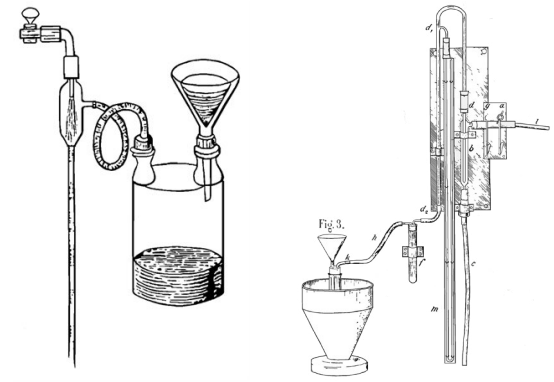
[b] "Erlenmeyerkolbe" en alemán, "Erlenmeyer flask" en inglés norteamericano, pero simplemente "conical flask" en inglés británico.

[c] Los vidrios de borosilicato, con un coeficiente de expansión térmica bajo, fueron descubiertos por el químico alemán Otto Schott (1851-1935) y desarrollados por la compañía Jena Glassworks en la década de 1880. En los USA, a principios del siglo XX, la firma Whitall Tatum & Co. fabricaba aparatos de laboratorio con este tipo de vidrio bajo la denominación "Nonsol", y en 1915 Corning Glass introdujo su propia marca llamada "Pyrex".[6]

© 2025 Real Sociedad Española de Química

extendido es el *kitasato*, también llamado *matraz de Büchner*,[d] en referencia al médico y bacteriólogo japonés Kitasato Shibasaburō (1853-1921) y al químico industrial alemán Ernst Büchner (1850-1924), respectivamente. Aunque no he llegado a descifrar a quién debe atribuirse su invención, sí que puede encuadrarse su aparición en el marco del desarrollo de las técnicas de filtración al vacío, que comentaré a continuación muy brevemente. Como puede verse en la Figura 1, las simples modificaciones respecto del erlenmeyer original consisten en la adición de una oliva lateral que permite conectar mediante tubo de goma una bomba de vacío (habitualmente una trompa de agua) y el uso del vidrio más grueso para prevenir las implosiones al hacer el vacío.

El químico suizo Jules Piccard propuso en 1865 un montaje para filtrar al vacío usando una trompa de agua y un embudo de forma alemana (Figura 3a).[11] Poco después, el alemán Robert Bunsen (1811-1899), más conocido por el mechero que lleva su nombre y por el descubrimiento del cesio y el rubidio junto con Kirchhoff, describió un montaje más elaborado para el filtrado al vacío (Figura 3b),[12] empleando un matraz de paredes gruesas, una bomba Sprengel modificada (*b*), un manómetro de mercurio (*m*) y una trampa de seguridad (*f*), también con un embudo de forma alemana y un matraz de filtración que tanto podría ser un erlenmeyer como un matraz de fondo redondo, pues en la imagen queda oculto por el recipiente protector de chapa o porcelana que lo contiene. Es evidente, no obstante, que la succión no se hace a través de una tubuladura lateral como en el kitasato, sino mediante un tubo que atraviesa el tapón.



a) b)

Figura 3. (a) Montaje propuesto por Piccard para filtrar al vacío con una trompa de agua, adaptado de la ref. [11]. (b) Sistema de filtración al vacío propuesto por Bunsen en 1868, adaptado de la ref. [12].

Otto Witt, en 1886, introdujo una mejora que consistía en colocar un disco perforado dentro del embudo sobre el que se situaba papel de filtro circular sin doblar y, dos años más tarde Robert Hirsch mejoró el diseño en un nuevo embudo con la placa integrada.[13] Finalmente, Ernst Büchner modificó la parte superior del embudo dándole forma cilíndrica, completando el que hoy conocemos como embudo Büchner.[14] Parece razonable que, a falta de confirmación documental, se sitúe la adopción del kitasato por parte de Büchner alrededor de esas fechas,1888-1890.

R. Walther, en Dresde, introdujo en 1898 una interesante modificación del kitasato,[15] que él llamó "matraz embudo" (Fig. 1). En él, el cuello cilíndrico es sustituido por un cono invertido que permite colocar un embudo de cualquier tamaño, ajustándolo herméticamente a las paredes mediante un anillo de goma relleno de aire. La ventaja estriba en que un mismo anillo sirve para cualquier tamaño de embudo, mucho más fácil de poner y quitar que un tapón de corcho o de goma, y que evita la necesidad de disponer de un amplio surtido de tapones. Al igual que decía Erlenmeyer de su matraz, Walther aseguraba que es casi imposible que los matraces-embudo vuelquen. También como Erlenmeyer, Walther contactó con una empresa, Greiner & Friedrichs de Stützerbach (Turingia), que fabricaba sus matraces, y de cuya comercialización se hacía cargo la empresa Richard Dies de Sonneberg (Turingia). Años más tarde los encontramos como "matraces de Walther" en el catálogo de material de laboratorio de Gerhardt.[16]

Otras variantes del erlenmeyer fueron desarrolladas para cultivos biológicos o reacciones de fermentación. El bioquímico y agrónomo francés Ulysse Gayon (1845-1929), profesor de la Facultad de Ciencias y director de la Estación Agronómica de Burdeos es conocido principalmente como inventor del *caldo bordelés*, fungicida compuesto por sulfato de cobre e hidróxido de calcio, ampliamente utilizado como fungicida para el tratamiento de la viña. Aquí, sin embargo, nos llama la atención el matraz que introdujo para estudios bacteriológicos y de reacciones de fermentación (Fig. 4).[17] Este matraz tiene la base más ancha y el cuello más estrecho que el erlenmeyer, forma que conservó durante muchos años y que se identificaba en catálogos de material de laboratorio como *matraz de Gayon*. [18-19]

1886 1903



Gayon Fernbach

Figura 4. Recipientes derivados del erlenmeyer, de izquierda a derecha: matraz de cultivo de Gayon, y matraces de cultivo de Fernbach, sin y con tubuladuras laterales.

