

# ANALES DE QUÍMICA

Revista de la Real Sociedad Española de Química

Segunda época

www.rseq.org/anales

Volumen 109

Número 1

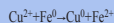
Enero-Marzo 2013

Páginas 1-84

## CENCIA CON ESTROPAJO

QUÍMICA  
CON  
ESTROPAJO

¿Qué es un precipitado?



Descubre todos  
los colores  
del estropajo

IONES DE HIERRO (III)  
CON ÁCIDO SALICÍLICO  
FORMA EL COMPLEJO  
DE SALICILATO

COMPLEJO  
HEXAFLUORURO  
DE HIERRO (III):  
[FeF<sub>6</sub>]<sup>3-</sup>

COMPLEJO ENTRE LOS  
COMPONENTES FENÓLICOS  
DEL TOMILLO Y  
EL HIERRO (III)

FOSFATO DE HIERRO (III)

COMPLEJO ENTRE LOS  
COMPONENTES FENÓLICOS  
DEL COMINO Y  
EL HIERRO (III)

EL ESTROPAJO  
NO SOLO SIRVE PARA LIMPIAR

FÍSICA  
CON  
ESTROPAJO

¿Sabes qué es  
el Efecto Joule?

Aprende a  
hacer tus  
propios fuegos  
artificiales

¿Alguna vez  
has visto el campo  
magnético de un  
imán?

Construye tu propia  
fuente de energía

Diseño: Estefanía García L.  
Ilustración: P. Jesús Chicon L.



IES MANUEL ROMERO  
Málaga, Prologo, Socia,  
Estefanía, Osorio, Lucía,  
Lucía, Hoyos, Rodríguez

Síguenos en Facebook y Twitter

ISSN 1575-3417



INVESTIGACIÓN  
M. Swart et al.  
Fullerenos y química  
computacional  
I. Tellitu  
Pirrolidina y yodo hipervalente

QUÍMICA Y MEDIO AMBIENTE  
ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA  
DIVULGACIÓN DE LA QUÍMICA  
RECORDANDO A CIENTÍFICOS ESPAÑOLES  
LA QUÍMICA EN LA WEB



## Entidades colaboradoras



## Socios Corporativos

- Aldrich Química
- Bruker
- Cepsa
- Feique
- Janssen Cilag
- Lilly España
- Sugelabor

## Real Sociedad Española de Química ♦ Junta de Gobierno

### Presidente

Jesús Jiménez Barbero

### Vicepresidentes

Agustí Lledós Falcó  
José Manuel Pingarrón Carrazón

### Secretario General

Pedro J. Pérez Romero

### Tesorera

Paloma Yáñez-Sedeño Orive

### Editor General

Bernardo Herradón García

### Vocales

Valentín García Baonza  
Pilar Gómez Sal  
Pilar Goya Laza  
Emilia Iglesias Martínez  
Sonsoles Martín Santamaría  
Miguel Ángel Miranda Alonso  
M<sup>a</sup> Teresa Pineda Rodríguez  
Mariona Sodupe i Roure

### Ex-Presidente

Nazario Martín León

### Presidentes de Secciones

#### Territoriales

**Alicante**  
Miguel Yus Astiz

**Aragón**  
Concepción Gimeno Floría

**Asturias**  
Marta Elena Díaz García

**Cataluña**  
Antonio Echavarren Pablos

**Castilla-La Mancha**  
Julián Rodríguez López

**Extremadura**  
Vacante

**Galicia**  
Carlos Saá Rodríguez

**Granada**  
Juan Manuel Salas Peregrín

**Islas Baleares**  
José Manuel Saá Rodríguez

**Islas Canarias**  
Fernando García Tellado

**La Rioja**  
Pedro J. Campos García

**Madrid**  
Juan José Vaquero López

**Málaga**  
Juan Teodomiro López Navarrete

**Murcia**  
Alberto Requena Rodríguez

**Navarra**  
Vacante

**País Vasco**  
Pascual Román Polo

**Salamanca**  
Miguel Ángel Bañares Muñoz

**Sevilla**  
Rosario Fernández Fernández

**Valencia**  
Gregorio Asensio Aguilar

**Valladolid**  
Juan A. Casares González

### Presidentes de Grupos Especializados

**Adsorción** Jose Rubén García Menéndez

**Calorimetría y Análisis Térmico** Francisco Fraga López

**Coloides e Interfases** Luis M. Liz Marzán

**Cristalografía y Crecimiento Cristalino** Fernando J. Lahoz

**Didáctica e Historia** Manuela Martín Sánchez

**Electroquímica** Vicente Montiel Leguey

**Física Atómica y Molecular** Luis Bañares Morcillo

**Física del Estado Sólido** Luis Viña Liste

**Fotoquímica** José M<sup>a</sup> Álvarez Pez

**Hidratos de Carbono** Francisco Santoyo González

**Historia de la Ciencia** Pascual Román Polo

**Jóvenes Investigadores Químicos** Begoña Milián Medina

**Nanociencia y Materiales Moleculares** Ángela Sastre Santos

**Polímeros** Julio San Román Del Barrio

**Química Agrícola** M<sup>a</sup> Luisa González San José

**Química Biológica** José Luis Mascareñas Cid

**Química del Estado Sólido** Regino Sáez Puche

**Química Inorgánica** Jaime Casabó Gisbert

**Química Orgánica** Joan Bosch Cartes

**Química Organometálica** Pedro J. Pérez Romero

**Química Productos Naturales** Isidro González Collado

**Reología** Antonio Santa María Ibarburu

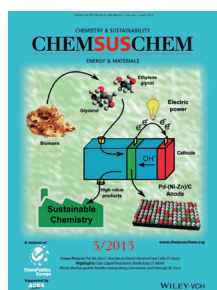
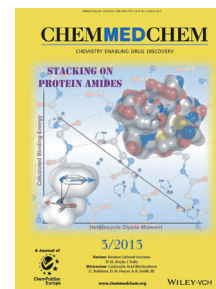
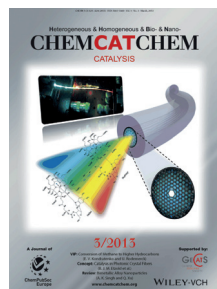
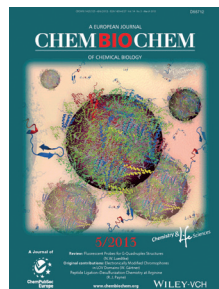
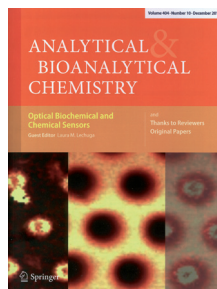
**Resonancia Magnética Nuclear** Óscar Millet Aguilar-Galindo

**Termodinámica** Jaime Amorós Arnau

### Representantes

ANQUE Carlos Negro Álvarez  
RSEF Bianchi Méndez Martín

## Revistas patrocinadas por la Real Sociedad Española de Química





Incluso los materiales más simples y cotidianos, como el estropajo, son instrumentos útiles que permiten realizar experimentos con los que enseñar Química, como lo prueba el artículo de M. L. Prolongo-Sarria publicado en esta edición de Anales de Química.

### ANALES de la Real Sociedad Española de Química

#### Editor General

Bernardo Herradón  
Instituto de Química Orgánica General

#### Editora Adjunta

Sonsoles Martín-Santamaría  
Universidad CEU San Pablo

#### Editora Asociada

Yolanda Pérez-Cortés  
Universidad Rey Juan Carlos

#### Comité Editorial

Manuel Blázquez  
Universidad de Córdoba  
Pedro J. Campos  
Universidad de La Rioja  
Juan A. Casares  
Universidad de Valladolid  
Miquel Durán  
Universidad de Girona  
Valentín García-Baonza  
Universidad Complutense de Madrid  
Javier García-Martínez  
Universidad de Alicante  
Juan José Iruín  
Universidad del País Vasco, San Sebastián  
Pedro J. Pérez  
Universidad de Huelva  
Gabriel Pinto  
Universidad Politécnica de Madrid  
Mario Redondo  
Inspector de Educación en la zona Sur Madrid  
Pascual Román  
Universidad del País Vasco, Bilbao  
Paloma Yáñez-Sedeño  
Universidad Complutense de Madrid

#### Secretaría Administrativa

Patricia Yáñez-Sedeño  
Real Sociedad Española de Química

#### Facultad de Ciencias Químicas Universidad Complutense

Ciudad Universitaria  
28040 Madrid  
Tel (+34) 913 944 356  
Fax (+34) 915 433 879  
[www.rseq.org](http://www.rseq.org)

#### Diseño, Realización y Publicidad

**ADI** SERVICIOS EDITORIALES  
<http://www.auladoc.com>

Depósito Legal: M-232-1958  
ISSN: 1575-3417

## Anales de la Real Sociedad de Química Volumen 109 ♦ Número 1 ♦ Segunda época Enero-Marzo 2013

### Sumario

<b>Editorial</b> .....	4
<i>Bernardo Herradón</i>	
<b>Investigación Química</b>	
Explorando nuevas aplicaciones del reactivo de yodo hipervalente PIFA [bis(trifluoroacetoxi)yodobenceno] en la construcción de heterociclos pirrolidínicos. ....	5
<i>Imanol Tellitu</i>	
Regioselectividad en fullerenos, una visión computacional. ....	11
<i>Marcel Swart, Silvia Osuna, Marc Garcia-Borràs, Josep M. Luis y Miquel Solà</i>	
<b>Química y Medio Ambiente</b>	
Almacenamiento geológico de CO <sub>2</sub> : una solución para la mitigación del cambio climático ...	20
<i>Cecilia Galarza</i>	
<b>Recordando a científicos españoles</b>	
Contribución de Antonio Casares Rodríguez al desarrollo de la química en España en el siglo XIX .....	27
<i>Ramón Cid</i>	
María Josefa Molera: cinética, fotoquímica y cromatografía en la España de 1940 a 1980 ....	31
<i>A. Ulises Acuña y José M<sup>o</sup> Santiuste</i>	
<b>Enseñanza de la Química</b>	
¿Tiene(n) unidades la(s) constante(s) de equilibrio? .....	34
<i>Ana Quílez-Díaz y Juan Quílez-Pardo</i>	
<b>Laboratorio de Química</b>	
Introducción a la química de los polímeros biodegradables: una experiencia para alumnos de segundo ciclo de la ESO y Bachillerato .....	38
<i>Francisco G. Calvo-Flores y Joaquín Isac</i>	
Trabajos experimentales de química y de física con un estropajo de acero .....	45
<i>María Luisa Prolongo-Sarria</i>	
<b>Alrededor de la Química</b>	
<b>Divulgación de la Química:</b>	
Química y energía: una unión indisoluble.....	53
<i>Valentín González</i>	
Celebrando en Málaga el 2011AIQ.....	59
<i>Teresa Lupión, Carlos Criado, Juan T. López-Navarrete y J. Joaquín Quirante</i>	
La Química en la WEB .....	64
<b>Noticias de la RSEQ</b> .....	66
<b>Noticias Científicas Relevantes</b> .....	77
<b>Normas de publicación</b> .....	81

## Editorial

Hace un año que asumí la dirección de *Anales de Química*. En colaboración con los miembros del Comité Editorial, hemos ido introduciendo cambios en la revista. Siempre hemos tenido en cuenta que *Anales de Química* es uno de los estandartes de la RSEQ y un vehículo de comunicación entre los miembros de nuestra sociedad.

Cuando se me asignó esta tarea, el objetivo era aumentar la visibilidad de nuestra sociedad entre colectivos que no nos conocían; entre ellos, químicos trabajando en la industria, el profesorado preuniversitario y sus alumnos, y un sector de la población que no siendo químicos, está interesados en la ciencia. La motivación de los cambios introducidos en *Anales de Química* ha sido dar a conocer las muchas y diversas facetas de la química de manera asequible a la sociedad.

No olvidamos que la RSEQ representa a un gran colectivo de químicos que investigan activamente. En la sección **Investigación Química** se explica algunas de las investigaciones que se están realizando en España. En esta edición tenemos dos magníficos artículos en áreas tan distintas como la metodología sintética y la química computacional aplicada al fullereno. En esta sección hemos publicado artículos en campos muy diversos, muchos de ellos interdisciplinares, desde la electroquímica aplicada al almacenamiento de energía a la química biológica. La sección **Investigación Química**, en cierto modo, refleja la calidad de la investigación química española, que se ve refrendada por hechos como la buena posición que ocupa en el ranking de producción científica mundial o por la reciente consecución de tres proyectos *Advanced Grants* del *European Research Council*, uno de los programas más competitivos a nivel mundial, de lo que nos hacemos eco en la sección **Noticias de la RSEQ**. Esta última sección tiene como objetivo difundir las actividades y logros de la RSEQ, de sus Grupos Especializados, sus Secciones Territoriales, y de sus socios. La difusión de estas actividades se completa con los anuncios de diversos eventos que se publican en *Anales de Química*. Para comunicar esta información y actividades contamos con otros instrumentos que proporcionan más rapidez en la difusión: *Boletín de la RSEQ* (<http://www.rseq.org/boletines>), la página web de la RSEQ (<http://www.rseq.org/>) y las redes sociales (Facebook, Twitter y LinkedIn) de la RSEQ. Animamos a todos los socios a distribuir información interesante a través de estos canales.

Otros químicos están interesados en la investigación en áreas multidisciplinares, como la biomedicina, la ciencia

de los materiales o el medio ambiente. Este último aspecto está relacionado con la química; no sólo en su lado negativo, sino también en el papel que la química puede hacer por resolver los problemas medioambientales. Es por ello que en *Anales de Química* mantene-

mos una sección sobre **Química y Medio Ambiente**. En este número publicamos un artículo muy interesante sobre el problema de la captura y almacenamiento de CO<sub>2</sub>.

También mantenemos secciones clásicas en *Anales de Química*, como son **Enseñanza de la Química y Laboratorio de Química**; que pretendemos que tengan carácter divulgativo y que sean especialmente útiles para la realización de prácticas a nivel preuniversitario y para demostraciones en ferias de la ciencia. En esta edición de *Anales de Química* se publican tres artículos (uno teórico y dos prácticos) que pueden usarse para la enseñanza.

Pensamos que la **Historia de la Química** es un área de interés para muchos químicos y una herramienta útil para difundir conceptos de química. Por eso, hemos intentado potenciar esta sección y en este número comenzamos una nueva subsección **Recordando a Científicos Españoles**, con la que pretendemos homenajear a científicos resaltando su contribución al desarrollo de la química. En esta edición publicamos dos breves biografías científicas de M<sup>a</sup> Josefa Molera y de Antonio Casares.

Por otro lado, a través de secciones como **Divulgación de la Química**, **La Química en la Web** y **Noticias Científicas Relevantes** pretendemos acercar la química a la sociedad de manera divulgativa.

También en 2012 empezamos secciones nuevas que esporádicamente han acogido artículos. Estas secciones son **Cartas al Editor**, **Política Científica**, y **Químicos y Sociedad**. Se invita a la comunidad científica española a contribuir con artículos, comentarios y opiniones. En las cartas se pretende intercambiar opiniones sobre aspectos diversos que afectan a la ciencia. Los otros dos temas se han tratado frecuentemente en las secciones **Noticias de la RSEQ** y **la Química en la Web**.

Espero que disfrutes de la lectura de *Anales de Química*.



# Explorando nuevas aplicaciones del reactivo de yodo hipervalente PIFA [*bis*(trifluoroacetoxi)yodobenceno] en la construcción de heterociclos pirrolidínicos

Imanol Tellitu

**Resumen:** En este artículo mostraremos cómo aprovechar el poder oxidante del PIFA –uno de los reactivos de yodo hipervalente más característicos– en la construcción de heterociclos pirrolidínicos. Su acción sobre amidas estratégicamente seleccionadas genera un intermedio *N*-acilnitrenio cuya alta electrofilia facilita su unión intramolecular a grupos insaturados presentes en el sustrato (olefinas y alquinos) para crear la nueva unión C–N. La versatilidad respecto al compuesto final al que accedemos, y el hecho de que la reacción de amidación intramolecular proceda en ausencia de metales, hace de este procedimiento una aproximación ventajosa para la preparación de este tipo de heterociclo nitrogenado.

**Palabras clave:** Heterociclos, alcaloides, yodo hipervalente, PIFA, síntesis.

**Abstract:** In this paper the benefits of the oxidative properties of PIFA –one of the most generally employed hypervalent iodine reagents– oriented to the preparation of a number of pyrrolidine heterocycles from properly substituted amides will be disclosed. The intramolecular reaction of the resultant electrophilic *N*-acylnitrenium intermediate with an olefin or alkyne fragment will facilitate the formation of the required C–N connection. The absence of any metal source in the I(III)-mediated olefin- or alkyne- intramolecular amidation step, and the structural versatility of the final heterocycles that are prepared, feature the present methodology.

**Keywords:** Heterocycles, alkaloids, hypervalent iodine, PIFA, synthesis.

## Introducción

El estudio de los productos naturales continúa y continuará siendo una fuente fructífera de obtención de fármacos si se realiza conjuntamente con métodos de cribado basados en procedimientos farmacológicos y bioquímicos modernos encuadrados en una aproximación multidisciplinar que abarque paralelamente las metodologías de síntesis total y síntesis combinatoria.<sup>1</sup> En el actual *renacimiento* de los productos naturales como puerta de acceso al descubrimiento de nuevos fármacos, la participación del químico orgánico tiene una presencia fundamental en tres aspectos que, aunque diferenciados, se interrelacionan fuertemente: (i) el propio aislamiento e identificación del compuesto bajo estudio; (ii) la síntesis del compuesto en cantidades que serían difíciles de obtener a partir únicamente de la fuente natural; y (iii) la preparación de análogos estructurales que vean potenciada la acción buscada,

y aminorada o anulada la indeseada. Mutuamente, el beneficio que al químico orgánico le reporta estas tareas se halla en el hecho de que el desarrollo de estudios sintéticos sobre una estructura base que muestre una reconocida actividad farmacológica o biológica constituye una aproximación recurrente para desarrollar nuevas metodologías sintéticas.

Históricamente, los productos naturales han sido la fuente más antigua para la obtención de nuevas medicinas. La propia evolución a lo largo de millones de años ha posibilitado la formación de un ingente número de estos compuestos. Algunos de ellos, con potentes actividades biológicas, hoy nos sirven como “*chemical leads*” que son manipulados por los químicos para proporcionar fármacos con una acción específica. Paralelamente, y reconociendo todo su potencial, los científicos han recurrido igualmente al estudio de remedios tradicionales que se han venido usando durante siglos esperando encontrar en sus constituyentes la razón de su actividad. De entre ellos, uno de los bloques más importante se refiere, sin duda, a los alcaloides.

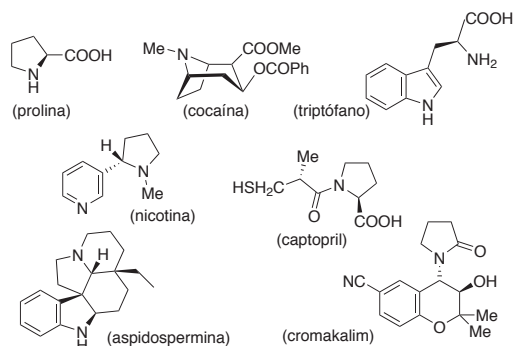
Una de las líneas de trabajo que nuestro grupo de investigación ha venido desarrollando en los últimos años se basa precisamente en la búsqueda de nuevas vías de obtención de heterociclos nitrogenados. En particular, hemos fijado nuestra atención en estructuras que porten el anillo pirrolidínico, un sistema que, aislado o fusionado con otros anillos, y presente en diferentes grados de oxidación, puede encontrarse en un buen número de alcaloides y de productos sintéticos de interés. La Figura 1 muestra ejemplos de ellos, tales como los aminoácidos *prolina* y *triptófano*; el alcaloide tropánico *cocaína*, estructura que se ha empleado para la preparación de otros anestésicos locales con efectos adversos disminuidos; el *captopril*, un inhibidor de la enzima convertidora de angiotensina; la *nicotina*, el agente que provoca la adicción al tabaco; la *aspidospermina* que, entre otras actividades biológicas, actúa como estimulante respiratorio; o el agente anti-hipertensivo, *cromakalim*.



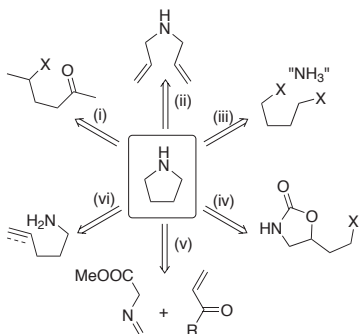
I. Tellitu

Departamento de Química Orgánica II,  
Facultad de Ciencia y Tecnología  
Universidad del País Vasco-Euskal Herriko Unibertsitatea (UPV/EHU)  
48940-Leioa (Bizkaia)  
C-e: [imanol.tellitu@ehu.es](mailto:imanol.tellitu@ehu.es)

Recibido: 09/02/2013. Aceptado: 04/03/2013.



**Figura 1.** Ejemplos de compuestos naturales o sintéticos que incluyen el fragmento pirrolidínico en su estructura.

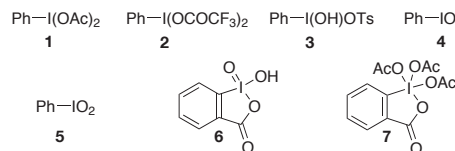


**Esquema 1.** Selección de rutas de acceso al esqueleto pirrolidínico.

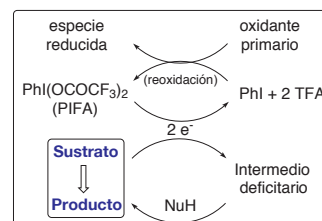
El Esquema 1 resume diferentes rutas de acceso al esqueleto pirrolidínico que nos ofrece la bibliografía consultada. Así, (i) la ciclación reductiva de cetonas  $\gamma$ -nitrogenadas ( $X=NHR$ ,  $N_3$ ,  $NO_2$ ),<sup>2</sup> (ii) la metátesis de olefinas con cierre de anillo,<sup>3</sup> (iii) el doble desplazamiento con reactivos nucleófilos nitrogenados,<sup>4</sup> (iv) la previa preparación de oxazolidin-2-onas,<sup>5</sup> (v) la cicloadición [3+2] de derivados de  $\alpha$ -aminoácidos con olefinas,<sup>6</sup> y (vi) la hidroaminación intramolecular de olefinas y alquinos catalizada por metales,<sup>7</sup> abarcan la práctica totalidad de procedimientos habitualmente empleados con tal fin. Esta descripción, que pretende ser más ilustrativa que exhaustiva, no incluye, en cualquier caso, la aminación intramolecular de olefinas o de alquinos promovida en ausencia de metales como vía de entrada a la obtención del esqueleto pirrolidínico. Éste es, precisamente, el reto que nos planteamos hace unos años y que venimos desarrollando en la actualidad y, así, en los párrafos siguientes se desglosará cómo determinados reactivos de yodo trivalente nos han facilitado la construcción del heterociclo deseado a partir tanto de alquenil- como de alquinil-amidas sin la participación de ninguna fuente metálica.

## Los reactivos de yodo hipervalente

En las dos últimas décadas la química de los reactivos de yodo hipervalente (RYH)<sup>8</sup> se ha visto ampliamente desarrollada no sólo por la gran variedad de transformaciones sintéticas que permiten llevar a cabo, sino también por las enormes ventajas que presentan frente a otros reactivos clásicos con actividad similar.<sup>9</sup> Así pues, cabe citar su alta disponibilidad (muchos de ellos son comerciales o de fácil preparación), las



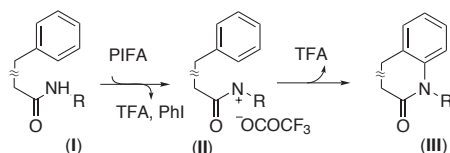
**Figura 2.** Ejemplos de RYH. (Diacetoxy)yodobenceno (PIDA, **1**), [bis(trifluoroacetoxi)yodo]benceno (PIFA, **2**), [hidroxi(tosiloxi)yodo]benceno (HTIB, sal de Koser, **3**), yodosilbenzeno (**4**), yodilbenceno (**5**), ácido yodoxibenzoico (IBX, **6**), y peryodinano de Dess-Martin (DMP, **7**).



**Esquema 2.** Visión mecanística simplificada de conjunto para una transformación promovida por el reactivo trivalente PIFA.

condiciones suaves de reacción que precisan, su estabilidad frente al oxígeno y a la humedad, además de su baja toxicidad y la inocuidad que presenta el yodobenceno, subproducto más habitual de estas reacciones. De hecho, el uso de estos reactivos resulta ser una alternativa económica y sumamente eficaz que hoy en día posibilita obviar el uso de metales tóxicos como el Pb(IV), Tl(III), o Hg(II) en procesos industriales, de lo que se beneficiarían especialmente los campos agroquímico y farmacéutico. La extensa y variada reactividad que presentan los RYH se debe, principalmente, al fuerte carácter electrófilo del átomo de yodo en dichas especies<sup>10</sup> y a la excelente capacidad del yodobenceno para actuar como grupo saliente.<sup>11</sup> La Figura 2 muestra ejemplos de este tipo de reactivos, tanto de yodo trivalente (**1-4**) como de yodo pentavalente (**5-7**).

El modo de acción de este conjunto de reactivos, principalmente basado en su capacidad oxidante, puede ilustrarse como se representa en el Esquema 2 referido al comportamiento del PIFA, uno de los representantes más activos de esta familia de RYH y con el que, principalmente, estamos desarrollando nuestras tareas investigadoras. Así, cuando enfrentamos este reactivo a un sustrato fácilmente oxidable, evoluciona reduciéndose a PhI y dejando atrás un intermedio deficitario que será capaz de reaccionar inter- o intra-molecularmente con un segundo componente nucleófilo (NuH). Habitualmente el ácido trifluoroacético liberado es neutralizado durante la elaboración de la reacción y el PhI, compuesto altamente apolar, es fácilmente eliminado por cromatografía posibilitando, así, una sencilla purificación del producto de reacción. Dado que el yodobenceno es la materia prima para preparar nuevamente PIFA, éste podría ser regenerado a partir de aquél. Esta tarea, desaconsejable desde el punto de vista práctico, resultaría de gran interés si pudiéramos realizarla en el mismo medio de reacción, de tal modo que la transformación deseada aconteciera de modo catalítico para el reactivo yodado. Con este propósito se ha empleado con éxito oxone® y meta-CPBA como agentes de oxidación primarios permitiendo utilizar el reactivo trivalente en cantidades de hasta 0,04 equivalentes.<sup>12</sup>

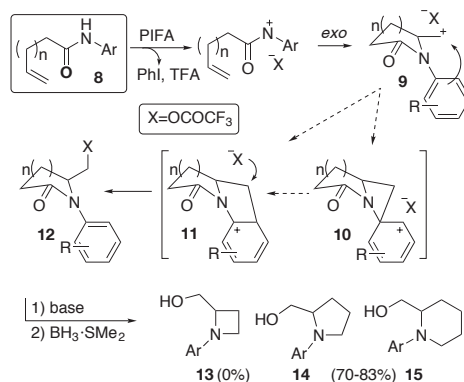


**Esquema 3.** Representación esquemática de un proceso de amidación aromática promovido por PIFA.

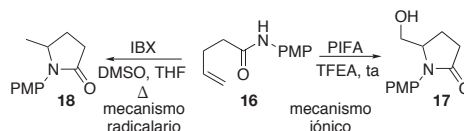
Una transformación de interés que se adapta a lo expresado en el Esquema 2, y que resultó ser de inspiración para el desarrollo de nuestras propias ideas, vino de la mano del trabajo pionero de Kikugawa, quien presentó en 1990 un novedoso procedimiento para promover procesos de amidación electrófila aromática promovida por el reactivo PIFA (Esquema 3). Kikugawa explica que cuando este reactivo actúa sobre amidas convenientemente sustituidas (**I**) se genera un intermedio *N*-acil-nitrénico (**II**) cuyo déficit de carga habrá de estar estabilizado por un grupo donante *R*.<sup>13</sup> Si, bajo tales condiciones, se enfrenta este intermedio a un anillo aromático no desactivado, la unión entre ambas especies (inter- o intra-molecularmente) conducirá al compuesto **III**.<sup>14</sup> El trabajo que se viene realizando en nuestros laboratorios se basa, precisamente, en alterar este patrón de reactividad para estudiar el comportamiento de amidas que porten en su cadena carbonada diferentes grupos funcionales que puedan tomar el papel de nucleófilos (anillos aromáticos y heteroaromáticos, olefinas, alquinos, aminas o tioles) para generar no sólo nuevas uniones C–N, sino también N–N y N–S.<sup>15</sup> En los límites de este artículo nos ceñiremos a reflejar cómo la reacción de amidación de olefinas y alquinos mediada por PIFA supone una puerta de entrada eficaz y versátil para la preparación de, entre otros, heterociclos piperidínicos.

### La reacción de amidación intramolecular de olefinas promovida por PIFA

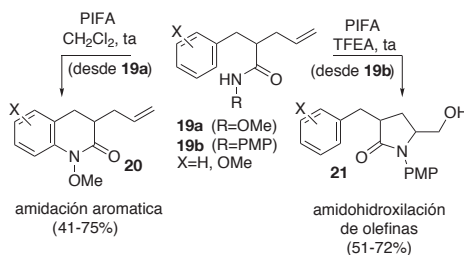
De acuerdo a nuestros propósitos, una lógica extensión de la propuesta realizada por Kikugawa para la reacción de amidación aromática intramolecular nos llevó a considerar al grupo olefínico como el componente nucleófilo de la reacción promovida por PIFA. Para realizar este estudio tomamos una serie de amidas lineales **8** que portan un doble enlace terminal, con diferente longitud de cadena y con diferente sustitución sobre el nitrógeno amídico. Tras su tratamiento con PIFA en trifluoroetanol (TFEA) como disolvente, seguido de elaboración básica y de una etapa de reducción ( $\text{BH}_3 \cdot \text{SMe}_2$ ) del grupo carbonilo amídico original, ahora lactámico, el proceso global concluyó en la obtención de estructuras piperidínicas **15** y pirrolidínicas **14** *N*-aril sustituidas, –pero no así  $\beta$ -lactámicas **13**–, con la generación de un grupo hidroxílico en la posición terminal del original doble enlace. En el Esquema 4 se trata de explicar este resultado. Dada la aparente exigencia de que los sustratos amídicos **8** hayan de encontrarse *N*-aril sustituidos,<sup>16</sup> proponemos que, una vez oxidado el nitrógeno, el ataque intramolecular *exo* sobre el resto olefínico deja una carga positiva alojada en una posición primaria. Este déficit es, a su vez, estabilizado por el resto *N*-arilo generando el intermedio **11**, bien por ataque directo, o bien previo ataque *ipso* seguido de una migración 1,2 de alquilo desde **10**. En cualquier caso, un ataque final por parte



**Esquema 4.** Propuesta mecanística para el proceso de amidohidroxiación intramolecular de olefinas promovida por PIFA.



**Esquema 5.** Rutas divergentes para la evolución de la pentenamida **16** en presencia de I(V) y I(III).

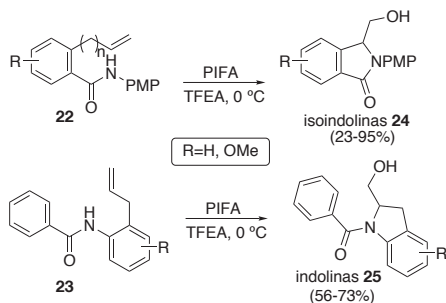


**Esquema 6.** Selectividad en la reacción de amidación promovida por PIFA sobre sustratos polifuncionales.

de un resto trifluoroacetato origina el grupo hidroxilo tras el tratamiento básico de **12**.<sup>17</sup>

Al tiempo que comenzamos nuestras investigaciones y obteniendo los primeros resultados, el grupo de Nicolaou publicó una elegante serie de artículos referidos al uso de reactivos de yodo pentavalente (IBX y DMP) para, a través también de procesos de amidación de olefinas, conseguir heterociclos nitrogenados.<sup>18</sup> Por su analogía con los trabajos que veníamos realizando, nos llamó la atención la declaración de que la adición de PIFA sobre una disolución de **8** en MeCN (el único disolvente que por ellos fue ensayado) resultó ser infructuosa.<sup>19</sup> Contrariamente, sigue informando, ese mismo sustrato se transformó en la 5-metilpirrolidinona **18** cuando fue expuesto a la acción de IBX (en una mezcla DMSO/THF de disolventes). La razón a estos divergentes resultados hay que buscarla, obviamente, en el diferente mecanismo que opera en cada caso: radicalario para la formación del heterociclo **18**, y iónico para su análogo hidroxilado **17** (Esquema 5).

El Esquema 6 muestra información adicional sobre lo determinante que resulta la sustitución sobre el nitrógeno amídico en el curso de la reacción. De hecho, pudimos evidenciar que llevando a cabo la reacción sobre amidas  $\alpha$ -alil- $\alpha$ -bencil disustituidas, el resultado de la misma dependía enteramente del sustituyente sobre el átomo de nitrógeno (*R*), de tal modo que mientras *N*-metoxiamidas **19a** conducen bajo las



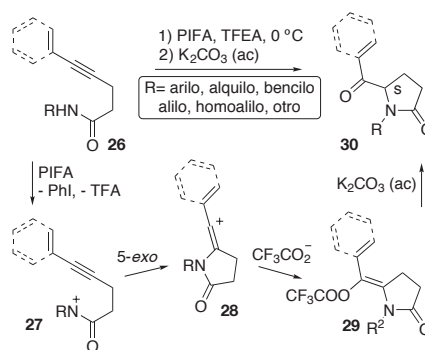
**Esquema 7.** Aplicación de la reacción de amidación de olefinas promovida por PIFA dirigida a la formación de isoindolinas e indolinas.

condiciones habituales de reacción a 3-aliltetrahydroquinolinas **20**, sustratos *N*-aril sustituidos **19b** dan lugar a 3-bencilpirrolidines **21**, y en ambos casos con total quimioselectividad.<sup>20</sup>

Aceptadas las restricciones estructurales que nos imponía esta nueva reacción, –sustratos amídicos *N*-aril sustituidos y olefinas terminales–, tratamos de extender su aplicabilidad a la construcción de heterociclos de interés. Para ello (Esquema 7), insertamos la cadena alquenilamídica en sustratos del tipo **22** y **23** para que, asumiendo en ellos un comportamiento similar, su tratamiento con PIFA condujera a la construcción de sistemas isoindolínicos **24** e indolínicos **25** hidroximetil sustituidos. Y, efectivamente, así ocurrió. Nuevamente, el modo de ciclación 5-*exo* prevalece en exclusividad frente a una opción de ciclación 6-*endo* nunca detectada.<sup>21</sup>

### La reacción de amidación intramolecular de alquinos promovida por PIFA

Tras nuestra experiencia en relación al comportamiento de diferentes alquenilamidas en presencia de PIFA, consideramos apropiado extender tal estudio a alquiniilamidas. Esperando encontrar un paralelismo en el comportamiento (y en los requerimientos estructurales) de ambos tipos de sustratos, sometimos primeramente a la 5-fenil-*N*-(*p*-metoxifenil) pentinamida (**26**, R=PMP) a tratamiento con el reactivo de yodo trivalente en trifluoroetanol como disolvente y a baja temperatura. El resultado, tras la elaboración básica del crudo de reacción, fue la obtención de 5-benzoil-*N*-(*p*-metoxifenil) pirrolidin-2-ona (**30**). La explicación a este resultado hay que buscarla nuevamente en la capacidad del PIFA para oxidar amidas y generar, en este caso (véase Esquema 8), el intermedio **27**. Este intermedio experimenta una ciclación 5-*exo* conducente al catión vinílico **28**, que habrá de estar estabilizado por el sustituyente alquínico. El ataque del anión trifluoroace-