El biólogo francés del Instituto Pasteur de París, Auguste Fernbach (1860-1939) introdujo un cambio sobre el diseño de Gayon, añadiendo una porción cilíndrica a modo de cápsula de Petri entre la base y el cono del matraz (Fig. 4). Existe una versión de este matraz con dos tubos laterales en lados opuestos para facilitar la circulación de aire, ya que Fernbach observó que una corriente de aire favorecía el crecimiento del bacilo de la difteria.[20]

Erlenmeyers fuera del laboratorio

La incorporación del erlenmeyer al imaginario popular ha hecho que algunos diseñadores adoptaran su forma para objetos de uso cotidiano fuera del laboratorio. El caso más evidente es el de los jarros decorativos *Chemistubes* (Fig. 5a), concebidos por la diseñadora y arquitecta italiana afincada en Madrid Teresa Sapey para la firma Vondom, con sede central en Beneixida, Valencia. Está realizado en resina de polietileno 100% reciclable y se presenta en diferentes acabados, colores y dimensiones.

Un segundo ejemplo de diseño basado en el erlenmeyer es la botella de 30 ml con cuentagotas para aceites esenciales y perfumes de la empresa china Guangzhou Jiaming Cosmetics (Figura 5b). Tenemos todavía un tercer ejemplo en un objeto completamente diferente. Nos lo ofrece la empresa Hubbardton Forge, del estado de Vermont, que comercializa la *Colección*

[d] Al parecer, el nombre "kitasato" se usa tan sólo en la península ibérica.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Erlenmeyer de lámparas, inspiradas en el matraz del mismo nombre (Figura 5c): «Nuestros diseñadores tomaron la forma fácilmente reconocible del matraz y la transpusieron a una impresionante familia de iluminación interior y exterior: lámparas colgantes de diferentes tamaños, luces semiempotradas, apliques de pared, farolas y postes de luz. Estas luminarias clásicas emplean vidrio transparente, igual que su homónimo.»



Figura 5. Objetos inspirados en el matraz erlenmeyer: (**a**) Jarrón *Chemistubes* diseñado por Teresa Sapey para Vondom (reproducido con autorización de Teresa Sapey + Partners y de Vondom). (**b**) Frasco de perfume con gotero de Guangzhou Jiaming Cosmetics. (**c**) una de las lámparas de la *Colección Erlenmeyer* de Hubbardton Forge. (**d**) aceitera antidegoteo diseñada por Rafael Marquina.

La aceitera antigoteo o *aceitera Marquina* (Figura 5d) es una evolución del erlenmeyer, que se extiende por encima del cuello cilíndrico con un pequeño cono invertido. Incorpora, además, una boquilla curvada que se acopla al cuello con una junta esmerilada. El cono invertido actúa como embudo para facilitar el llenado, pero al mismo tiempo recoge las gotas que se escurren por la boquilla al verter el líquido y las devuelve al interior del recipiente a través de una muesca en el tapón esmerilado. Esa muesca también permite la entrada de aire, facilitando el vertido del líquido. La conjunción de dos conos y un cilindro adoptada por Marquina permite coger la aceitera por el cuello como el erlenmeyer, sin necesidad de añadir un asa como en las aceiteras tradicionales.[21]

Esta aceitera, diseñada por Rafael Marquina (1921-2013) fue premiada con el Delta de Oro de la Asociación de Diseño Industrial (ADI-FAD) en 1961. A pesar de su innegable parentesco con el matraz de Erlenmeyer, su inventor afirmaba no haber conocido éste previamente y que su diseño se inspiró en una obra de cristal del diseñador finlandés Tapio Wirkkala. Más sorprendente aun resulta la semejanza de esta aceitera con el matraz de filtración de Walther: ¡basta con retirar el embudo y la arandela de goma a este último, convertir el cuello en una junta esmerilada y añadirle la boquilla de vertido!

Erlenmeyers en el arte

En otra ocasión he escrito sobre el fotógrafo alemán Albert Renger-Patzsch y sus fotografías de material de laboratorio, [22] presentes tanto en exposiciones de fotografía artística y en libros de arte como en un catálogo del fabricante de vidrio Jena,[23] por lo que no me extenderé aquí sobre su persona y su obra. Sólo destacaré la existencia de diversas fotos suyas de erlenmeyers, como una que muestra cómo embudos de diferentes medidas se pueden usar con un mismo matraz, o la que aparece en la Figura 6, en la que el juego de transparencias, sombras y reflejos confieren a un conjunto de matraces una apariencia de interpenetrabilidad, es decir, un aire inmaterial y casi espiritual. También he mencionado anteriormente a Hermann Nitsch[24] y he resaltado el uso extensivo que hace de material de laboratorio en sus obras de arte, entre el que no falta un buen número de erlenmeyers acompañados de numerosos recipientes de vidrio de laboratorio.

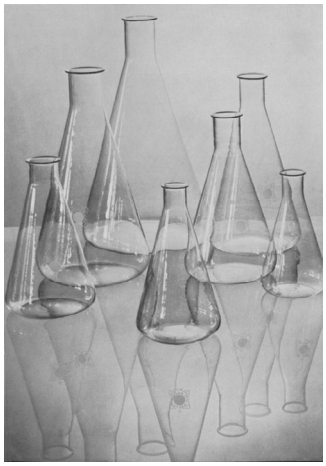


Figura 6. Erlenmeyers del catálogo Jena de 1937, fotografía de Albert Renger-Patzsch.