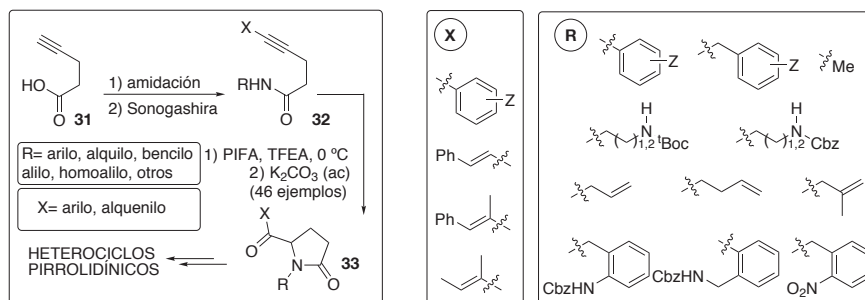


**Esquema 8.** Propuesta mecanística para la transformación de alquiniilamidas **26** en 5-alquenoil- y 5-aroilpirrolidinas **30**.

tato da lugar a la especie **29** que, tras la elaboración básica de la reacción, concluye en la formación de **30**.<sup>22</sup>

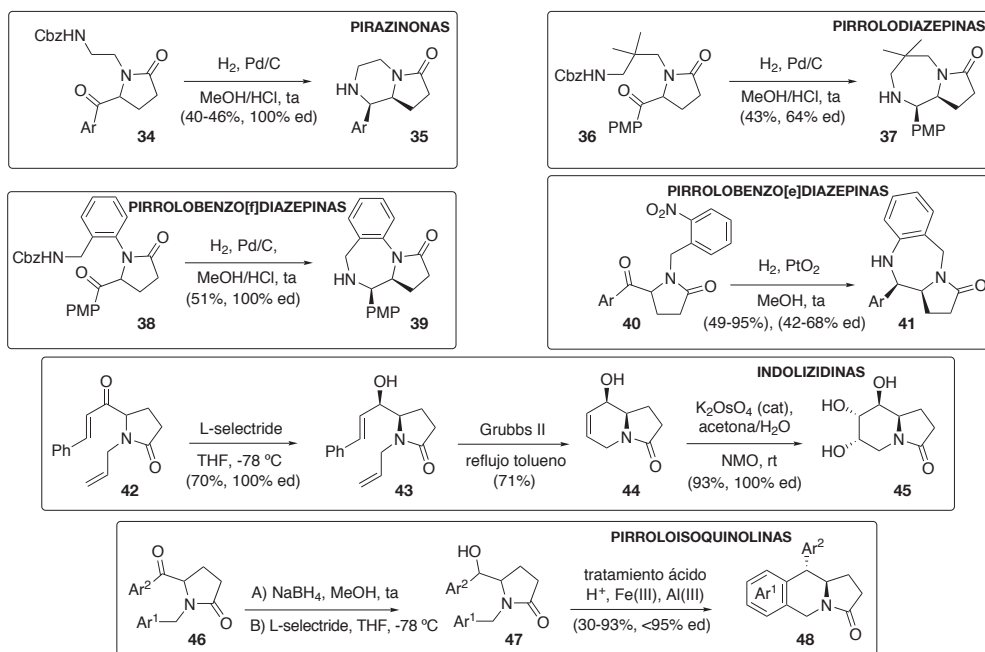
Para establecer el alcance de esta nueva transformación resulta primordial conocer si el carácter terminal o interno del grupo alquino, y si la sustitución sobre el nitrógeno amídico, son realmente aspectos relevantes para el éxito de la reacción. La respuesta al primer aspecto mencionado es fácil: es conocido que los alquinos terminales reaccionan en presencia de PIFA para rendir  $\beta$ -hidroxicetonas a través de la formación de una sal de alquiniyodonio.<sup>23</sup> Además, en el curso de nuestras investigaciones se evidenció que el grupo que ubiquemos en la posición terminal del triple enlace habrá de dotar a éste de un marcado carácter nucleófilo (grupos desactivantes impiden la reacción) al tiempo que posibilite la deslocalización del déficit de carga que se va a generar una vez que se establezca la conexión con el grupo amido (véase **28**). En segundo lugar, y para nuestra satisfacción, vimos cómo la naturaleza del sustituyente a insertar sobre el átomo de nitrógeno, necesario por otra parte para que la reacción transcurra de modo sintéticamente útil, puede ser altamente variable. Grupos arilo (no desactivados), alquilo, alilo, bencilo, o grupos que incluyan funcionalidad adicional (*vide infra*) son válidos para la construcción del heterociclo pirrolidínico buscado. Liberados, pues, de esa restricción se nos abre una puerta tremendamente atractiva para que los productos **30** de esta reacción sean, a su vez, materiales de partida para su elaboración hacia heterociclos pirrolidínicos más complejos.

En estos párrafos finales vamos a desarrollar esta idea mostrando cómo de la selección adecuada del sustituyente amídico y del sustituyente sobre la posición terminal del triple enlace surge una estrategia flexible y potente para la construcción de diferentes heterociclos pirrolidínicos.<sup>15</sup> La rutina general sigue las pautas marcadas en el Esquema 9. Así, sobre



**Esquema 9.** Preparación de intermedios sintéticos pirrolidínicos **33**.





**Esquema 10.** Aplicaciones sintéticas de la reacción de amidación intramolecular de alquinos en la obtención de derivados pirrolidínicos.

el ácido 4-pentinoico (**31**) de partida insertaremos en primer lugar el sustituyente amidico de nuestra elección para, en una segunda etapa, acoplar un resto arílico o alquenílico a través de una reacción de Sonogashira (formación de **32**). Ensamblados todos los componentes necesarios, aplicaremos sobre ellos las condiciones de ciclación habituales (PIFA, TFEA, 0 °C) que rendirán el sistema pirrolidínico **33**. A partir de aquí, cada tipo de sustrato va a ser sometido a una ruta sintética particular adecuada a cada fin propuesto (véase Esquema 10).

Los derivados **34**, **36**, **38** y **40** portan un resto nitrogenado (nitro o amino protegido) en la posición adecuada para que, sometidos a condiciones de hidrogenación catalítica, evolucionen a los correspondientes productos a través de un proceso de aminación reductiva. Esta estrategia nos ha posibilitado la obtención, por una parte, de un conjunto de pirazinonas 1-aril sustituidas **35** con rendimientos variables pero completo diastereocontrol. Se trata éste de un tipo de derivado que porta el esqueleto básico de fármacos reconocidos por sus propiedades nootrópicas (fortalecedoras de la memoria), como el *piracetam*, *oxiracetam* o *unifiram*, por ejemplo.<sup>24</sup> Por otra parte, y bajo esas mismas condiciones de reacción, se ha preparado un conjunto de derivados pirrolodiazepínicos **37**, **39** y **41** con rendimientos y valores de diastereocontrol que van de moderados a excelentes. Tal vez merezca ser destacado el hecho de que la fusión de anillos presente en los derivados benzo[*f*]pirrolo[1,2-*a*][1,4]diazepinónicos **39** es extremadamente poco común en comparación con sus isómeros **41**, para cuya preparación el empleo del catalizador de Adams (PtO<sub>2</sub>) resultó ser esencial frente a otras alternativas.

La presente estrategia sintética ha posibilitado asimismo abrir una nueva vía para construir esqueletos indolizidínicos polihidroxilados, una vía que no parte, como suele ser mucho más habitual, del *chiral pool* de carbohidratos. Estas indolizidinas han sido objeto de numerosos estudios sintéticos y farmacológicos, principalmente por su reconocida acción como

inhibidores de glicosidasas.<sup>25</sup> Así, el derivado 5-alquenoil-*N*-alilpirrolidínico **42** fue sometido a reducción diastereocontrolada con el reactivo estéricamente exigente L-selectride para que el derivado **43** resultante sea transformado en el biciclo **44** aplicando sobre él condiciones de metátesis de olefinas con cierre de anillo. La estereoquímica del grupo hidroxilo en este derivado dirige, en última instancia, la incorporación diastereocontrolada de los grupos hidroxilo en las posiciones 6 y 7 del derivado **45** cuando aplicamos condiciones Upjohn para su dihidroxilación.

Más recientemente hemos abierto una nueva vía para el acceso a estructuras pirrolo[1,2-*b*]isoquinolínicas 10-aril sustituidas **48** basada, nuevamente, en la construcción preliminar de sustratos 5-aroil-*N*-bencilpirrolidínicos del tipo **46**.<sup>26</sup> Esta breve secuencia se basa en la reducción de su grupo cetona, de modo no diastereocontrolado (NaBH<sub>4</sub>) y, alternativamente, con diastereocontrol (L-selectride), para rendir el derivado hidroxilado **47** que, sometido a diferentes condiciones ácidas de ciclación, dio lugar a los derivados deseados a través de un proceso de tipo Friedel-Crafts. Para toda la serie de derivados **48** preparada, el empleo de AlCl<sub>3</sub> a reflujo de CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> condujo, en términos generales, a los mejores resultados. Es de destacar que el diastereocontrol en esta última reacción fue prácticamente completo e independiente de la mezcla diastereomérica (o pura) del sustrato **47**. Ello nos permite proponer que tal ciclación ocurre a través de un proceso S<sub>N</sub>1 por deshidratación y subsecuente reacción del grupo arénico (Ar<sup>1</sup>) con el intermedio carbocatiónico bencílico generado.

## Conclusiones

El abanico de procedimientos disponibles para la preparación del sistema pirrolidínico se ve ahora ampliado por el descubrimiento y desarrollo de las reacciones de amidación de olefinas y alquinos promovidas por el reactivo de yodo hipervalente PIFA. El atractivo de esta metodología es doble: por una

parte no requiere de reactivos o catalizadores metálicos para su ejecución, con los beneficios de índole económico y medioambiental que ello comporta, y, por otra parte, la adaptabilidad del procedimiento a un amplio conjunto de sustratos de partida multifuncionales posibilita una alta versatilidad estructural en los productos poliheterocíclicos a los que conseguimos acceder.

## Agradecimientos

El autor agradece la financiación recibida en sucesivos proyectos concedidos por el Ministerio de Ciencia e Innovación, Gobierno Vasco (GIU IT 370-10 y SAIOTEK S-PE11UN006) y por la UPV/EHU (UFI 11/22). Mención especial merecen todos los investigadores que a través de sus Tesis Doctorales han posibilitado este trabajo (I. Moreno, M. T. Herrero, S. Serna, A. Correa, L. M. Pardo e I. Couto).

## Bibliografía

- a) D. J. Newman, G. M. Cragg, *J. Nat. Prod.* **2012**, *75*, 311–335. b) G. T. Carter, *Nat. Prod. Rep.* **2011**, *28*, 1783–1789.
- C. J. Dunsmore, R. Carr, T. Fleming, N. J. Turner, *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 2224–2225.
- Y. Terada, M. Arisawa, A. Nishida, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2004**, *43*, 4063–4067.
- a) K. I. Fujita, T. Fujii, R. Yamaguchi, *Org. Lett.* **2004**, *6*, 3525–3528. b) M. H. S. A. Hamid, C. L. Allen, G. W. Lamb, A. C. Maxwell, H. C. Maytum, A. J. A. Watson, J. M. J. Williams, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 1766–1774.
- G. D. Monache, D. Misiti, G. Zappia, *Tetrahedron: Asymmetry* **1999**, *10*, 2961–2973.
- a) J. L. Vicario, S. Reboredo, D. Badía, L. Carrillo, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, *46*, 5168–5170. b) S. Saito, T. Tsubogo, S. Kobayashi, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 5364–5365. c) W. Zeng, G. Y. Chen, Y. G. Zhou, Y. X. Li, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 750–751.
- En la mayor parte de las ocasiones se requiere el uso de lantánidos: a) J. Zhang, C. G. Yang, C. He, *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 1798–1799. b) S. Hong, T. J. Marks, *Acc. Chem. Res.* **2004**, *37*, 673–686. c) J. Hannedouche, J. Collin, A. Trifonov, E. Schulz, *J. Organomet. Chem.* **2011**, *696*, 255–262.
- Musher, en su trabajo titulado “*The Chemistry of Hypervalent Molecules*”, introduce el término hipervalencia para referirse a aquellos elementos de los grupos 15–18 de la Tabla Periódica que presentan una valencia mayor que la predicha por la teoría de Lewis-Langmuir o, más concretamente, cuando su capa de valencia, formada por 10 ó 12 electrones, rebasa el octeto. J. I. Musher, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **1969**, *8*, 54–68.
- Para una revisión de la química de estos reactivos, véase por ejemplo: a) A. Varvoglis, *Hypervalent Iodine in Organic Synthesis*, Academic Press, London, **1997**. b) V. V. Zhdankin, P. J. Stang, *Chem. Rev.* **2002**, *102*, 2523–2584. c) T. Wirth, *Top. Curr. Chem.* **2003**, *224*, 1–264. d) A. Varvoglis, *Tetrahedron* **1997**, *53*, 1179–1255. e) V. V. Zhdankin, P. J. Stang, *Chem. Rev.* **2008**, *108*, 5299–5358, y referencias en ellas citadas. Para una revisión sobre el empleo de RYH en la síntesis de productos naturales, véase: f) L. F. Silva, B. Olofsson, *Nat. Prod. Rep.* **2011**, *28*, 1722–1754.
- El enlace hipervalente de tres centros y cuatro electrones (3c–4e), altamente polarizado, confiere un déficit de carga sobre el átomo de yodo que explica su elevada electrofilia.
- La capacidad del yodobenceno como grupo saliente ha sido estimada en 10<sup>6</sup> veces superior a la del grupo triflato en la reacción de una sal de alquenil fenilyodonio. T. Okuyama, T. Takino, T. Sueda, M. Ochiai, *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, *117*, 3360–3367.
- a) R. D. Richardson, T. Wirth, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2006**, *45*, 4402–4404. b) M. Ochiai, Y. Takeuchi, T. Katayama, T. Sueda, K. Miyamoto, *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 12244–12245. c) A. P. Thottumkara, M. S. Bowsher, T. K. Vinod, *Org. Lett.* **2005**, *7*, 2933–2936.
- Y. Kikugawa, M. Kawase, *Chem. Lett.* **1990**, 581–582.
- Con anterioridad, este mismo grupo había logrado generar este tipo de intermedios por acción de sales de plata sobre *N*-cloro-*N*-metoxiamidas: M. Kawase, T. Kitamura, Y. Kikugawa, *J. Org. Chem.* **1989**, 3394–3403. La modificación posterior (referencia 13) es un claro ejemplo de cómo los reactivos de I(III) pueden desplazar al uso de sales metálicas con idéntico objetivo sintético.
- Puede consultarse una descripción de estos trabajos algo más extensa y detallada en: I. Tellitu, E. Domínguez, *Synlett* **2012**, 2165–2175 y referencias ahí citadas.
- Sustratos *N*-alquil sustituidos no conducen al producto deseado sino que derivan en la formación de lactonas. Véase referencia 17 para más detalles.
- I. Tellitu, A. Urrejola, S. Serna, I. Moreno, M. T. Herrero, E. Domínguez, R. SanMartin, A. Correa, *Eur. J. Org. Chem.* **2007**, 437–444.
- a) K. C. Nicolaou, Y. L. Zhong, P. S. Baran, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2000**, *39*, 625–628. b) K. C. Nicolaou, P. S. Baran, Y. L. Zhong, S. Barluenga, K. W. Hunt, R. Kranich, J. A. Vega, *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *124*, 2233–2244.
- El papel del trifluoroetanol (TFEA), un compuesto altamente polar al tiempo que pobremente nucleófilo, como disolvente para esta reacción resultó ser determinante en nuestros ensayos.
- S. Serna, I. Tellitu, E. Domínguez, I. Moreno, R. SanMartin, *Tetrahedron* **2004**, *60*, 6533–6539.
- S. Serna, I. Tellitu, E. Domínguez, I. Moreno, R. SanMartin, *Tetrahedron Lett.* **2003**, *44*, 3483–3486.
- a) S. Serna, I. Tellitu, E. Domínguez, I. Moreno, R. SanMartin, *Org. Lett.* **2005**, *7*, 3073–3076. b) I. Tellitu, S. Serna, M. T. Herrero, I. Moreno, E. Domínguez, R. SanMartin, *J. Org. Chem.* **2007**, *72*, 1526–1529.
- Y. Tamura, T. Yakura, J. I. Haruta, Y. Kita, *Tetrahedron Lett.* **1985**, *26*, 3837–3840.
- a) B. Winblad, *CNS Drug Rev.* **2005**, *11*, 169–182. b) C. Farina, S. Gagliardi, C. Ghelardini, M. Martinelli, M. Norcini, C. Parini, P. Petrillo, S. Ronzoni, *Bioorg. Med. Chem.* **2008**, *16*, 3224–3232, y referencias ahí citadas.
- a) N. Asano, R. J. Nash, R. J. Molyneux, G. W. J. Fleet, *Tetrahedron: Asymmetry* **2000**, *11*, 1645–1680. b) M. L. Sinnott, *Chem. Rev.* **1990**, *90*, 1171–1202.
- I. Couto, L. M. Pardo, I. Tellitu, E. Domínguez, *J. Org. Chem.* **2012**, *77*, 11192–11199.

# Regioselectividad en fullerenos, una visión computacional

Marcel Swart, Silvia Osuna, Marc Garcia-Borràs, Josep M. Luis y Miquel Solà

**Resumen:** Los fullerenos son moléculas apasionantes que poseen una gran variedad de interesantes propiedades que les auguran futuras y prometedoras aplicaciones en el campo de la (bio)medicina y la nanotecnología. Sin embargo, todavía hay muchos aspectos de estos compuestos por descifrar como por ejemplo la reactividad de estas moléculas y el efecto sobre ella de metales encapsulados en su interior. En algunos casos la reactividad de estos sistemas es difícil de describir y determinar mediante únicamente experimentos, por lo que existe mucho interés en su descripción y simulación utilizando las herramientas que la química cuántica nos proporciona. Aquí describimos brevemente los resultados obtenidos en los últimos cinco años en nuestro grupo de investigación y su futuro impacto.

**Palabras clave:** endofullerenos, química teórica, reactividad, estado de transición, clústeres metálicos.

**Abstract:** Fullerenes are wonderful molecules that exhibit a wealth of interesting properties, which promises a major role for this family in the future in the (bio)medicine and nanotechnology fields. However, there are still many unknowns such as for instance the reactivity of these molecules and how this is affected by metals. These aspects are difficult to apprehend by experiments alone, for which reason there is a widespread interest in the description and simulation of them by theoretical chemistry. Here we briefly describe our results from the past five years and their future impact.

**Keywords:** endofullerenes, theoretical chemistry, reactivity, transition state, metal clusters.

## Introducción

A día de hoy, aún existen muchas incógnitas sobre los fullerenos, y una de ellas está relacionada con su propio nombre. El origen de la denominación (en inglés) proviene de la semejanza entre la primera molécula descubierta, el  $C_{60}$ , y las cúpulas geodésicas diseñadas por el famoso arquitecto Richard Buckminster Fuller. Aunque ya han pasado más de 25 años desde el descubrimiento del  $C_{60}$ ,<sup>1</sup> la Real Academia Española todavía no ha decidido cómo denominarlo correctamente: fullereno, fulereno o incluso fulareno son tres posibles

opciones. El problema surge ya que el término más parecido a la pronunciación en inglés sería fulereno, pero de este modo se pierde el homenaje al señor Buckminster Fuller. De ahora en adelante en este artículo usaremos la terminología de fullereno para referirnos a estas fascinantes moléculas.

El descubrimiento de la primera molécula de la familia de fullerenos tuvo lugar en el año 1985<sup>1</sup> en el laboratorio del profesor Smalley (Rice University, EEUU). Juntamente con el profesor Kroto, de visita en su laboratorio, Smalley y Curl estaban intentando simular las condiciones de las estrellas gigantes rojas, cuando encontraron en el espectro de masas dos picos inesperados. A raíz de esta observación, los estudios posteriores mostraron que estos dos picos correspondían a moléculas con 60 y 70 átomos de carbono, respectivamente. Además, resultó que la molécula de 60 carbonos tenía la forma de una pelota de fútbol (Figura 1), y por este motivo, el  $C_{60}$  también tiene otros dos apodos adicionales, *buckyball* (en inglés) o *futboleno*.



M. Swart<sup>1,2</sup>



S. Osuna<sup>1</sup>



M. Garcia-Borràs<sup>1</sup>



J.M. Luis<sup>1</sup>



M. Solà<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut de Química Computacional i Catàlisi y Departament de Química, Universitat de Girona, Campus Montilivi, 17071 Girona.

<sup>2</sup> Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA), Pg. Lluís Companys 23, 08010 Barcelona.

C-e: [marcel.swart@icrea.cat](mailto:marcel.swart@icrea.cat), [miquel.sola@udg.edu](mailto:miquel.sola@udg.edu)

Recibido: 15/01/2013. Aceptado: 22/02/2013.

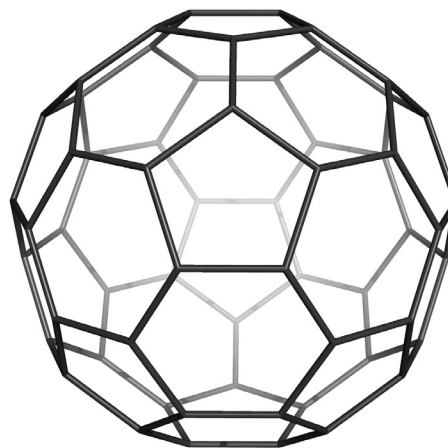
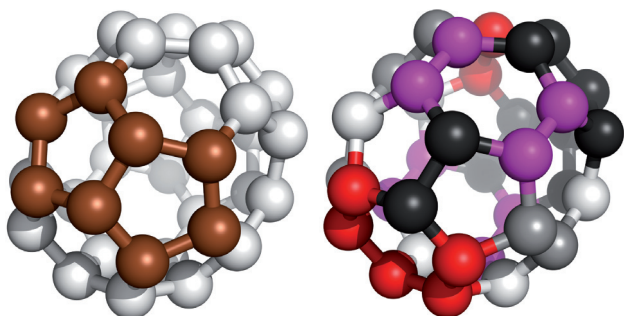


Figura 1. Estructura del *futboleno*,  $C_{60}$ .

El *futboleno* posee una simetría muy alta (icosaédrica), cosa que implica que solamente existan dos tipos de enlaces no equivalentes: (i) los enlaces situados entre un pentágono y un hexágono, llamados enlaces de tipo [5,6], y (ii) los enlaces situados entre dos hexágonos, llamados enlaces de tipo [6,6]. Las distancias C–C de estos dos tipos de enlaces son bastantes diferentes: 1,40 Å para los enlaces [6,6], y 1,45 Å para los [5,6]. Tal y como describimos más adelante, esta diferencia afectará a la reactividad de esos enlaces.

### Regla de los pentágonos aislados

Existen reglas para describir la estructura de los fullerenos y predecir su estabilidad, la mayoría de ellas relacionadas con la posición de los pentágonos en la molécula. Casi todos los fullerenos contienen 12 pentágonos y la distribución de éstos sobre la superficie del fullereno es lo que determina la estabilidad de sus diferentes isómeros. La presencia de dos pentágonos adyacentes en la estructura (Figura 2, izquierda) provoca una desestabilización de la molécula y, por este motivo, los isómeros más estables de un fullereno no contienen pentágonos con dicha unión. Existe una regla que establece este principio, conocida como la “regla de los pentágonos aislados” (IPR por su abreviación en inglés).<sup>2</sup> La regla IPR establece que para un determinado número de átomos de carbono, el isómero del fullereno más estable es el que no posee pentágonos adyacentes. El fullereno más pequeño con todos los pentágonos aislados es precisamente el *futboleno* C<sub>60</sub>.



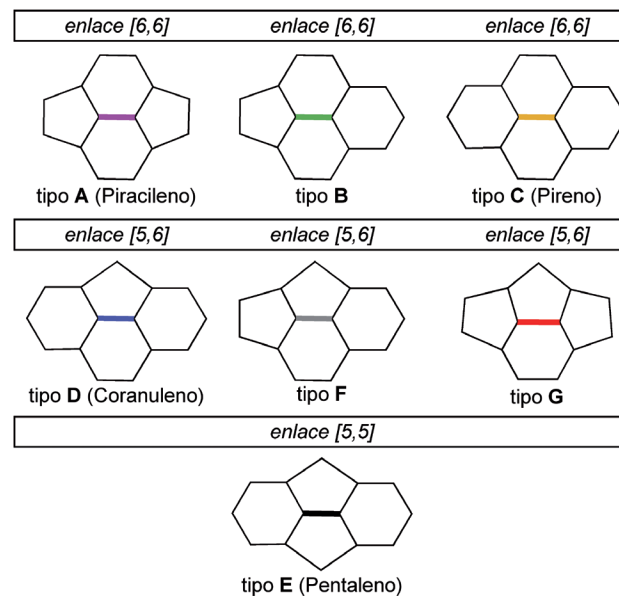
**Figura 2.** Estructura del C<sub>36</sub> (con simetría  $D_{6h}$ ). Izquierda, unidad de dos pentágonos unidos. Derecha, diferentes tipos de enlace: en negro enlaces de tipo [5,5], en rojo y gris enlaces de tipo [5,6] y en violeta enlaces de tipo [6,6].

En los últimos años, el número de estructuras caracterizadas que contienen pentágonos adyacentes ha aumentado considerablemente, convirtiendo la regla IPR en una sugerencia más que una regla. Todos los fullerenos más pequeños que el C<sub>60</sub> y algunos fullerenos que contienen metales en su interior (en la siguiente sección se discutirá más sobre ese tema) suelen no seguir la regla IPR. Como consecuencia del no cumplimiento de esta regla, existe también otro tipo de enlace, los enlaces de tipo [5,5] (Figura 2, derecha). En general podemos encontrar siete tipos de enlaces diferentes:<sup>2</sup> tres de tipo [6,6], tres de tipo [5,6] y uno de tipo [5,5] (Figura 3). Cabe destacar que los enlaces [5,6] del C<sub>60</sub> son de tipo D, y los enlaces [6,6] de tipo A.

### Fullerenos endoédricos

Poco después del descubrimiento del *futboleno* se planteó la posibilidad de poder incluir algún átomo o molécula en el interior de la caja basándose en la forma y el gran espacio interior vacío que posee la molécula.<sup>1,3</sup> En el caso del C<sub>60</sub>, la distancia entre los dos extremos es de unos 6,5 Å. Restando dos veces el radio de *van der Waals* por carbono (1,7 Å<sup>4</sup>), quedaría espacio suficiente para poder insertar átomos en el interior. Esta hipótesis se consiguió llevar a la práctica, primero insertando un átomo de lantano<sup>3</sup> y posteriormente con átomos de gases nobles (He, Ne).<sup>5</sup> También se consiguieron insertar dos átomos de helio o neón,<sup>6</sup> y más recientemente se han podido realizar “operaciones quirúrgicas moleculares”.<sup>7</sup> Este último caso consiste en hacer un pequeño hueco en la superficie del fullereno para poder insertar átomos en el interior, y una vez éstos están dentro, cerrar la caja de nuevo. Todos estos fullerenos que contienen átomos en su interior son conocidos como fullerenos endoédricos.

Los fullerenos endoédricos más conocidos y abundantes son los que contienen en su interior un clúster metálico de fórmula M<sub>3</sub>N (nitruro trimetálico), con metales tales como escandio, itrio, lutecio, gadolinio, disprosio, etc. De hecho, el tercer fullereno más abundante es el Sc<sub>3</sub>N@C<sub>80</sub> (en esta notación la arroba indica que el clúster Sc<sub>3</sub>N está en el interior de la caja C<sub>80</sub>). Otros clústeres metálicos que se pueden encontrar en el interior del esqueleto de un fullereno son carburos (por ejemplo Ti<sub>2</sub>C<sub>2</sub>), óxidos (Sc<sub>4</sub>O<sub>2</sub> y Sc<sub>4</sub>O<sub>3</sub>) o sulfuros (Sc<sub>2</sub>S). De todos ellos, tal y como hemos mencionado, los más abundantes son los nitruros trimetálicos, que formalmente transfieren seis electrones a la caja fullerénica.



**Figura 3.** Siete tipos de enlaces diferentes que podemos encontrar en la estructura de los fullerenos.

### Transferencia de carga

La distribución de la densidad electrónica del fullereno endoédrico depende de los átomos alojados en su interior. Por ejemplo, en el caso del clúster metálico Sc<sub>3</sub>N existe (formalmente) una transferencia de seis electrones desde el clúster hacia el fullereno. Esto ocurre porque los tres orbitales

ocupados más altos en energía del clúster tienen una energía más alta que los tres orbitales vacantes más bajos del fullereno. El número de electrones transferidos formalmente se describe desde el punto de vista de un modelo iónico, en el cual el escandio tiene una carga +3 y el nitrógeno -3. En el caso de otros clústeres, el número de electrones transferidos puede ser también de seis (como es el caso del  $Ti_2C_2$ ) o diferente, como es el caso del  $Sc_2O$  con cuatro electrones transferidos formalmente. En 2005 el grupo del profesor Poblet publicó un artículo<sup>8</sup> donde se demostraba que la diferencia de energías LUMO+3:LUMO+4 (*LUMO*, orbital molecular no ocupado más bajo en energía) determina si la encapsulación de un clúster (que transfiera seis electrones) en el interior de un isómero concreto del fullereno es posible. Esta diferencia (o gap) entre dichos orbitales está correlacionada con el número de electrones transferidos formalmente y tiene que ser alrededor de 1 eV para que sea posible la encapsulación del clúster metálico.

### Aplicaciones de los fullerenos y sus derivados

Los fullerenos y los endofullerenos metálicos (EFM) son materiales prometedores con un elevado número de aplicaciones potenciales, relacionadas con el magnetismo, la superconductividad, y las propiedades ópticas no lineales (NLO).<sup>9</sup> Además, la estructura de carbono relativamente inerte de los EFMs hace que estos compuestos sean ideales para aplicaciones médicas como su uso como huéspedes de metales radioactivos para su utilización en medicina nuclear,<sup>10</sup> o como agentes de contraste para obtener buenas imágenes mediante resonancia magnética nuclear.<sup>11</sup> También pueden formar parte de electroceptores en parejas electrodador-electroceptor en materiales fotovoltaicos que se utilizarían en sistemas de conversión y almacenamiento de energía solar.<sup>12</sup> En este campo, tenemos que destacar la labor y contribución del grupo del profesor Nazario Martín, que en los últimos años ha desarrollado diferentes sistemas basados en derivados de fullerenos y endofullerenos con prometedoras aplicaciones en el campo de la electrónica y la energía fotovoltaica, como por ejemplo, su uso como celdas solares orgánicas.<sup>13</sup>

Se ha sugerido, también, su uso en las futuras computadoras cuánticas para almacenar información.<sup>14</sup> Finalmente, mencionar que en algunos casos se han utilizado como sondas para poder seguir las reacciones de las cajas fullerénicas a través de las señales de los espectros de resonancia paramagnética electrónica.<sup>15</sup>

La funcionalización de los endofullerenos es un campo de investigación muy importante para la síntesis de nuevos materiales con propiedades diseñadas y optimizadas para una determinada función. En el año 1995, Akasaka y colaboradores publicaron la primera funcionalización de un endofullereno, el  $La@C_{82}$ , que conducía a un aducto exoédrico (sobre la superficie exterior).<sup>16</sup> Desde entonces, se han publicado un gran número de reacciones que involucran endofullerenos.<sup>17</sup> Es de esperar que en algunos casos la funcionalización de los EFMs lleve a un aumento de la densidad  $\pi$ -electrónica de la caja, y consecuentemente, a propiedades NLO más intensas, por ejemplo. Además, para poder aplicar los EFMs en el campo de la medicina es necesario que éstos sean solubles en agua, y una estrategia es funcionalizarlos con grupos polares solubles en agua como es el caso de los EMFs  $Gd@C_{60}[C(COOH)_2]$  y  $Gd@C_{82}(OH)_x$ .<sup>18</sup> Añadir también que las

adiciones reversibles se han mostrado muy útiles para separar mezclas de fullerenos y para la protección de los enlaces más reactivos.<sup>19</sup> Hay que remarcar que la dinámica de los átomos encapsulados puede verse modificada con la funcionalización de la caja fullerénica.<sup>20</sup>

### Reactividad de los fullerenos

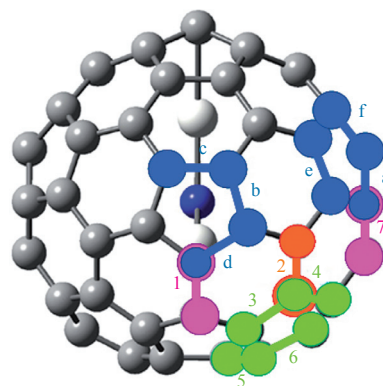
Es muy importante conocer exactamente cuál es el comportamiento y la reactividad de los fullerenos si nuestra meta es su futura aplicación en los campos de la nanotecnología y la (bio)medicina. Esto es especialmente importante para su posible uso en animales y seres humanos como agentes de contraste en resonancias MRI (con gadolinio), por ejemplo. El conocimiento de la reactividad de los fullerenos, y especialmente el de los fullerenos endoédricos, es por lo tanto, un desafío aún vigente y muy importante a día de hoy.

Inicialmente, se desconocía cuál era el efecto de los átomos metálicos del interior sobre la reactividad exoédrica de los fullerenos. En el caso del clúster metálico  $Sc_3N$  por ejemplo, a causa de su transferencia formal de carga, existían dos posibilidades. La primera hipótesis era que la reactividad aumentase debido a que la presencia de átomos dentro de la caja provocaran un incremento en la tensión de los enlaces entre los diferentes átomos de carbono de la caja. Sin embargo, una segunda opción era que la reactividad del fullereno disminuyera debido a que la transferencia de carga provocase una reducción considerable de la afinidad electrónica de la caja. Antes de nuestros estudios completos sobre la reactividad de un fullereno endoédrico y su equivalente caja de carbono vacía, sólo existían meras predicciones sobre este tema.

### Resultados

#### Reactividad del $Sc_3N@D_{3h}-C_{78}$

El caso del endofullereno  $Sc_3N@C_{78}$  es especial porque el clúster metálico  $Sc_3N$  no puede moverse libremente dentro de la caja (a diferencia del  $C_{80}$  donde sí puede hacerlo, ver a continuación). Esto implica que tiene 13 enlaces no equivalentes: siete enlaces [6,6] y seis enlaces [5,6] (*este isómero cumple la regla IPR y por lo tanto no contiene enlaces de tipo [5,5]*). En la Figura 4 están representados estos 13 enlaces, los de tipo [6,6] con números y los de tipo [5,6] con letras.



**Figura 4.** Enlaces no equivalentes del fullereno endoédrico  $M_3N@D_{3h}-C_{78}$ .

Nuestro trabajo<sup>21</sup> fue el primero que estudió todos los aspectos de la reactividad de un fullereno endoédrico tanto desde el punto de vista cinético como del termodinámico, y para todos los enlaces no equivalentes. Sobre el fullereno C<sub>78</sub> y su derivado endoédrico, el Sc<sub>3</sub>N@C<sub>78</sub>, y mediante cálculos de química cuántica al nivel computacional BP86/TZP//BP86/DZP estudiamos la reacción de cicloadición Diels-Alder entre los mencionados fullerenos y el *s-cis*-1,3-butadieno. Utilizamos el programa ADF<sup>22</sup> para calcular las energías y QUILD<sup>23</sup> para obtener las geometrías; el programa QUILD es muy útil para buscar los estados de transición dado que usa una matriz hessiana con la curvatura correcta (sólo una frecuencia imaginaria que además corresponde a la reacción de interés<sup>23</sup>).