El destacado polifacético modernista Alexandre de Riquer (1856-1920) –dibujante, pintor, diseñador gráfico, grabador y poeta– realizó en 1887 una serie de ocho paneles decorativos que se pueden ver en el MNAC de Barcelona: *Composición con motivos vegetales japonizantes*; *Composición con ninfa alada soplando cañas*; *Figura femenina con una redoma en la mano*; *Figura femenina alada*; *Figura femenina con un vaso*; *Figura femenina oliendo adormidera*; *Composición con ninfa alada ante la salida del sol*, y *Composición con motivos vegetales japonizantes*. En el tercero de ellos, la "redoma" es en realidad un erlenmeyer (Figura 7). La mujer, que simboliza el Arte, parece recoger en su erlenmeyer los efluvios de la Naturaleza, simbolizada por unas flores (a la derecha del cuadro),[25] evocando tanto los perfumes, que explotó el modernismo en publicidad y envases, como los perfumistas que adoptaron los erlenmeyers como una herramienta de trabajo e introdujeron modificaciones en su diseño, tales como el uso de vidrio ámbar y de un tapón esmerilado para evitar tanto la fotodescomposición como la evaporación de las esencias.



Figura 7. *Figura femenina con una redoma en la mano*, Alexandre de Riquer, 1887, temple sobre lienzo. Web del Museu Nacional d'Art de Catalunya, licencia Creative Commons CC BY-NC-SA 3.0.0.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

También se debe hacer mención aquí del escultor británico Anthony Cragg (Liverpool, 1949). Habiendo trabajado en un laboratorio de bioquímica antes de dedicarse al arte, no es de extrañar que una parte de su obra esté inspirada en ciertos aspectos de la química, como las estructuras moleculares y el material de laboratorio. Su obra es bien conocida en la Península Ibérica, ya que se ha expuesto en el IVAM de Valencia (1992), en el Reina Sofía de Madrid (1995), en el MACBA de Barcelona (1997), en el CAC de Málaga (2003), en el museo Serralves de Porto (2004) y en Sa Llotja de Palma de Mallorca (2013).

Aunque la obra de Cragg es muy variada, una parte significativa de ella representa material de laboratorio. Sus *Bodegones de Laboratorio* (The Laboratory Still Lifes), por ejemplo, son cuatro series de aguatintas y grabados realizados en 1988 que representan agrupaciones de material de vidrio con aspecto de estar hechos con otros materiales, como barro o cemento. En la década siguiente elaboró una serie de esculturas, *Formas primitivas* (Early Forms), inspiradas también en pertrechos de laboratorio y hechas con materiales diversos: arenisca, vidrio, yeso, bronce o hierro.[26] Entre los objetos representados encontramos morteros, matraces redondos, matraces aforados, tubos de ensayo, embudos, balones de tres bocas, probetas... y erlenmeyers. Entre sus esculturas de bronce destacan algunas de gran tamaño (alrededor de un metro de altura) que resultan de la fusión de un erlenmeyer, un matraz y tal vez algún otro objeto, que, contorsionados, unen sus bocas formando un amplio canal (Figura 8). Curiosamente, la perspectiva que muestra la Figura 8 nos sugiere más una bota que los adminículos de laboratorio fusionados.



Figura 8. *Early Forms* (1990), escultura en bronce de Anthony Cragg, foto reproducida con autorización del autor.

Por último, vale la pena mencionar otra famosa Colección Erlenmeyer, cuya relación con Emil Erlenmeyer es algo más lejana, ya que recibe el nombre de su nieto, Hans Erlenmeyer (1900-1967). Éste fue profesor de química inorgánica en la Universidad de Basilea y autor de unas 500 publicaciones sobre química estructural e inmunología, mayoritariamente de investigación fundamental orientada hacia la quimioterapia y la tuberculosis.[27] Junto con su segunda esposa, Marie-Louis Erlenmeyer (1912-1997), formó entre 1943 y 1960 una colección de arte prehistórico y antiguo de Grecia y Mesopotamia. Después de enviudar, Marie-Louis creó la Fundación Erlenmeyer para la protección de animales y para financiarla se realizaron diversas subastas de la *Colección Erlenmeyer* en Christie y Sotheby entre 1988 y 1998.

¿Veremos nuevas metamorfosis del erlenmeyer? En cualquier caso parece indudable que ese entrañable recipiente, escenario de las magias de la química e inspirador de objetos imprevistos, seguirá siendo una pieza fundamental en los laboratorios de todo el mundo y la representación más simple y contundente de la ciencia.