Las barreras de la reacción sobre todos los enlaces no equivalentes para el caso del fullereno libre (X=∅) y con Sc<sub>3</sub>N en su interior se presentan en la Tabla 1, así como los valores promedio para los enlaces [6,6] y los enlaces [5,6]. Tanto para el fullereno libre como para el fullereno endoédrico existe una preferencia por los enlaces [5,6], aunque en el segundo caso la diferencia es más grande. Más importante que eso es que encontramos un cambio radical en la regioselectividad de la reacción: los enlaces más reactivos del C<sub>78</sub> (**1** y **b**) pasan a estar muy desactivados en el Sc<sub>3</sub>N@C<sub>78</sub>, en el que los enlaces **6** y **d** pasan a ser los más reactivos. También cabe destacar que las barreras aumentan considerablemente desde 12 kcal·mol<sup>-1</sup> en el caso del C<sub>78</sub> hasta 19 kcal·mol<sup>-1</sup> para el Sc<sub>3</sub>N@C<sub>78</sub>. Además, tenemos que tener presente que a este nivel de cálculo, la barrera de la reacción Diels-Alder entre el butadieno y el etileno tiene un valor de 18 kcal·mol<sup>-1</sup>. Por lo tanto, el fullereno libre es bastante más reactivo que la reacción entre butadieno y etileno, aunque la reactividad del fullereno endoédrico es parecida.

**Tabla 1.** Barreras<sup>a</sup> de la reacción de cicloadición Diels-Alder entre (X@)C<sub>78</sub> y el *s-cis*-1,3-butadieno.

	X=∅	X=Sc <sub>3</sub> N	X=Y <sub>3</sub> N	X=Ti <sub>2</sub> C <sub>2</sub>	X=Xe <sub>2</sub>
<b>enlaces [6,6]</b>					
<b>1</b>	12,2*	23,8	20,1	23,6	12,1
<b>2</b>	30,2	27,1	27,0	26,8	28,8
<b>3</b>	21,7	28,9	27,1	18,2*	21,9
<b>4</b>	14,8	20,0	21,1	29,6	14,3
<b>5</b>	14,4	27,6	30,2	20,6	18,2
<b>6</b>	17,2	18,5*	18,3*	27,0	19,8
<b>7</b>	13,5	20,1	20,6	27,5	11,4*
<i>Prmd</i> <sup>b</sup>	17,8	24,3	24,5	24,2	18,4
<b>enlaces [5,6]</b>					
<b>a</b>	17,2	21,5	23,0	21,4	18,0
<b>b</b>	12,5*	20,7	23,1	26,5	13,0*
<b>c</b>	16,7	20,1	22,5	17,4*	17,3
<b>d</b>	22,1	19,7*	17,1*	22,6	22,5
<b>e</b>	15,3	22,3	17,2	20,5	14,9
<b>f</b>	18,0	21,5	21,9	19,3	20,2
<i>Prmd</i> <sup>b</sup>	17,0	21,0	20,4	21,7	17,7
<b>Ref.</b>	<b>21</b>	<b>21</b>	<b>24</b>	<b>25</b>	<b>26</b>

<sup>a</sup> energías en kcal·mol<sup>-1</sup>, obtenidas a nivel BP86/TZP//BP86/DZP; \* enlaces con la barrera más baja; <sup>b</sup> valor promedio

Una vez obtenidos todos los resultados de la reactividad de estos dos fullerenos, pudimos compararlos con las predicciones hechas anteriormente para intentar encontrar si existe alguna propiedad que permita predecir dicha reactividad. Nos fijamos en las distancias entre los átomos de los enlaces, ángulos de piramidalización y la forma de los orbitales moleculares no ocupados (LUMOs). En general, se considera que un enlace es más reactivo cuanto menor es su distancia, mayor la piramidalización de los átomos de carbono implicados en el enlace, y si existe algún LUMO con la forma adecuada (antienlazante) para interactuar con el HOMO del dieno centrado en dicho enlace. Desafortunadamente, ninguno de los tres criterios es capaz de predecir la reactividad de los diferentes enlaces. Sólo una combinación de un enlace bastante corto, con ángulos de piramidalización altos y una participación en los LUMOs con la forma adecuada indica la posibilidad de tener un enlace reactivo, aunque sin llegar a mostrar una correlación clara, por lo cual es necesario realizar cálculos teóricos para obtener resultados fiables.

### Reactividad del Y<sub>3</sub>N@D<sub>3h</sub>-C<sub>78</sub>

A continuación, estudiamos<sup>24</sup> el efecto del metal sobre la reactividad en más profundidad, cambiando el Sc<sub>3</sub>N por Y<sub>3</sub>N. Los átomos de itrio tienen un tamaño más grande que los de escandio, y por esta razón era de esperar un posible cambio en la reactividad. Aunque fijándonos en los valores promedio (Tabla 1) parece que la reactividad del Sc<sub>3</sub>N y Y<sub>3</sub>N es similar, la regioselectividad varía de forma remarcable dado que ahora es el enlace **d** el que está más favorecido (ver Tabla 1). La barrera más baja para los enlaces del Y<sub>3</sub>N@C<sub>78</sub> es 1,4 kcal·mol<sup>-1</sup> menor que para el Sc<sub>3</sub>N@C<sub>78</sub>. Además, el enlace más reactivo (**d**) tiene una distancia C-C muy larga siendo, de hecho, uno de los enlaces más largos de toda la estructura. Este es el primer ejemplo que conocemos donde la reacción de cicloadición se produce preferentemente sobre uno de los enlaces más largos del fullereno.

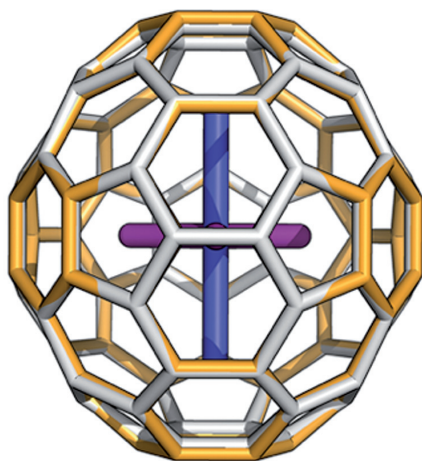
Aunque en el caso del Sc<sub>3</sub>N@C<sub>78</sub> el efecto de disminución de la afinidad electrónica (por la transferencia formal de seis electrones) era más importante que el efecto estérico, cuando se encapsula el clúster de itrio en el interior del C<sub>78</sub> el efecto estérico juega un papel fundamental. La razón principal para entender porque el enlace **d** es más reactivo<sup>24</sup> está relacionada con la posición de los itrios en el interior de la caja. En el endofullereno Y<sub>3</sub>N@C<sub>78</sub>, uno de los itrios está muy cerca del enlace **d** induciendo una tensión significativa sobre los carbonos de este enlace. De hecho, debido a esta tensión, el clúster metálico no posee una conformación plana como en el caso del Sc<sub>3</sub>N sino que pasa a estar piramidalizado. Una de las maneras que tiene el sistema para aliviar dicha tensión es dando lugar a la reacción tiene lugar sobre este enlace **d**, que se abre, generando más espacio para alojar y dejar relajar el clúster metálico. Este relajamiento del clúster hace que el enlace más reactivo sea uno de los más largos, el enlace **d**.

### Reactividad del Ti<sub>2</sub>C<sub>2</sub>@D<sub>3h</sub>-C<sub>78</sub>

Desde el descubrimiento de los fullerenos con carburos metálicos en su interior se especuló sobre su estructura real. Por ejemplo, con espectrometría de masas detectaban 86 carbonos y 2 escandios,<sup>27</sup> por lo que inicialmente determinaron que el fullereno sintetizado correspondía a la estructura Sc<sub>2</sub>@C<sub>86</sub>.

Sin embargo, un estudio posterior<sup>28</sup> demostró claramente que, de hecho, el compuesto obtenido era un carburo de escandio, de fórmula  $\text{Sc}_2\text{C}_2@C_{84}$ . Lo mismo ocurrió con el fullereno  $\text{Ti}_2@C_{80}$ , que *a posteriori* resultó ser un carburo de fórmula  $\text{Ti}_2\text{C}_2@C_{78}$ .<sup>29</sup> La conformación del clúster  $\text{Ti}_2\text{C}_2$  dentro de la caja  $C_{78}$  no era conocida, así como tampoco su reactividad.

En nuestro estudio<sup>25</sup> del fullereno  $C_{78}$  con el carburo de titanio en su interior, empezamos centrándonos en la estructura. Probamos diferentes conformaciones y orientaciones del carburo y la más estable correspondía a aquella con el clúster situado en vertical (ver Figura 5). Dado que la orientación del clúster (vertical) es significativamente diferente en este caso respecto a los clústeres del nitruro trimetálico (horizontal), se podía esperar un efecto diferencial sobre la reactividad y selectividad. La posición de los titanios, más cerca de otros enlaces, conlleva un cambio en la regioselectividad de la reacción (ver Tabla 1). En este caso, son los enlaces **3** y **c** los más reactivos, con unas barreras parecidas a las descritas para los enlaces más reactivos de los fullerenos  $\text{M}_3\text{N}@C_{78}$  ( $\text{M} = \text{Sc}, \text{Y}$ ).



**Figura 5.** Representación superpuesta de los endofullerenos  $\text{Ti}_2\text{C}_2@C_{78}$  (caja amarilla y clúster vertical en azul) y  $\text{Sc}_3\text{N}@C_{78}$  (caja gris y clúster horizontal en violeta).

### Reactividad del $\text{Ng}_x@C_{60}$ y $\text{Xe}_2@D_{3h}-C_{78}$

Además de estudiar el fullereno  $C_{78}$ , también investigamos la reactividad del futboleno ( $C_{60}$ ). Nuestra investigación fue motivada por un estudio previo del profesor Frenking,<sup>30</sup> donde se demostraba que existe un enlace covalente entre dos xenones cuando estos están dentro de la caja del  $C_{60}$ . Frenking sólo estudió los endofullerenos  $\text{Ng}_x@C_{60}$ , pero la reactividad de esas moléculas era una incógnita. Por este motivo nos planteamos el estudio de su reactividad,<sup>31</sup> de nuevo a través de la reacción Diels-Alder y con el *s-cis*-1,3-butadieno, tanto para los sistemas con un átomo de gas noble dentro ( $\text{Ng}$ : helio, neón, argón, kriptón y xenón) como con dos átomos ( $\text{Ng}_2$ ). Comparado con el fullereno vacío, la encapsulación de sólo un átomo  $\text{Ng}$  no afecta a la reactividad ni tampoco a la selectividad de la reacción: hay una clara preferencia por los enlaces [6,6] (la barrera de reacción es de 13 kcal·mol<sup>-1</sup>, mientras que para los enlaces [5,6] es de 21 kcal·mol<sup>-1</sup>). La presencia de un átomo de gas noble modifica dichas barreras entre 0,2 y 0,7 kcal·mol<sup>-1</sup>.

La situación cambia drásticamente cuando tenemos dos átomos de gas noble dentro de la caja (ver Tabla 2). Con los elementos más ligeros ( $\text{He}_2$ ,  $\text{Ne}_2$ ) el efecto es mínimo, pero a partir del argón las barreras se reducen considerablemente. Finalmente, con dos xenones dentro ( $\text{Xe}_2@C_{60}$ ), las barreras bajan tanto que casi ya no existen (4-6 kcal·mol<sup>-1</sup> para los enlaces más reactivos).

**Tabla 2.** Barreras<sup>a</sup> de la reacción de cicloadición Diels-Alder entre  $\text{X}@C_{60}$  y el *s-cis*-1,3-butadieno.

	X=He <sub>2</sub>	X=Ne <sub>2</sub>	X=Ar <sub>2</sub>	X=Kr <sub>2</sub>	X=Xe <sub>2</sub>
<b>enlaces [6,6]</b>					
<b>1</b>	12,8	11,9	8,4	6,2	4,9
<b>2</b>	13,1	11,8	8,5	6,1	3,8
<b>3</b>	13,1	13,0	12,2	11,7	11,3
<i>Prmd</i> <sup>b</sup>	13,0	12,2	9,7	8,0	6,7
<b>enlaces [5,6]</b>					
<b>a</b>	21,4	20,2	15,6	12,5	5,7
<b>b</b>	21,5	21,3	15,7	12,6	5,6
<b>c</b>	20,4	20,0	19,2	18,7	14,7
<b>d</b>	21,5	21,4	20,1	19,6	8,1
<b>e</b>	20,4	20,0	14,9	11,9	6,1
<b>f</b>	20,4	20,1	19,4	21,5	16,4
<i>Prmd</i> <sup>b</sup>	20,9	20,5	17,5	16,1	9,4

<sup>a</sup> energías en kcal·mol<sup>-1</sup>, obtenidas a nivel BP86/TZP//BP86/DZP;<sup>31</sup> los valores para el fullereno libre son 12,7 [6,6] y 21,0 [5,6] kcal·mol<sup>-1</sup>; <sup>b</sup> valor promedio.

Además, aunque existe una preferencia por los enlaces [6,6] para el resto de gases nobles, en el caso de  $\text{Xe}_2@C_{60}$  ya no encontramos una preferencia tan clara: los enlaces [6,6] como los [5,6] son igualmente muy reactivos. Esto es debido a la tensión sobre la caja que produce la presencia de dos átomos de xenón: una vez el sistema ha reaccionado con el butadieno, el enlace atacado se abre y los átomos de xenón disponen de más espacio en el interior de la cavidad.

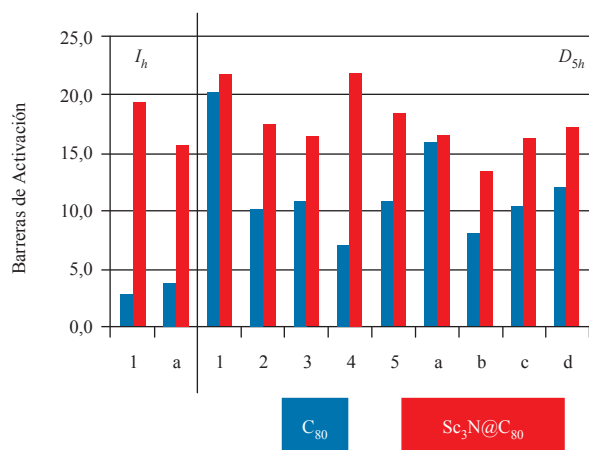
Dada la gran tensión que produce la presencia de dos átomos de xenón en el interior del fullereno  $C_{60}$ , quisimos investigar qué ocurre con fullerenos más grandes. Curiosamente, con un fullereno bastante más grande ( $C_{78}$ ), todavía existe este efecto debido a la presencia de los xenones (ver las barreras de la reacción Diels-Alder en la Tabla 1). Muchos enlaces no se ven afectados (en comparación con el  $C_{78}$  libre), pero otros muestran unas barreras 2-3 kcal·mol<sup>-1</sup> más bajas o más altas.<sup>26</sup>

### Reactividad del $\text{M}_3\text{N}@D_{5h}-C_{80}$ y $\text{M}_3\text{N}@I_h-C_{80}$

Como ya se ha mencionado anteriormente, el tercer fullereno más abundante es el  $\text{Sc}_3\text{N}@C_{80}$ , donde el clúster metálico puede moverse libremente dentro de la caja.<sup>32</sup> Existen dos isómeros mayoritarios para los endofullerenos derivados del  $C_{80}$ , uno con simetría icosaédrica ( $I_h$ ) y otro con simetría  $D_{5h}$ . Ambos isómeros pueden alojar diferentes clústeres metálicos en su interior, por ejemplo  $\text{Sc}_3\text{N}$ ,  $\text{Y}_3\text{N}$ ,  $\text{Sc}_2\text{YN}$ ,  $\text{ScY}_2\text{N}$ , o  $\text{Lu}_3\text{N}$  entre otros muchos. Para conocer la reactividad de estos endofullerenos y ver cuál es el efecto de la libre rotación del clúster

metálico sobre ésta, analizamos<sup>33</sup> la reactividad de los dos isómeros en colaboración con el grupo del profesor Poblet (URV, Tarragona). Estudiamos los casos de los clústeres de  $\text{Sc}_3\text{N}$ ,  $\text{Lu}_3\text{N}$  y  $\text{Gd}_3\text{N}$ , y determinamos la cinética y termodinámica de la adición Diels-Alder del *s-cis*-1,3-butadieno sobre todos enlaces no equivalentes de las dos cajas isoméricas  $I_h\text{-C}_{80}$  y  $D_{5h}\text{-C}_{80}$ , teniendo en cuenta diferentes orientaciones de los clústeres. Se trataba de un desafío muy grande desde un punto de vista de esfuerzo computacional, por lo que requerimos el uso de las máquinas de supercomputación del Barcelona Supercomputing Center (BSC-CNS) y de la Red Española de Supercomputación (RES), así como las del Centro de Servicios Científicos y Académicos de Cataluña (CESCA).

Tal y como se observa en el caso del  $\text{M}_3\text{N}@C_{78}$ , el sistema es mucho menos reactivo cuando hay un clúster metálico en el interior del fullereno (ver Figura 6). Las barreras de activación incrementan entre 5 y 15  $\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$  cuando tenemos el  $\text{Sc}_3\text{N}$  en el interior del  $\text{C}_{80}$ . La regioselectividad de la reacción no varía en el caso del isómero  $I_h$  al introducir el clúster. Sin embargo, el efecto del metal sobre la regioselectividad de la reacción es más importante en el caso del isómero  $D_{5h}$ . También se observan ligeras diferencias entre los sistemas que contienen los clústeres de  $\text{Sc}_3\text{N}$ ,  $\text{Lu}_3\text{N}$  y  $\text{Gd}_3\text{N}$ .<sup>33</sup>



**Figura 6.** Barreras de activación ( $\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ ) para la cicloadición Diels-Alder entre los isómeros  $I_h$  y  $D_{5h}$  del  $\text{C}_{80}$  y sus derivados endofullerénicos y el *s-cis*-1,3-butadieno.