Bibliografía

[1] A. Sella, *Chem. World* **2008**.
[2] M. Faraday, *Chemical Manipulation*, John Murray, Londres, **1842**.
[3] A. J. Rocke, *Isis* **2018**, *109*, 254-275.
[4] E. Erlenmeyer, *Z. Chem. Pharm.* **1860**, *3*, 347-348.
[5] E. Erlenmeyer, *Z. Chem. Pharm.* **1860**, *3*, 21-22.
[6] W. B. Jensen, *J. Chem. Educ.* **2006**, *83*, 692-693.
[7] J. J. Griffin, *Chemical Handicraft: A Classified and Descriptive Catalogue of Chemical Apparatus*, John J. Griffin & Sons, Londres, **1866**.
[8] W. H. Perkin, *J. Chem. Soc. Trans.* **1911**, *99*, 1649-1651.
[9] A. B. Costa, in *Complete Dictionary of Scientific Biography, Vol. 4* (Ed.: C. C. Gillispie), Charles Scribner's Sons, New York, **2008**, pp. 399-400.
[10] E. Erlenmeyer, *Ann. Chem. Pharm.* **1866**, *137*, 327-359.
[11] J. Piccard, *Z. anal. Chem.* **1865**, *4*, 45-48.
[12] R. Bunsen, *Ann. Chem. Pharm.* **1868**, *148*, 269-293.
[13] W. B. Jensen, *J. Chem. Educ.* **2006**, *83*, 1283.
[14] E. Büchner, *Chem. Zeit.* **1888**, *12*, 1277.
[15] R. Walther, *Pharm. Centralhalle Deutsch.* **1898**, *39*, 550-551.
[16] C. Gerhardt, *Preisverzeichnis über chemische apparate und gerätschaften*, Bonn, **1914**.
[17] U. Gayon, G. Dupetit, *Mem. Soc. Bordeaux, Ser. 3* **1886**, *2*, 22.
[18] Llofriu, *Material y aparatos para laboratorios químicos, bacteriológicos e industriales. Catálogo general*, Establecimientos y Vidrierías Llofriu, Palma de Mallorca, **1940**.
[19] E. Metzger, J. Metzger, *Catálogo de aparatos para laboratorio*, Metzger, Barcelona, **1917**.
[20] *Illustrated Catlogue and Price-List of Chemical Apparatus*, Henry Heil Chemical Company, St. Louis, MO, **1903**.
[21] O. Pibernat, *La utilidad en el diseño*, Círculo de Bellas Artes, Madrid, **2008**.
[22] S. Alvarez, *An. Quím.* **2018**, *114*, 257-267.
[23] Schot, *Jenaer Glas für Laboratorien*, Jena, **1937**.
[24] S. Alvarez, *An. Quím.* **2018**, *114*, 19-24.
[25] J. Massó Torrents, *Rev. Bibliogr. Cat.* **1901**, *1*, 227-229.
[26] AAVV, *Cragg*, Museo Nacional Centro de Arte Reina Sofía, Madrid, **1995**.
[27] H. Bloch, en *Basler Stadtbuch*, Basilea, **1969**, pp. 37-40.



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.es
ORCID: 0000-0002-4618-4189

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 67
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2022
La revista de la Real Sociedad Española de Química

RESEÑA

Un mundo magnético. La omnipresencia de los imanes

Francesc Lloret Pastor

Quien haya tenido el privilegio de compartir una charla distendida con **Francesc Lloret Pastor**, sabe que su pasión por el magnetismo es tan natural como contagiosa. Para quienes aún no han tenido esa oportunidad, "Un mundo magnético. La omnipresencia de los imanes" ofrece una mirada al amplio conocimiento y al estilo divulgador de su autor: cercano, riguroso y profundamente didáctico.

En poco más de 200 páginas, Francesc despliega un recorrido fascinante por la historia del magnetismo, mostrando no solo su relevancia científica y tecnológica, sino también su impacto directo en el desarrollo de la vida en la Tierra y en la sociedad moderna. Lo hace combinando el rigor académico de un investigador con una narrativa fluida y accesible, que refleja tanto su vocación docente como su convicción de que la ciencia debe dialogar con la sociedad.

El libro, galardonado con el **XXIX Premio Europeo de Divulgación Científica Estudi General 2023**, no es solo un recorrido histórico o técnico; es también una defensa apasionada de la ciencia como herramienta contra la ignorancia, un posicionamiento claro frente al auge de las pseudociencias que, amparadas en esa aparente "magia" de los imanes, promueven terapias y productos sin base científica alguna basadas en el magnetismo.

La obra se estructura en cinco capítulos, cada uno de los cuales muestra un aspecto clave de esa "omnipresencia" magnética en nuestras vidas.

El capítulo 1 recorre la historia del magnetismo desde las primeras referencias en el antiguo Egipto, pasando por el descubrimiento de la brújula y la evolución de las teorías científicas, hasta llegar a las investigaciones que, ya en el siglo XX, fueron reconocidas con el Premio Nobel. En el capítulo 2, Francesc aborda el geomagnetismo y su papel esencial en la protección de la vida terrestre, así como las inversiones geomagnéticas que han marcado la historia geológica del planeta y la desaparición de muchas especies. ¿Para cuándo la próxima inversión?, se plantea en el libro. También se analiza el magnetismo de otros astros que, lejos de ser exclusivo de la Tierra, es un fenómeno universal.

El capítulo 3 introduce al lector en el campo de la magnetobiología, mostrando cómo diversos organismos, desde bacterias hasta aves migratorias, han desarrollado mecanismos biológicos basados en la detección del campo magnético terrestre. Este capítulo es especialmente revelador, al evidenciar la profunda conexión entre el magnetismo y la evolución de la vida en la Tierra. El capítulo 4 explora las aplicaciones tecnológicas del magnetismo a gran escala: desde los electroimanes superconductores empleados en resonancias magnéticas y colisionadores de partículas, hasta las tecnologías emergentes vinculadas al transporte y la producción energética.



Versión castellana
Fecha publicación: 2024
ISBN 9788411183734
Páginas: 210
Editorial: Publicacions de la Universitat de València
Edición 1



Versión catalana
Fecha publicación: 2024
ISBN 9788413586328
Páginas: 200
Editorial Bromera
Edición 1

Finalmente, el capítulo 5 nos conduce al mundo nanoscópico, donde los nanoimanes abren posibilidades revolucionarias en campos como la medicina personalizada y la computación avanzada.

Más allá de su sólida estructura y de la claridad con la que se explican conceptos complejos, lo que distingue a *Un mundo magnético* es, sin duda, la voz del autor. Quienes conocemos a "Paco" reconocemos en cada página su entusiasmo genuino, su espíritu crítico y su compromiso con una divulgación científica honesta y de calidad. Es un libro que informa, educa y, sobre todo, invita a pensar.