### Reactividad y RMN del $\text{Sc}_3\text{N}@D_{5h}\text{-C}_{80}$

Durante el estudio de reactividad del sistema  $\text{M}_3\text{N}@D_{5h}\text{-C}_{80}$  nos encontramos con una contradicción con los datos experimentales publicados, que indicaban que el enlace [6,6] de tipo A era el más reactivo.<sup>34</sup> En contra, nuestros resultados teóricos demostraban que este tipo de enlaces no eran muy reactivos [comparar las barreras en rojo de los enlaces 5 (piracilénico) y b en la Figura 6]. Pero una de las diferencias entre el estudio experimental y el nuestro era que nosotros estudiábamos la reacción Diels-Alder<sup>33</sup> mientras que ellos la reacción de Prato (1,3-dipolar).<sup>34</sup> Aunque normalmente estas reacciones ofrecen regioselectividades y reactividades muy similares,<sup>35</sup> podría darse el caso de que éste fuera el primer estudio donde existieran diferencias significativas. Por este motivo, decidimos estudiar también la

reacción de Prato para el caso del  $\text{Sc}_3\text{N}@D_{5h}\text{-C}_{80}$ ,<sup>36</sup> encontrando de nuevo las mismas tendencias: el enlace [6,6] de tipo A (5) quedaba muy desactivado, mientras que el enlace [5,6] b era el más reactivo. Para resolver la aparente contradicción con los datos experimentales realizamos cálculos de los parámetros de RMN de los diferentes productos para compararlos con los observados experimentalmente. En el estudio experimental se obtuvo una señal muy simétrica, que se asignaba a un enlace simétrico (piracilénico). Aunque la señal correspondiente al producto del ataque sobre el enlace 5 era muy simétrica según nuestros cálculos, ésta estaba demasiado desplazada para corresponderse con la señal observada experimentalmente. Sólo quedaba un candidato que pudiera generar una señal RMN como la experimental, que era el producto que se obtiene por adición al enlace b (el más reactivo según nuestros cálculos). Por lo tanto, nuestros estudios teóricos demostraron que en el artículo experimental la asignación del producto obtenido y del enlace más reactivo era errónea.<sup>36</sup>

### Modelo de la caja congelada

En todos los estudios presentados anteriormente hemos visto que es muy importante tener en cuenta todos los enlaces presentes en un fullereno, dado que la regioselectividad cambia a menudo cuando varía el clúster en el interior de una misma caja. Esto implica que el número de cálculos requeridos para el correcto estudio de la reactividad de estos sistemas es alto, incrementando mucho el tiempo de cálculo necesario. Así, en parte, se puede explicar el número reducido de artículos computacionales que exploran la reactividad de estos compuestos. Motivados por la gran utilidad de estos estudios, propusimos el *modelo de la caja congelada* (MCC).<sup>37</sup> En principio, si queremos estudiar el efecto de la inserción de otro clúster metálico, tenemos que obtener todos los productos y todos los estados de transición para todos los enlaces. Pero gracias al nuevo modelo propuesto, podemos hacer una primera selección de los enlaces que serán finalmente los más favorables.

Para poder desarrollar dicho modelo nuevo, empezamos analizando los resultados que ya teníamos de los estudios anteriores y miramos si existía una correlación entre las barreras y las energías de reacción. Resultó que dicha correlación sí existía, y nos permitió proponer el nuevo modelo de la caja congelada.<sup>37</sup> En este modelo se parte de las estructuras de los productos optimizados para el caso del fullereno libre. A continuación se introduce el clúster metálico en el interior y, sin reoptimizar las nuevas estructuras, mediante un simple cálculo de energía electrónica se obtiene una primera aproximación para las energías de reacción con un coste computacional muy bajo. Esas energías aproximadas en realidad correlacionan bien con las energías reales, y por lo tanto podemos usarlas de manera eficiente para seleccionar los productos más reactivos (que también corresponderán con aquellos que tienen las barreras de reacción más bajas). Finalmente, solamente necesitamos reoptimizar y buscar los estados de transición para estos enlaces más reactivos previamente seleccionados (ver Figura 7). Esta estrategia nos permite un ahorro enorme del esfuerzo computacional en términos de horas de cálculo.



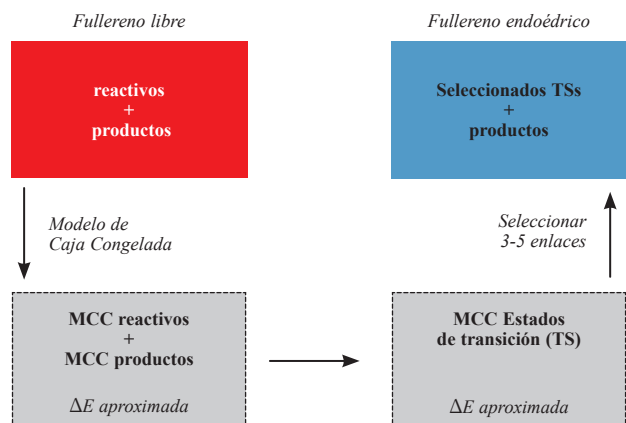


Figura 7. Esquema del modelo de la caja congelada (MCC).

Por ejemplo, supongamos que un fullereno tiene 35 enlaces no equivalentes. Si no aplicamos el modelo propuesto, tendríamos que buscar 35 productos de reacción y 35 estados de transición diferentes. Sin embargo, aplicando el modelo MCC, nos quedamos con los 3-5 enlaces más reactivos a partir de simples cálculos puntuales de energía electrónica y sólo para estos casos seleccionados buscamos los productos y estados de transición. En este último caso, el esfuerzo computacional es de solamente un 14% respecto al hecho de optimizar completamente los productos y estados de transición para la adición sobre todos los enlaces, así que nos ahorramos un 86% de tiempo de cálculo gracias al uso del modelo de la caja congelada.<sup>37</sup>

### Importancia de la dispersión

En cualquier estudio en el que se utiliza como herramienta la química computacional, uno tiene que estar seguro de que se están usando métodos adecuados para el sistema en consideración. Por este motivo, hicimos una prueba sobre nuestros primeros estudios para comprobar que el funcional DFT que se utilizó era correcto. Aunque existían diferencias entre los valores absolutos de las barreras de reacción, las tendencias para los diferentes enlaces no cambiaban. Además, en el caso de la cicloadición Diels-Alder entre el  $C_{60}$  y el ciclopentadieno también comparamos directamente los resultados teóricos con los resultados experimentales disponibles. Nuestros resultados con funcionales DFT estándar (BP86, B3LYP) eran significativamente diferentes a los valores observados experimentalmente. Por ejemplo, la barrera de reacción era demasiado alta mientras que la energía de reacción calculada era demasiado baja.

Es conocido que uno de los componentes de la energía de interacción que los funcionales DFT no describen correctamente es la energía de dispersión. Para solucionar este problema, en 2006 Grimme propuso<sup>38</sup> añadir una contribución empírica a la energía DFT total. Con este nuevo término de energía de dispersión añadido, la superficie de energía cambiaba drásticamente.<sup>39</sup> Nuestros resultados a nivel B3LYP-D (donde -D indica que se añade la corrección de la dispersión propuesta por Grimme) eran muy satisfactorios: la barrera bajaba y la energía de reacción mejoraba (ver Figura 8).

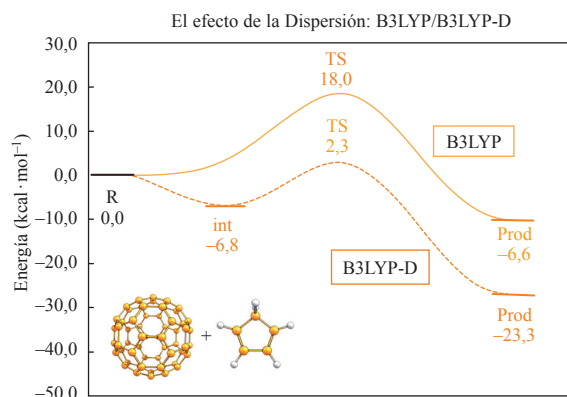


Figura 8. Efecto de la dispersión sobre la superficie de energía para la reacción Diels-Alder entre el ciclopentadieno y el  $C_{60}$ .

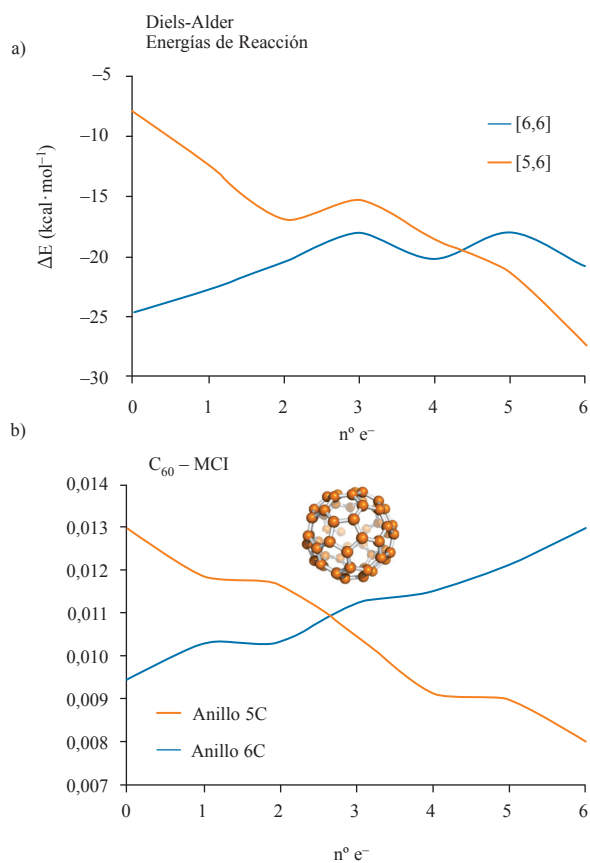
Asimismo, en otro estudio que realizamos el efecto de la dispersión fue clave para entender qué estaba ocurriendo experimentalmente durante la reacción.<sup>40</sup> En la reacción de (retro-)Diels-Alder entre el ciclopentadieno (Cp) y el (1,2,3,4,5-pentametil)ciclopentadieno (Cp\*) con  $La@C_{2v}-C_{82}$  se observa un gran cambio en la estabilidad de los productos. La descomposición del  $La@C_{2v}-C_{82}Cp$  hacia reactivos tiene lugar a una velocidad un orden de magnitud más rápida que la del  $La@C_{2v}-C_{82}Cp^*$ . Los autores de este estudio experimental justificaron erróneamente esta observación basándose en los efectos electrónicos de los grupos metilos sobre el anillo ciclopentadieno. Nuestros cálculos, sin embargo, mostraron que sin añadir la corrección de la energía de dispersión no existen diferencias entre la estabilidad de los productos Cp y Cp\*, y sólo cuando añadimos la corrección a la energía debido a la dispersión aparece la diferencia en la reactividad entre ambos compuestos. La estabilización del intermedio debido a la energía de dispersión en el caso de Cp\* provoca que las barreras de Gibbs de las reacciones retro-Diels-Alder y Diels-Alder sean parecidas y las dos reacciones puedan entrar en competición directa alcanzando un equilibrio, lo que explica la mayor estabilidad (tiempo de vida medio) del  $La@C_{2v}-C_{82}Cp^*$ .<sup>40</sup> Por lo tanto, pudimos concluir que es imprescindible incluir los efectos de la energía de dispersión en los cálculos DFT para obtener resultados directamente comparables con los experimentos.

### Control electroquímico de la regioselectividad

Como ya se ha explicado anteriormente, los fullerenos libres normalmente presentan una preferencia para reaccionar a través de los enlaces de tipo [6,6], y en algunos casos al pasar a sus derivados endoédricos esta preferencia se tuerce hacia los enlaces de tipo [5,6]. Para entender mejor este cambio en la reactividad y comprobar si se trata de un hecho específico de la reacción de Diels-Alder, nos propusimos estudiar la reactividad del  $C_{60}$  mediante reacciones de cicloadición Diels-Alder, 1,3-dipolar y cicloadiciones de carbenos.<sup>41</sup> Además, para tratar de simular el efecto de encapsular un clúster metálico en el interior de la caja de carbono (transferencia de hasta seis electrones), añadimos sucesivamente electrones al fullereno neutro hasta llegar al  $C_{60}^{6-}$ , recalculando el perfil de reacción para cada caso.

El cambio en la selectividad viene claramente determinado por el número de electrones añadidos (ver Figura 9). En el caso del fullereno neutro, las cicloadiciones muestran una clara preferencia por los enlaces [6,6] y cada vez que se añade un electrón al sistema, la diferencia entre las adiciones a los enlaces [6,6] y [5,6] va disminuyendo hasta invertirse en el sistema  $C_{60}^{5-}$ .<sup>41</sup> El cambio más grande lo encontramos en los enlaces [5,6], que pasan de estar totalmente desactivados a ser muy reactivos.

Tal y como ya es conocido y era de esperar, los seis electrones adicionales se colocan mayoritariamente sobre los anillos pentagonales, cosa que provoca un aumento de la aromaticidad de éstos (más parecidos a un ciclopentadienilo). Curiosamente, la aromaticidad de los hexágonos disminuye al añadir electrones, mientras que la de los pentágonos sube.<sup>41</sup> Este incremento de la aromaticidad es lo que controla finalmente la selectividad del proceso. Cuando se produce la reacción sobre un enlace de tipo [6,6] se pierde la conjugación  $\pi$  de dos hexágonos y dos pentágonos, mientras que sobre un enlace [5,6] se pierde en tres hexágonos y un pentágono. Así pues, el hecho de que disminuya menos la aromaticidad en el caso de la adición sobre el enlace de tipo [5,6] es lo que controla la selectividad en el sistema hexaaniónico. De esta manera, y asumiendo el modelo iónico propuesto en este estudio, podríamos afirmar que la reactividad y la selectividad de los fullerenos endoédricos podría estar relacionada con la aromaticidad de los anillos presentes en la estructura del fullereno.



**Figura 9.** Reactividad de los enlaces [6,6] y [5,6] en la reacción de Diels-Alder entre el ciclopentadieno y el  $C_{60}^{n-}$  ( $n = 0-6$ ): a) Energías de reacción y b) Índice de aromaticidad MCI.

## Conclusiones

Los fullerenos son moléculas apasionantes con unas características químicas que las hacen potencialmente muy interesantes para futuras aplicaciones en el campo de la nanotecnología y la (bio)medicina. Conocer la reactividad de los fullerenos, y comprenderla, es un requisito indispensable para saber sus limitaciones y/o oportunidades. La química teórica juega un papel muy importante, sino decisivo, a la hora de entender la reactividad de los fullerenos, especialmente en el caso de los fullerenos endoédricos. A lo largo del artículo hemos visto que los clústeres metálicos u otros (grupos de) átomos encapsulados en el interior de la caja a menudo influyen drásticamente la reactividad y/o la regioselectividad del proceso.

Una parte del efecto de la encapsulación de átomos viene dada por la transferencia de electrones del clúster metálico hacia la caja, que provoca que la reactividad disminuya y la selectividad cambie. Y esto lo hemos demostrado recientemente a través del estudio que trata sobre el control electroquímico de la reactividad del  $C_{60}$ . Pero, por otra parte, está el efecto estérico de los átomos en el interior del fullereno, que induce a un cambio de la selectividad y reactividad: si no hay espacio suficiente disponible dentro de la caja, los átomos encapsulados producen una tensión. Esta tensión puede disminuir al producirse una reacción sobre un enlace de la superficie de la caja, que al reaccionar, se abre, y genera más espacio para poder alojar al clúster. Esto puede provocar cambios grandes sobre la reactividad tal y como hemos observado en el caso de  $Xe_2@C_{60}$  y  $Y_3N@C_{78}$ .

Aunque las tendencias en la reactividad de los diferentes enlaces no equivalentes en un mismo fullereno no se ven afectadas en gran medida por la elección del método computacional (DFT), para poder comparar directamente con datos experimentales es imprescindible incluir efectos de dispersión (DFT-D).

## Agradecimientos

Algunos de los estudios descritos han sido realizados en colaboración con Antonio Rodríguez-Fortea y Josep Maria Poblet (Univ. Rovira i Virgili, Tarragona). Agradecemos al Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN, proyectos CTQ2011-23156/BQU y CTQ2011-25086/BQU), al DIUE de la Generalitat de Catalunya (proyectos 2009SGR637 y 2009SGR528), y al MICINN y FEDER (Fondo Europeo de Desarrollo Regional) por la ayuda con referencia UNGI08-4E-003. SO agradece al Ministerio de Educación y Ciencia por una beca doctoral (AP2005-2992), y a la Comunidad Europea por una beca post-doctoral Marie Curie (PIOFGA-2009-252856). MGB agradece al Ministerio de Educación, Cultura y Deporte por una beca doctoral (AP2010-2517). M. Solà agradece el premio ICREA Academia 2009 financiado por el DIUE de la Generalitat de Catalunya. Los autores están agradecidos al Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS) y al Centro de Servicios Científicos y Académicos de Cataluña (CESCA) por los recursos computacionales, experiencia técnica y asistencia proporcionados.