Esta edición original fue escrita en castellano, y posteriormente publicada en valenciano con el título "*Un món magnètic. L'omnipresència dels imans*", en una cuidada traducción a cargo de Josep Franco Martínez.

En definitiva, *Un mundo magnético* no es solo una obra de divulgación sobresaliente, es también el reflejo de una trayectoria académica y humana dedicada al conocimiento, la enseñanza y el pensamiento crítico. Y quienes hemos tenido la suerte de conversar con Francesc, sabemos que esta es, probablemente, su mejor enseñanza: el compromiso de la ciencia en desentrañar la mentira. Su publicación es una gran noticia para la divulgación científica en español, y nos deja expectantes ante futuras obras de este autor.

Mario Marcelo Pacheco Ferreiro y Rafael Ruiz García
Universitat de València

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: M. M. Pacheco, R. Ruiz. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 67, http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2022

* C-e: Mario.M.Pacheco@uv.es

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 68-72
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2030
La revista de la Real Sociedad Española de Química

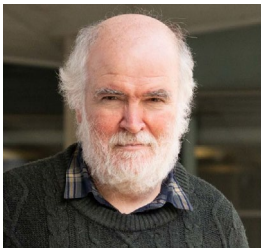
Noticias de la RSEQ

PREMIOS RSEQ

Feliu Maseras premio SCF / RSEQ 'Miguel Catalán – Paul Sabatier' 2024

El Prof. Feliu Maseras, líder de grupo en el ICIQ ha sido galardonado por la *Société Chimique de France* (SCF) con el premio *'Miguel Catalán – Paul Sabatier'*. El premio Hispano-Francés 'Miguel Catalán – Paul Sabatier' es un premio bilateral entre la RSEQ y la Sociedad de Química Francesa (SCF), que se otorga de forma alterna entre las dos sociedades cada año. Este premio reconoce la calidad científica y los fuertes lazos establecidos entre la comunidad química española y la francesa.

Feliu Maseras se doctoró en Química por la UAB 1991. Realizó una estancia postdoctoral con Keiji Morokuma en el Instituto de Ciencia Molecular (Japón) donde desarrolló el método *'Integrated Molecular Orbital Molecular Mechanics'* (IMOMM) que permite combinar eficazmente un enfoque cuántico y un enfoque clásico para describir un sistema complejo. Posteriormente trabajó dos años como *Research Associate* con Odile Eisenstein en Montpellier (Francia). También ha realizado varias estancias como *Emerson Center Visiting Fellow* en la Universidad de Emory (Atlanta, Estados Unidos). En 1998 obtuvo la plaza de profesor asociado en la UAB, donde trabajó con Agustí Lledós. En el año 2004 se movió al ICIQ como jefe de grupo. Feliu es un destacado investigador en química teórica, conocido tanto por su participación en el desarrollo de nuevos métodos de mecánica cuántica / mecánica molecular (QM/MM), como por sus aplicaciones al estudio de la reactividad catalítica. Su labor ha sido reconocida por la concesión de diversos premios incluyendo el Premio RSEQ a la Excelencia Investigadora en el área de Química Física en el 2011.


Prof. Feliu Maseras.

Daniel Maspoch es distinguido con el premio Hermanos Elhuyar Hans Goldschmidt Lecture 2024 de la GDCh / RSEQ

Nuestro compañero Daniel Maspoch ha sido galardonado con el premio Hermanos Elhuyar Hans Goldschmidt Lecture 2024 por parte de la Sociedad Alemana de Química (GDCh). Con este galardón la GDCh junto con la Real Sociedad Española de Química reconocen su brillante investigación. Como parte de este reconocimiento Daniel impartirá varias charlas en universidades alemanas.

El Prof. Maspoch se licenció en Química por la Universidad de Gerona y obtuvo su doctorado en Ciencia de Materiales en la Universidad Autónoma de Barcelona & Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona. Tras una estancia Postdoctoral en la Universidad Northwestern (Illinois, USA), regresó a Barcelona donde es Profesor de Investigación ICREA y lidera el grupo de Nanoquímica y Materiales Supramoleculares en el Instituto Catalán de Nanociencia y Nanotecnología (ICN2). Ha desarrollado una rápida y sólida carrera científica en las áreas de Ciencia de Materiales y Nanotecnología, con contribuciones científicas de muy alto nivel. Siempre ha mantenido un equilibrio entre la investigación fundamental y la aplicada, con desarrollos pioneros en el campo de los materiales reticulares porosos. Su mérito más destacable, es probablemente la capacidad para combinar una investigación básica de excelencia con la transferencia efectiva de los novedosos materiales diseñados y desarrollados en su laboratorio al tejido industrial y a la sociedad en general.


Prof. Daniel Maspoch.

En 2021 y 2022, obtuvo la prestigiosa ERC *Advanced Grant* y su segunda *ERC Proof-of-Concept Grant*, respectivamente. Asimismo, recibió una *ERC Consolidator Grant* in 2014. Este reconocimiento se une a los números galardones que ha recibido Daniel, como el Premio Rei Jaume I en 2023 en Nuevas Tecnologías o el Premio a la Excelencia Investigadora de la RSEQ en 2020. Asimismo, en 2022 fue nombrado Académico Correspondiente de la Real Academia de Ciencias de España (RAC).

© 2025 Real Sociedad Española de Química

NOTICIAS GRUPOS ESPECIALIZADOS

Ceremonia de Entrega de Premios del Grupo Especializado de Cristalografía y Crecimiento Cristalino (GE3C)

El pasado 15 de enero tuvo lugar en la Universidad de Alcalá el ya tradicional workshop del GE3C. El evento, que transcurrió en un cálido -a pesar de la temperatura- ambiente, sirvió para intercambiar resultados científicos, discutir sobre nuevas instalaciones científicas y sobre recursos internacionales, entre los cristalógrafos españoles.

Durante la jornada, además de las presentaciones científicas, se celebró la Asamblea General del GE3C. En el marco del evento se procedió a la entrega de los premios anuales del GE3C, reconocimientos que destacan la trayectoria y el talento emergente en el campo:



Asistentes a la ceremonia de entrega de los premios del GE3C.

- **Insignia de Oro del GE3C**: Otorgada al Dr. Juan Rodríguez Carvajal, en reconocimiento a su destacada labor en el ámbito de la cristalografía.
- **Premio Xavier Solans-Bruker**: Concedido al Dr. Miguel Daniel Mozo, en reconocimiento al mejor trabajo científico del año.
- **Premio Sagrario Martínez Carrera-Anton Paar**: Entregado a la Dra. Lourdes Infantes San Mateo, en reconocimiento a su trayectoria científica.
- **Premio Catalina Ruiz Pérez-Bruker**: Otorgado al Dr. Javier Acebedo Martínez, destinado a reconocer la mejor tesis doctoral.

Reunión anual de la Red Organometallic Chemistry for Sustainable Solutions (OASIS)

Los días 16 y 17 de enero de este año se celebró en Zaragoza la reunión anual de la Red de Investigación *Organometallic Chemistry for Sustainable Solutions* (OASIS). Esta Red constituye la mayor agrupación de investigadores en nuestro país de este campo de la química, aglutinando ya a cuarenta grupos de investigación. Tras su lanzamiento a finales de 2023, en esta reunión se han presentado ya resultados derivados de las colaboraciones existentes entre dichos grupos. A pesar de haber transcurrido poco más de un año desde su comienzo, se ha superado ya la cincuentena de interacciones bilaterales (y en algunos casos, trilaterales), con resultados positivos que se espera cristalicen en forma de contribuciones científicas.



Asistentes a la reunión anual de la Red OASIS en Zaragoza en enero del 2025.

Dentro de las actividades de la Red se ha promovido la organización de un simposio en el marco de la XL Reunión Bienal de la RSEQ, que tendrá lugar este año en Bilbao. Bajo el mismo nombre que la Red, el simposio S2 *Organometallic Chemistry for Sustainable Solutions - OASIS* cuenta con Karen Goldberg (U. Penn.), Martin Albrecht (U. Bern), Nathalie Fey (U. Bristol), Rebecca Melen (U. Cardiff), Christophe Coperet (ETH Zurich) y Mattias Beller (Leibniz-Institut für Katalyse) como conferenciantes invitados. El simposio se completa con 18 comunicaciones orales, otras 18 comunicaciones de tipo flash y una sesión de posters, todas ellas a elegir de entre quienes soliciten la participación en el mismo.

Ana C. Albéniz, Universidad de Valladolid.
Pedro J. Pérez, Universidad de Huelva.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://10.62534/rseq.aq.2030

OTRAS NOTICIAS

Los profesores Luis Bañares y Jesús Jiménez Barbero Premios Humbolt de Investigación Química

La Fundación Alexander von Humboldt, con más de 50 años de historia, fomenta la cooperación académica internacional y mantiene una red global de colaboración científica. Cada año, la Fundación Alexander von Humboldt otorga hasta 100 Premios Humboldt de Investigación Científica en reconocimiento a la labor de científicos y académicos, sin tener en cuenta su disciplina académica. Dicho galardón, se otorga a investigadores cuyos descubrimientos fundamentales han tenido un impacto significativo en su disciplina y de quienes se espera que continúen produciendo logros académicos de vanguardia en el futuro. Además, los condecorados tienen la oportunidad de realizar una estancia de investigación en una institución en Alemania, para realizar proyectos de investigación en colaboración con especialistas del país.

El Prof. Luis Bañares es catedrático del departamento de Química Física de la Universidad Complutense de Madrid (UCM); director del Centro de Láseres Ultrarrápidos (CLUR) de la misma Universidad, investigador asociado en el Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA-Nanociencia) y miembro de la RSEQ. Este galardón reconoce su destacada trayectoria en dinámica de reacciones, espectroscopia láser y ciencia ultrarrápida.



Prof. Luis Bañares.



Prof. Jesús Jiménez-Barbero.

El Dr. Jesús Jiménez-Barbero, es director científico y Profesor de Investigación Ikerbasque en CIC bioGUNE. Es reconocido internacionalmente por su investigación en el análisis conformacional de carbohidratos y sus aplicaciones en la biología química y la biomedicina. Este galardón reconoce su sobresaliente contribución en química bioorgánica, la química biológica y la biofísica.

Este premio se suma a otras importantes distinciones recibidas por el Prof. Jiménez-Barbero, que incluyen el Premio Nacional Enrique Moles de Investigación en Química y Tecnologías Químicas en 2023 y la Medalla de la Real Sociedad Española de Química en 2018.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

El Prof. Antonio M. Echavarren ha sido nombrado Doctor 'Honoris Causa' por la Universidad de Huelva

El Prof. Antonio M. Echavarren Pablos, Presidente de la RSEQ, ha sido nombrado Doctor 'Honoris Causa' por la Universidad de Huelva. El acto académico celebrado el pasado día 23 de enero de 2025 en el Aula de Grados de la Facultad de Ciencias Experimentales del campus El Carmen, estuvo presidido por la rectora Dra. María Antonia Peña y contó con la presencia de miembros de la comunidad universitaria y de la sociedad en general.