## Bibliografía

1. H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, *Nature* **1985**, *318*, 162–163.
2. H. W. Kroto, *Nature* **1987**, *329*, 529–531.
3. J. R. Heath, S. C. O'Brien, Q. Zhang, Y. Liu, R. F. Curl, H. W. Kroto, F. K. Tittel, R. E. Smalley, *J. Am. Chem. Soc.* **1985**, *107*, 7779–7780.
4. <http://www.webelements.com>, visitada el 04/04/2013.
5. a) M. Saunders, H. A. Jiménez-Vázquez, R. J. Cross, R. J. Poreda, *Science* **1993**, *259*, 1428–1430. b) M. Saunders, R. J. Cross, H. A. Jiménez-Vázquez, R. Shimshi, A. Khong, *Science* **1996**, *271*, 1693–1697.
6. A. Khong, H. A. Jiménez-Vázquez, M. Saunders, R. J. Cross, J. Laskin, T. Peres, C. Lifshitz, R. Strongin, A. B. Smith, *J. Am. Chem. Soc.* **1998**, *120*, 6380–6383.
7. M. Murata, Y. Murata, K. Komatsu, *Chem. Commun.* **2008**, 6083–6094.
8. J. M. Campanera, C. Bo, J. M. Poblet, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2005**, *44*, 7230–7233.
9. a) D. B. Whitehouse, A. D. Buckingham, *Chem. Phys. Lett.* **1993**, *207*, 332–338. b) H. Hu, W. D. Cheng, S. P. Huang, Z. Xie, H. Zhang, *J. Theor. Comput. Chem.* **2008**, *07*, 737–749.
10. a) M. D. Diener, J. M. Alford, S. J. Kennel, S. Mirzadeh, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 5131–5138. b) M. D. Shultz, J. C. Duchamp, J. D. Wilson, C. Y. Shu, J. Ge, J. Zhang, H. W. Gibson, H. L. Fillmore, J. I. Hirsch, H. C. Dorn, P. P. Fatouros, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 4980–4981.
11. a) L. Dunsch, S. Yang, *Small* **2007**, *3*, 1298–1320. b) S. Laus, B. Sitharaman, É. Tóth, R. D. Bolskar, L. Helm, L. J. Wilson, A. E. Merbach, *J. Phys. Chem. C* **2007**, *111*, 5633–5639.
12. D. M. Guldi, L. Feng, S. G. Radhakrishnan, H. Nikawa, M. Yamada, N. Mizorogi, T. Tsuchiya, T. Akasaka, S. Nagase, M. A. Herranz, N. Martín, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 9078–9086.
13. a) J. L. Delgado, P. A. Bouit, S. Filippone, M. A. Herranz, N. Martín, *Chem. Commun.* **2010**, *46*, 4853–4865. b) D. M. Guldi, B. M. Illescas, C. M. Atienza, M. Wielopolski, N. Martín, *Chem. Soc. Rev.* **2009**, *38*, 1587–1597.
14. W. Harneit, *Phys. Rev. A* **2002**, *65*, 032322.
15. G. W. Wang, M. Saunders, R. J. Cross, *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *123*, 256–259.
16. T. Akasaka, T. Kato, K. Kobayashi, S. Nagase, K. Yamamoto, H. Funasaka, T. Takahashi, *Nature* **1995**, *374*, 600–601.
17. M. N. Chaur, F. Melin, A. L. Ortiz, L. Echegoyen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 7514–7538.
18. a) R. D. Bolskar, A. F. Benedetto, L. O. Husebo, R. E. Price, E. F. Jackson, S. Wallace, L. J. Wilson, J. M. Alford, *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 5471–5478. b) H. Kato, Y. Kanazawa, M. Okumura, A. Taninaka, T. Yokawa, H. Shinohara, *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 4391–4397. c) M. Mikawa, H. Kato, M. Okumura, M. Narazaki, Y. Kanazawa, N. Miwa, H. Shinohara, *Bioconjugate Chem.* **2001**, *12*, 510–514; d) J. Zhang, F. Li, X. Miao, J. Zhao, L. Jing, G. Yang, X. Jia, *Chem. Phys. Lett.* **2010**, *492*, 68–70.
19. Y. Maeda, J. Miyashita, T. Hasegawa, T. Wakahara, T. Tsuchiya, T. Nakahodo, T. Akasaka, N. Mizorogi, K. Kobayashi, S. Nagase, T. Kato, N. Ban, H. Nakajima, Y. Watanabe, *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 12190–12191.
20. M. Yamada, T. Akasaka, S. Nagase, *Acc. Chem. Res.* **2009**, *43*, 92–102.
21. S. Osuna, M. Swart, J. M. Campanera, J. M. Poblet, M. Solà, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 6206–6214.
22. G. te Velde, F. M. Bickelhaupt, E. J. Baerends, C. Fonseca Guerra, S. J. A. van Gisbergen, J. G. Snijders, T. Ziegler, *J. Comput. Chem.* **2001**, *22*, 931–967.
23. M. Swart, F. M. Bickelhaupt, *J. Comput. Chem.* **2008**, *29*, 724–734.
24. S. Osuna, M. Swart, M. Solà, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 129–139.
25. M. Garcia-Borràs, S. Osuna, J. M. Luis, M. Swart, M. Solà, *Chem. Eur. J.* **2012**, *18*, 7141–7154.
26. S. Osuna, M. Solà, M. Swart, **2013**, en preparación.
27. C. R. Wang, M. Inakuma, H. Shinohara, *Chem. Phys. Lett.* **1999**, *300*, 379–384.
28. C. R. Wang, T. Kai, T. Tomiyama, T. Yoshida, Y. Kobayashi, E. Nishibori, M. Takata, M. Sakata, H. Shinohara, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2001**, *40*, 397–399.
29. a) B. Cao, M. Hasegawa, K. Okada, T. Tomiyama, T. Okasaki, K. Suenaga, H. Shinohara, *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 9679–9680. b) K. Iwasaki, S. Hino, D. Yoshimura, B. Cao, T. Okasaki, H. Shinohara, *Chem. Phys. Lett.* **2004**, *397*, 169–173. c) R. Jaffiol, A. Débarre, C. Julien, D. Nutarelli, P. Tchénio, A. Taninaka, B. Cao, T. Okasaki, H. Shinohara, *Phys. Rev. B* **2003**, *68*, 014105.
30. A. Krapp, G. Frenking, *Chem. Eur. J.* **2007**, *13*, 8256–8270.
31. S. Osuna, M. Swart, M. Solà, *Chem. Eur. J.* **2009**, *15*, 13111–13123.
32. a) A. A. Popov, L. Dunsch, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 17726–17742. b) S. Stevenson, G. Rice, T. Glass, K. Harich, F. Cromer, M. R. Jordan, J. Craft, E. Hadju, R. Bible, M. M. Olmstead, K. Maitra, A. J. Fisher, A. L. Balch, H. C. Dorn, *Nature* **1999**, *401*, 55–57. c) S. F. Yang, A. A. Popov, L. Dunsch, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 8196–8200.
33. S. Osuna, R. Valencia, A. Rodríguez-Forteza, M. Swart, M. Solà, J. M. Poblet, *Chem. Eur. J.* **2012**, *18*, 8944–8956.
34. T. Cai, L. Xu, M. R. Anderson, Z. Ge, T. Zuo, X. Wang, M. M. Olmstead, A. L. Balch, H. W. Gibson, H. C. Dorn, *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 8581–8589.
35. S. Osuna, M. Swart, M. Solà, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, *13*, 3585–3603.
36. S. Osuna, A. Rodríguez-Forteza, J. M. Poblet, M. Solà, M. Swart, *Chem. Commun.* **2012**, *48*, 2486–2488.
37. M. Garcia-Borràs, A. Romero-Rivera, S. Osuna, J. M. Luis, M. Swart, M. Solà, *J. Chem. Theory Comput.* **2012**, *8*, 1671–1683.
38. a) S. Grimme, *J. Comput. Chem.* **2006**, *27*, 1787–1799. b) S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, H. Krieg, *J. Chem. Phys.* **2010**, *132*, 154104.
39. S. Osuna, M. Swart, M. Solà, *J. Phys. Chem. A* **2011**, *115*, 3491–3496.
40. M. Garcia-Borràs, J. M. Luis, M. Swart, M. Solà, *Chem. Eur. J.* **2013**, *19*, 4468–4479.
41. M. Garcia-Borràs, S. Osuna, M. Swart, J. M. Luis, M. Solà, *Chem. Commun.* **2013**, *49*, 1220–1222.

# Almacenamiento geológico de CO<sub>2</sub>: una solución para la mitigación del cambio climático

Cecilia Galarza

**Resumen:** En este artículo se pretende proporcionar una visión global sobre el proceso de almacenamiento geológico de CO<sub>2</sub> así como de las posibles interacciones geoquímicas que tienen lugar, desde las primeras etapas de la inyección, interaccionando dicho gas con los materiales del pozo; hasta interacciones más a largo plazo con la roca almacén, donde el CO<sub>2</sub> permanecerá retenido precipitando como mineral secundario, y con la roca sello, la cual tiene como misión evitar que el CO<sub>2</sub> se fugue hasta la superficie o hacia acuíferos superiores contaminándolos y limitando su utilización como agua para el consumo humano.

**Palabras clave:** Dióxido de carbono, geoquímica, almacenamiento, salmuera, monitorización.

**Abstract:** The aim of this article is to provide an overview of geological storage of carbon dioxide, and the possible geochemical interactions occurring from the earliest injection stages, interacting with the materials of the well; to long-term interactions with the reservoir rock, where the CO<sub>2</sub> will be retained as a secondary precipitated mineral, and with the caprock which role is to prevent CO<sub>2</sub> leakages from the storage site to the surface and avoid contamination of shallow potable groundwater.

**Keywords:** Carbon Dioxide, geochemistry, storage, brine, monitoring.

## Introducción

### Efecto invernadero y cambio climático

En la actualidad continúa abierto el debate científico sobre el origen del calentamiento global del planeta, así como de los efectos que pueda tener a corto y largo plazo. Según el IPCC<sup>1</sup> (Intergovernmental Panel of Climate Change), el término “cambio climático” *denota un cambio en el estado del clima identificable a raíz de un cambio en el valor medio y/o en la variabilidad de sus propiedades, y que persiste durante un periodo prolongado, generalmente cifrado en decenios o en periodos más largos. Denota todo cambio del clima a lo largo del tiempo, tanto si es debido a la variabilidad natural como si es consecuencia de la actividad humana.* Este grupo de expertos ha aportado datos y resultados en los que se observa un aumento de la temperatura media mundial de la superficie desde 1861 y durante el siglo XX de 0,6 + 0,2°C. Por otro lado, se han observado concentraciones crecientes de ciertos gases denominados *Gases de Efecto Invernadero* (GEI) en la atmósfera, lo cual se relaciona, muy probablemente, con el aumento antes mencionado de la temperatura media global.

Las moléculas susceptibles de absorber radiación infrarroja (IR), contribuyendo al efecto invernadero, son aquellas que presentan modos normales de vibración con energía comprendida dentro del espectro de la radiación IR emitida por la superficie terrestre. El número de modos normales de vibración de una molécula de N átomos, es 3N-5 si dicha molécula es lineal y 3N-6 si la molécula no es lineal (las moléculas diatómicas solo tienen un modo normal de vibración por lo que contribuyen poco al efecto invernadero). Según esto, los gases que contribuyen en mayor medida al efecto invernadero son CO<sub>2</sub> (lineal), vapor de agua (angular), N<sub>2</sub>O (angular), CH<sub>4</sub> (tetraédrica), O<sub>3</sub> (angular), los freones (tetraédrica) y probablemente más gases que hoy en día no se encuentran localizados.

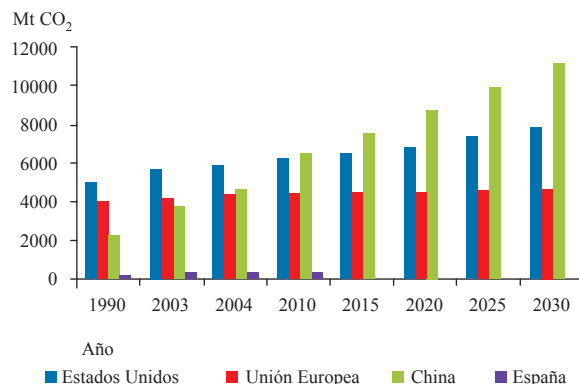
De estos gases, el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) es el que, antropogénicamente, más ha aumentado en los últimos años, incrementándose sus emisiones anuales un 80% entre 1970 y 2004, e incluso se prevé que dichas emisiones sigan en aumento (Figura 1).<sup>2</sup>



C. Galarza

CIEMAT. Unidad de Geología Ambiental Aplicada.  
Avda. Complutense, 40- 28040 Madrid.  
C-e: [cecilia.galarza@ciemat.es](mailto:cecilia.galarza@ciemat.es)

**Recibido:** 12/11/2012. **Aceptado:** 21/02/2013.



**Figura 1.** Valores históricos y previstos de emisiones de CO<sub>2</sub> en Estados Unidos, Unión Europea, China y España. Fuente: Inventario de Gases de Efecto Invernadero de España 1990-2005 (Ministerio de Medio Ambiente).<sup>2</sup>

La principal causa de este aumento son las emisiones de CO<sub>2</sub> derivadas del uso de combustibles fósiles. Aproximadamente la mitad de las emisiones antropogénicas tienen un sumidero natural en las aguas superficiales oceánicas, donde lentamente se van mezclando con las aguas más profundas para formar el CaCO<sub>3</sub> de acuerdo con el ciclo del carbono. Sin embargo, al aumentarse también la temperatura del mar, la solubilidad del CO<sub>2</sub> en el agua disminuye y el océano ya no resulta tan buen sumidero.

### Soluciones para la mitigación. Captura y almacenamiento de CO<sub>2</sub> (CAC)

El modelo energético mundial lleva décadas basándose en el uso de combustibles fósiles (hasta en un 80% actualmente) como fuente de energía primaria para la generación, principalmente, de energía eléctrica. Sin embargo, a finales del siglo XX, su uso comienza a ser cuestionado debido a los efectos medioambientales anteriormente expuestos y al agotamiento de las reservas naturales de petróleo, gas natural y carbón.

Para intentar mitigar el problema del cambio climático, se han llevado a cabo una serie de medidas internacionales, como el Protocolo de Kyoto, firmado por numerosos países en 1997 y cuyo objetivo es limitar globalmente las emisiones de los GEI. En el año 2002, el Parlamento Español aprobó, por unanimidad, la ratificación del Protocolo de Kyoto y, posteriormente, el entonces Ministerio de Medio Ambiente presentó a la Unión Europea el Plan Nacional de Asignación de Emisiones. En 2005 comenzó a funcionar el denominado mercado de emisiones de GEI, el cual fijó los costes que se deberán pagar por superar las cuotas asignadas de emisión.

Una fuente alternativa de energía primaria son las energías renovables, que juegan un papel fundamental en el desarrollo de tecnologías capaces de mitigar el cambio climático. La implantación de dichas energías ha aumentado rápidamente en los últimos años, llegando a contribuir en un 11% sobre el consumo bruto de energía final en España en 2010 (Figura 2). Aunque esta cifra podría aumentar hasta un 30% en 2030, todas las previsiones apuntan que, en un futuro próximo, la energía primaria más utilizada seguirá siendo la procedente de combustibles fósiles.<sup>3</sup>

Por eso, mientras se siguen desarrollando nuevas tecnologías para la generación de energía eléctrica, a la vez que se posibilita la continuidad en el uso de los combustibles fósiles, la solución actualmente más práctica, inmediata e internacionalmente aceptada, para conseguir los objetivos de reducción de emisiones de CO<sub>2</sub> según los compromisos internacionales derivados del Protocolo de Kyoto, se basa en su captura y almace-

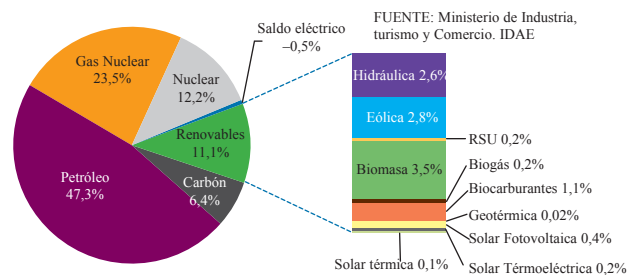


Figura 2. Consumo de Energía primaria en España. Fuente: Ministerio de Industria, Turismo y Comercio<sup>3</sup>. IDAE.

namiento (CAC). De hecho, según la Propuesta de Directiva del Parlamento Europeo y del Consejo<sup>4</sup> (23.1.2008), *no se podrá reducir en un 50% las emisiones de CO<sub>2</sub> de la UE o mundiales de aquí a 2050 si no se utiliza la posibilidad de capturar el CO<sub>2</sub> emitido por las instalaciones industriales y almacenarlo en formaciones geológicas (captura y almacenamiento de dióxido de carbono o CAC).*

La captura y almacenamiento de CO<sub>2</sub> consiste en captar el dióxido de carbono emitido por las industrias (separado de los demás gases), transportarlo a un emplazamiento para su almacenamiento y finalmente inyectarlo y confinarlo en una formación geológica subterránea de forma permanente (Figura 3).<sup>1</sup>

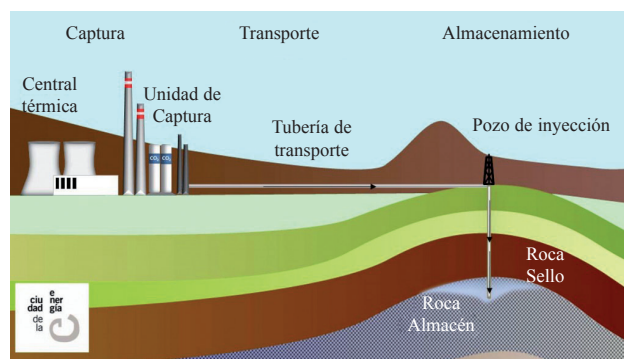


Figura 3. Esquema del proceso completo de Captura y Almacenamiento de CO<sub>2</sub>. Adaptado de referencia 7.

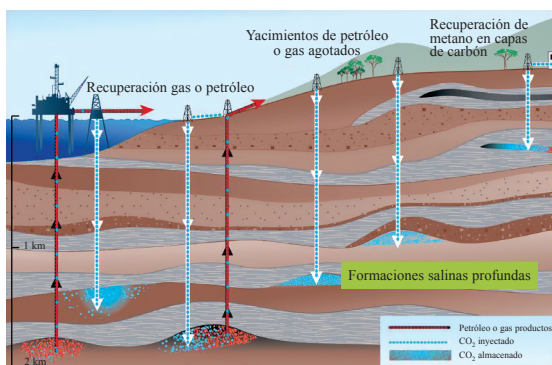
Esta es una de las opciones de almacenamiento de CO<sub>2</sub>, pero existen otras como la carbonatación mineral y el almacenamiento oceánico; sin embargo, la que más posibilidades de uso industrial tiene en España es el almacenamiento en formaciones geológicas profundas.