El Prof. Antonio M. Echavarren, acompañado por la Dra. María Antonia Peña, rectora de la UHU, durante la ceremonia.

Durante el emotivo acto, su padrino, el catedrático de Química de la UHU Pedro J. Pérez, pronunció el discurso de *laudatio* del doctorando, destacando las contribuciones pioneras del Prof. Echavarren en el desarrollo de la Química Orgánica y los numerosos galardones que ha recibido por ello. Declaró que "el Prof. Echavarren ha abierto ha abierto nuevas fronteras en la Química Orgánica, aportando soluciones innovadoras que inspiran tanto a la comunidad científica como a la industria". Así mismo, la rectora de la UHU, María Antonia Peña, reconoció que su mayor logro "no ha sido haber explorado la última frontera en el uso del oro o haber hecho descubrimientos sustantivos de nuevos materiales o productos, sino haber dado respaldo a buenos estudiantes, para convertirlos en personal investigador de primer nivel, personal bien preparado capaz de volar por sí mismo y de dar soluciones, con las herramientas que proporciona la Química, a otros tantos grandes problemas de la humanidad".

Antonio M. Echavarren es Doctor en Química por la Universidad Autónoma de Madrid, director científico del programa Severo Ochoa del ICIQ, profesor de investigación del CSIC y líder de grupo del ICIQ. Su trayectoria científica ha sido reconocida por un gran número de galardones entre los que se incluyen, la Medalla de Oro de la RSEQ, el premio *Arthur C Cope Scholar*, el Premio Nacional de Investigación Enrique Moles en Ciencia y Tecnología, el premio Rei Jaume I en Investigación Básica y el Premio Pedler de la *Royal Society of Chemistry*. Ha recibido, además, dos *ERC Advanced Grants*.



Asistentes al acto académico de nombramiento de Doctor 'Honoris Causa' del Prof. Antonio M. Echavarren.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://10.62534/rseq.aq.2030

Prof. Luis Oro galardonado con la Medalla Echegaray

Nuestro compañero Luis Oro, ha sido galardonado por su trayectoria investigadora por la Real Academia de Ciencias con la Medalla Echegaray, el galardón científico más antiguo que se concede en España. De hecho, este galardón fue instituido por iniciativa de Santiago Ramón y Cajal en 1905, tras la concesión del Premio Nobel a José Echegaray. Lo concede Real Academia de Ciencias cada dos años a un investigador que tenga una trayectoria sobresaliente.

Con este premio que quiere reconocer al Prof. Luis Oro sus aportaciones científicas de primer nivel a la comunidad científica internacional en el campo de la química organometálica y catálisis homogénea, "así como su contribución al desarrollo de la ciencia en España, tanto desde los resultados de su grupo de investigación como desde su gestión en puestos de gran responsabilidad en el sistema de ciencia y tecnología de nuestro país". Así pues, fue director general de Investigación Científica y Técnica del Ministerio de Educación y Ciencia de España y secretario general del Plan Nacional de Investigación Científica y Desarrollo Tecnológico. Así mismo, fue presidente de nuestra sociedad entre 2001 y 2005, y presidente de la EuChemS.



Prof. Luis Oro.

Estudió química en la Universidad de Zaragoza dende realizó su doctorado. Posteriormente realizó una estancia postdoctoral en la Universidad de Cambridge. Tras ocupar varias posiciones académicas en las universidades de Zaragoza, Complutense de Madrid y Santander, en 1982 volvió a la Universidad de Zaragoza como catedrático de Química Inorgánica. Ha sido profesor visitante invitado en varias universidades extranjeras. Sus contribuciones científicas se resumen en más de 500 artículos científicos y es uno de los químicos españoles más citados. Luis Oro recibió la noticia en su despacho de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza donde, como profesor emérito, participa activamente en diversos consejos y comités científicos nacionales e internacionales. Este galardón se une al gran número de premios y reconocimientos nacionales e internacionales recibidos por Luis Oro a lo largo de su prolífica carrera como el Premio Humboldt, Elhuyar-Goldsmidt, RSC Lord Lewis Prize, Premio Rey Jaime I, Premio a la investigación y medalla de la RSEQ, Premio Nacional de Investigación «Enrique Moles» en ciencia y tecnología químicas, entre otros.

Agustín García Asuero, Medalla de Oro de la Real Academia Nacional de Farmacia

El prof. Agustín García Asuero, Doctor en Ciencias Químicas por la Universidad de Sevilla y Catedrático de Química Analítica en la Universidad de Sevilla desde 1996, ha recibido con la Medalla de Oro de la Real Academia Nacional de Farmacia (RANF) de España el pasado 26 de enero. Al recibir el galardón nuestro compañero señalaba «No creo que haya nada equiparable a este galardón para un miembro de la Facultad de Farmacia. Estoy muy contento, feliz y emocionado». La entrega ha sido en la apertura del Curso Académico. «Ha revestido para mí una significación muy especial, dada la importancia de esta distinción y la solemnidad del Acto», afirmaba nuestro compañero. Asimismo, ha agradecido el apoyo de todas las personas, «que han hecho conmigo el camino durante 50 años, que me ha llevado a Profesor Emérito, y en los que me he desenvuelto en los ámbitos de la enseñanza, investigación, gestión y gobierno, con plena dedicación y entrega, contando con el necesario apoyo de la familia».



Prof. Agustín García Asuero.

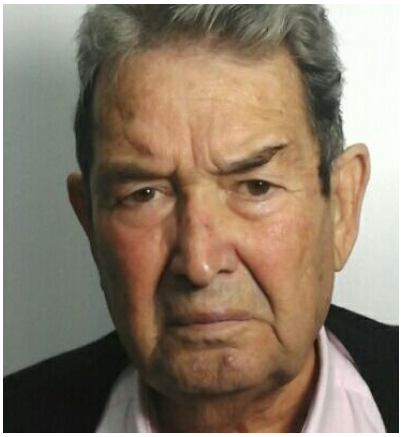
Su labor investigadora se desarrolla en quimiometría, antioxidantes naturales (antocianinas), historia de la ciencia y aspectos metodológicos de la Química Analítica. Entre los premios y distinciones recibidas destacan la Carabela Pinta en su categoría de oro del Colegio Oficial de Farmacéuticos (COF) de Huelva, H de Oro del COF de Málaga, Colaborador de Honor de la Fundación Farmacéutica Avenzoar (COF de Sevilla), o la Medalla Institucional de la Facultad de Farmacia de la Universidad Complutense de Madrid.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (1), 73
http://doi.org/10.62534/rseq.aq.2028
La revista de la Real Sociedad Española de Química

OBITUARIO

In memoriam Prof. Julio González Urones



Prof. Julio González Urones.

La sección territorial de Salamanca de la RSEQ lamenta profundamente el reciente fallecimiento del Prof. Julio González Urones, Catedrático jubilado de la Universidad Salamanca.

Julio G. Urones se doctoró en la Universidad de Salamanca en 1971, siendo Profesor Adjunto, Titular y Catedrático de Química Orgánica desde 1987.

Durante su dilatada trayectoria publicó más de 200 trabajos científicos en las principales revistas internacionales de Química Orgánica y dirigió más de 60 Tesis Doctorales. Constituyó su grupo de investigación sobre aislamiento y transformación de productos naturales, consolidando el estudio de los mismos en la Universidad de Salamanca. El Prof. Urones será recordado por sus alumnos y discípulos como un gran maestro en el campo de la Química Orgánica y como persona por su bondad, generosidad y sobre todo honestidad.

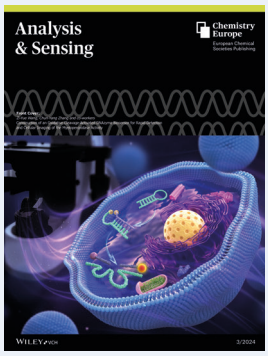
Desde la ST de Salamanca queremos expresar nuestro más sentido pésame a su familia, colaboradores y amigos.

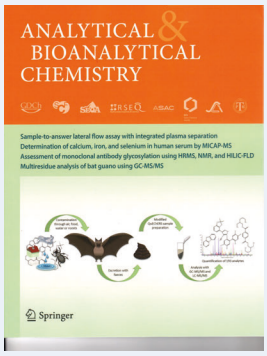
Descanse en paz.

David Díez Martín
Presidente S.T. Salamanca

© 2025 Real Sociedad Española de Química

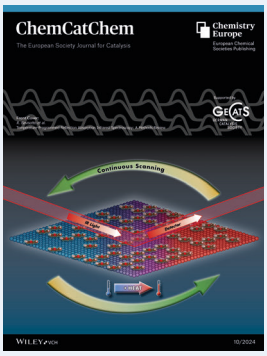
Revistas patrocinadas por la Real Sociedad Española de Química





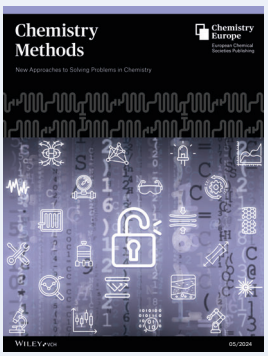






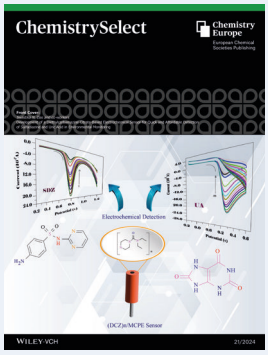


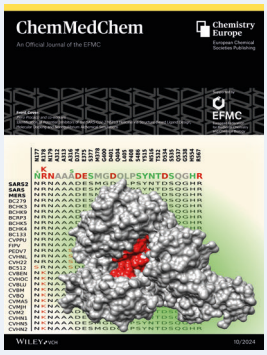


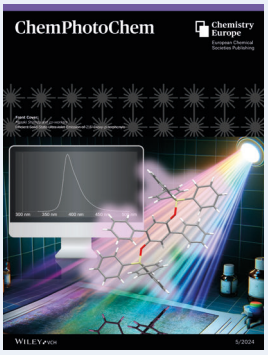


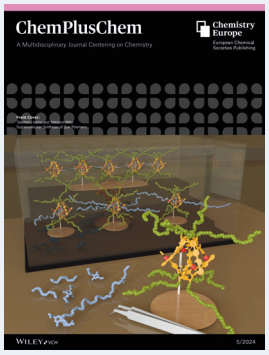






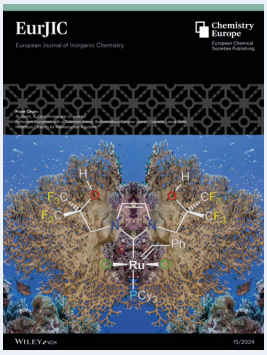


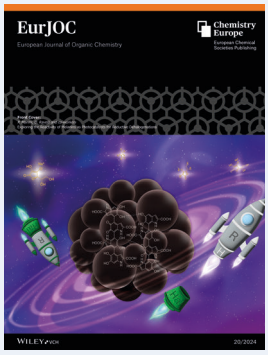














MERCK

New Chemistry Products for **Drug Discovery & Development**

Issue 1 2023



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

Sigma-Aldrich®

Lab & Production Materials