Este tipo de almacenamiento puede llevarse a cabo en distintas formaciones (Figura 4):<sup>1</sup>

- **Yacimientos de petróleo y gas.** Basándose en la seguridad del almacén, ya que ambas materias primas han permanecido atrapadas durante millones de años.
- **Capas de carbón inexplorables.** Consistente en la extracción de metano (capturándolo a continuación para que no sea emitido a la atmósfera), inyectando en su lugar el CO<sub>2</sub>.
- **Formaciones salinas profundas.** Este tipo de formaciones están compuestas por rocas sedimentarias porosas y permeables que contienen fluidos salinos en sus poros y que no han sido contaminados por aguas meteóricas. Deben encontrarse estructuralmente aisladas y a profundidades mayores que las formaciones que contienen agua dulce destinadas al consumo humano.

Dada la gran escasez de yacimientos de petróleo y gas en España, y que la técnica de captura en capas de carbón supone un elevado coste (se necesita un gran número de sondeos) así como una importante pérdida económica (el yacimiento de carbón queda inservible para el futuro), el tipo de almacén seleccionado para el desarrollo de este tipo de tecnologías en nuestro país, es el de las formaciones salinas profundas.

Internacionalmente, existen en funcionamiento varios proyectos de almacenamiento, a escala industrial (es decir, del



**Figura 4.** Métodos para almacenar CO<sub>2</sub> en formaciones geológicas subterráneas profundas (Modificado de IPCC, 2005<sup>1</sup>).

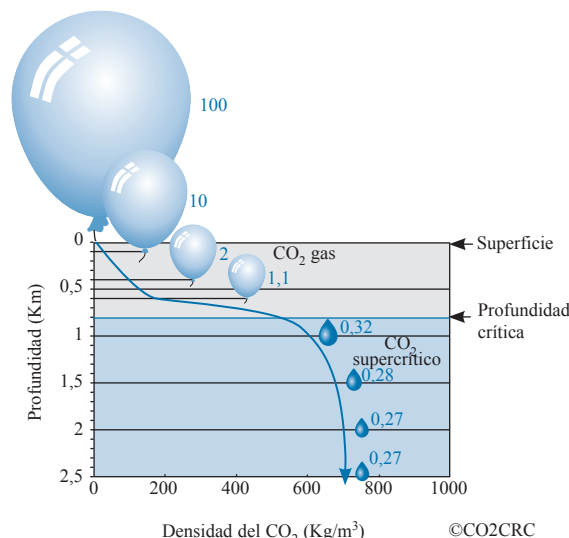
orden de 1 Tm de CO<sub>2</sub> al año). Entre estos proyectos cabe destacar<sup>5</sup>: el proyecto Sleipner en una formación salina marítima situada en Noruega, el proyecto Weyburn consistente en la recuperación mejorada de petróleo en Canadá y el proyecto In Salah que almacena el CO<sub>2</sub> en un yacimiento de gas en Argelia.

En cuanto al estado actual en España, la Fundación Ciudad de la Energía (CIUDEN) y Endesa, lideran el desarrollo de las tecnologías de CAC aplicándolo a las centrales termoeléctricas. El proceso principal de captura se basa en la oxicomustión en lecho fluido circulante<sup>6,7</sup>, situándose el centro en desarrollo en Cubillos del Sil (León). En cuanto a la etapa de almacenamiento, se está creando una planta piloto de desarrollo tecnológico en Hontomín (Burgos), cuya ubicación ha sido seleccionada por las óptimas características geológicas de la formación.

### Almacenamiento geológico profundo de CO<sub>2</sub>

El secuestro o almacenamiento a largo plazo de CO<sub>2</sub> se debe llevar a cabo en condiciones óptimas para lo cual se exigen una serie de requisitos que debe cumplir un emplazamiento para poder ser considerado como potencial almacén de CO<sub>2</sub>. Entre estos requisitos cabe destacar<sup>8,9</sup>:

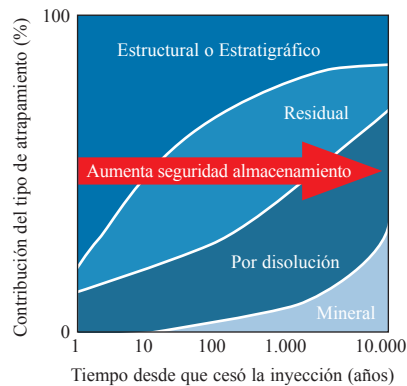
- **Profundidad.** Deberá ser de al menos 800 metros, donde la temperatura y la presión de almacenamiento son las propicias para que el CO<sub>2</sub> se encuentre en estado supercrítico (31,1°C y 7,38 MPa). En dicho estado, el volumen específico del CO<sub>2</sub> se reduce considerablemente, haciendo que sea posible almacenar mayores cantidades de CO<sub>2</sub> por cada m<sup>3</sup> de roca (Figura 5).
- **Porosidad y permeabilidad.** La roca hospedante debe ser porosa y permeable para garantizar la capacidad de almacenamiento e inyectividad del CO<sub>2</sub>; mientras que la roca sello (situada por encima de la roca almacén) debe ser lo más impermeable posible para evitar las fugas hacia la superficie, quedando de esta manera atrapado el CO<sub>2</sub> **estructural o estratigráficamente** (principal mecanismo de almacenamiento geológico de CO<sub>2</sub>).
- **Salinidad de la salmuera de la formación.** El agua de la formación no debe ser un recurso explotable para el consumo humano, por tanto, la salinidad deberá ser elevada (mayor a 10 g/L que es el valor mínimo para que un acuífero no sea considerado como recurso hídrico<sup>11</sup>), pero teniendo en cuenta que la solubilidad del CO<sub>2</sub> disminuye al aumentar la salinidad, reduciéndose así el volumen almacenado.



**Figura 5.** Aumento de la efectividad del almacenamiento con la profundidad (modificado de CO2CRC<sup>10</sup>).

- La estructura geológica debe ser estable **sin fallas o fracturas** con el fin de minimizar el riesgo de fugas del CO<sub>2</sub> inyectado. Asimismo deber estar situada en zonas de **baja o nula actividad sísmica**.

Una vez que el CO<sub>2</sub> es inyectado en la estructura geológica seleccionada, se producirán una serie de fenómenos, tanto físicos como geoquímicos, por los que dicho gas quedará retenido en el subsuelo. Los principales mecanismos son<sup>12</sup>: **atrapamiento estructural o estratigráfico** (retención física que evita el desplazamiento vertical del CO<sub>2</sub> y que es proporcionada por la capa impermeable denominada roca sello), **atrapamiento residual** (no existe un espacio de poro suficiente para que el CO<sub>2</sub> ascienda, a pesar de la diferencia de densidad con el agua circundante), **atrapamiento por disolución** (el CO<sub>2</sub> inyectado se disuelve en la salmuera, haciéndola más pesada, por lo que tiende a moverse hacia el fondo del almacén) y **atrapamiento mineral** (formación de minerales carbonatados debido a la liberación de cationes metálicos como el Mg, Ca y Fe, procedentes de la disolución de la matriz de la roca, debido al descenso de pH provocado por la disolución del CO<sub>2</sub> en la salmuera). La combinación de estos mecanismos físicos y geoquímicos de atrapamiento influirán en la eficacia del almacenamiento a lo largo del tiempo (Figura 6).



**Figura 6.** Seguridad del almacenamiento en función del tipo de atrapamiento (modificado de IPCC<sup>1</sup>).

## Reacciones químicas implicadas

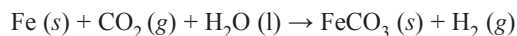
Antes de implementar la tecnología de CAC a mayor escala es crucial confirmar su viabilidad y seguridad a largo plazo, tanto para el ser humano como para el medio ambiente<sup>13</sup>. Es importante el estudio de las interacciones del CO<sub>2</sub> con los distintos materiales que discurren a lo largo de un almacenamiento geológico de CO<sub>2</sub>, como son los materiales del pozo de inyección, las rocas almacén y sello, la salmuera del reservorio, etc. Igualmente, es imprescindible detectar las posibles vías de fuga del CO<sub>2</sub> inyectado, con el fin de prevenirlas y vigilarlas mediante técnicas de monitorización.

## Interacciones entre el CO<sub>2</sub> y los materiales del pozo de inyección

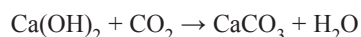
El CO<sub>2</sub> se inyecta a través de un sistema de inyección que consta, entre otras instalaciones, del propio pozo de inyección. Los materiales de los que habitualmente están compuestos son: acero al carbón, para la tubería de revestimiento; y cemento convencional como el Portland para rellenar el espacio existente entre el pozo y la formación de roca, así como para el sellado tras su abandono.<sup>13</sup>

La integridad del pozo de inyección es de vital importancia para asegurar el almacenamiento a largo plazo, por lo que es necesario estudiar las posibles reacciones que puedan tener lugar al inyectar el CO<sub>2</sub> en las condiciones de almacenamiento. Dichas reacciones pueden afectar a la estabilidad de los materiales del pozo, expuesto a un ambiente rico en CO<sub>2</sub>, generando problemas en la tubería de acero y en el cemento de sellado (comúnmente cemento Portland).<sup>14</sup> Las posibles reacciones son:

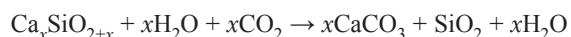
- **Corrosión del acero.** El acero lleva usándose ampliamente en la industria del petróleo, sin embargo sufren procesos de corrosión cuando se someten a ambientes ricos en cloruros y CO<sub>2</sub>.<sup>14</sup> Inicialmente, y debido a la elevada alcalinidad del cemento (pH entre 12,5 y 13,5), se forma una capa estable de óxido pasivo en la superficie del acero, protegiéndolo de la corrosión. Una vez se inyecta el CO<sub>2</sub>, éste reacciona con productos de hidratación del cemento, como el Ca(OH)<sub>2</sub>, provocando una disminución del pH hasta valores inferiores a 9, e induciendo a la pérdida de la película protectora del acero dejándolo, por tanto, expuesto a procesos de corrosión. El principal producto de corrosión del acero es el FeCO<sub>3</sub><sup>15</sup> formado según la siguiente reacción electroquímica:



- **Carbonatación del cemento.** El CO<sub>2</sub> reacciona fácilmente con las fases C-S-H (denominación común a las fases de silicatos de calcio hidratados) presentes en el cemento Portland (que como ya se ha mencionado es el empleado habitualmente para la fabricación y consolidación de los pozos<sup>16,17</sup>). Dichas interacciones podrán dar lugar a la formación de calcita, dolomita y sílice amorfa según las siguientes reacciones:



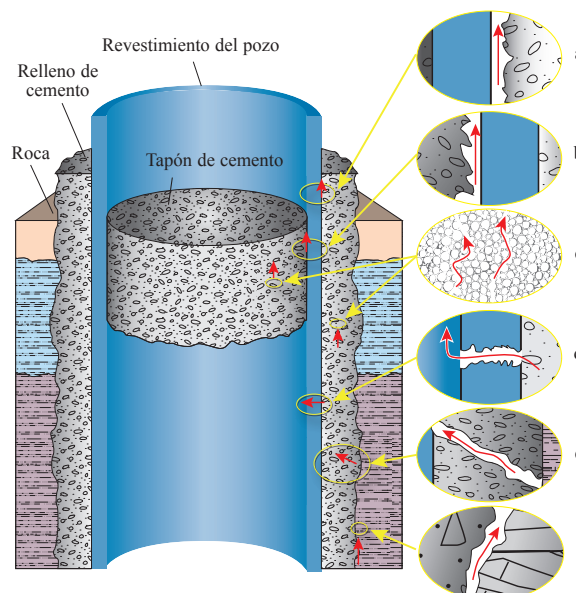
*Portlandita*                      *Calcita*



*Fase C-S-H*                      *Calcita*                      *Sílice amorfa*

Estas reacciones de carbonatación provocan cambios en la porosidad, densidad y textura del material, lo que podría afectar a la integridad del pozo, si bien serán relativamente lentas, debido a la baja permeabilidad y porosidad del cemento Portland.<sup>18</sup> Por otro lado, uno de los problemas de mayor envergadura que podrían afectar a la estructura del pozo es la posibilidad de que el CO<sub>2</sub> provoque alguna fractura o fisura durante los cambios de presión y temperatura en las operaciones de inyección.<sup>16</sup>

La degradación del pozo puede desencadenar en una serie de fugas de CO<sub>2</sub> a través de varias posibles vías, como por ejemplo entre la unión del cemento y la roca de la formación, o entre el cemento y la tubería de revestimiento a través de las propias fracturas del cemento (Figura 7).



**Figura 7.** Posibles vías de escape del CO<sub>2</sub> en un pozo de inyección. Escape por el material alterado (c, d, e) o a través de las interfaces (a, b, f) (modificado de Nordbotten et al. 2005).<sup>19</sup>

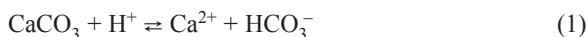
## Interacciones entre el CO<sub>2</sub>, roca almacén o sello y la salmuera

El estudio de este tipo de interacciones permite predecir la capacidad del reservorio de atrapar permanentemente el CO<sub>2</sub> en fase mineral, o lo que es lo mismo, la capacidad que tiene para que se produzca el atrapamiento mineral. Las reacciones resultantes de interacción CO<sub>2</sub>-roca-salmuera están controladas por una serie de parámetros, como son la presión y temperatura del sistema, la mineralogía de la roca, la composición química del fluido entre poros y el contacto superficial entre la roca y dicho fluido. Además, dichas interacciones, podrían afectar a parámetros como la porosidad y la permeabilidad o la inyectividad,<sup>20</sup> pudiendo bloquear las vías preferentes de flujo (en el caso de la roca almacén) o generar fugas, en el caso de un aumento excesivo de la porosidad/permeabilidad de la roca sello. Esto podría producir, incluso, la contaminación de los acuíferos superiores que constituyan posibles recursos hídricos de la zona.

La primera reacción que tiene lugar es la disolución del  $\text{CO}_2$  inyectado en la salmuera, provocando su acidificación según la reacción:



Estudios experimentales<sup>21,22</sup> han demostrado que al añadir  $\text{CO}_2$  supercrítico al sistema salmuera-roca, el contenido en ácido carbónico aumenta, provocando, por tanto, una disminución del pH de la disolución (con valores en torno a 3,5 y 4, en función de la composición química de la salmuera, formación litológica y la temperatura). Esta acidez favorece el ataque de minerales carbonatados, como la calcita, según la reacción (1), induciendo, en algunas condiciones, la precipitación de otras fases minerales, como el yeso o la anhidrita (2), al interactuar con los sulfatos presentes en la salmuera.

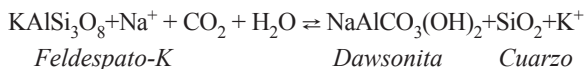
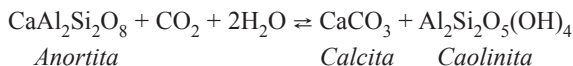
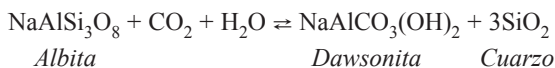


Estas reacciones son cinéticamente rápidas, pudiendo alcanzar el equilibrio en pocas horas a temperatura ambiente. A día de hoy, se dispone de resultados de plantas experimentales de inyección de  $\text{CO}_2$ , como por ejemplo de la formación Frio (Texas), donde a pocos meses de la inyección se han observado variaciones muy significativas en valores de alcalinidad (de 100 a 3000 mg/L de bicarbonato), del pH, del contenido total de calcio, así como un aumento en la concentración de metales como el hierro y el manganeso.<sup>23</sup>

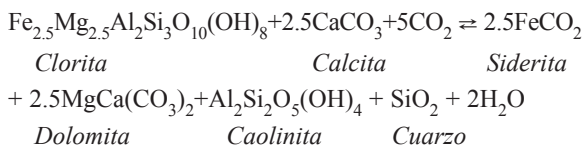
Otros autores<sup>22,24-26</sup> han desarrollado una serie de experimentos bajo condiciones de presión y temperatura propias de un almacenamiento geológico de  $\text{CO}_2$  (o incluso mayores), donde la disolución de la roca almacén, y la consecuente precipitación de minerales, son los mecanismos que dictan el atrapamiento mineral del  $\text{CO}_2$  inyectado.

En alguno de estos estudios se concluye que, aun habiéndose tamponado el pH, por efecto de la disolución de carbonatos, es posible que la acidez de la salmuera pueda ser suficiente para atacar los minerales aluminosilicatados (arcillas y feldespatos) presentes en las rocas sedimentarias. Esto favorecería un atrapamiento mineral permanente, al actuar los aluminosilicatos como donadores de protones, favoreciendo la precipitación de carbonatos secundarios. A continuación se muestran algunos ejemplos de alteración de silicatos.<sup>24,27-30</sup>

- Alteración de feldespatos:



- Alteración de arcillas:



Atendiendo a todo lo expuesto anteriormente, es fácil de entender entonces la necesidad de realizar una caracterización completa y detallada del emplazamiento que se vaya a seleccionar para llevar a cabo la inyección del  $\text{CO}_2$ ; caracterización que conlleva el estudio de las propiedades (físicas y químicas) de las rocas almacén y sello, así como el análisis químico de la salmuera confinada en el subsuelo.

Igualmente destacar la importancia de los trabajos de modelización con distintos códigos tanto geoquímicos (PHREEQC)<sup>34</sup> como de transporte reactivo (TOUGHREACT)<sup>35</sup>, desarrollados por algunos autores<sup>31-32,33</sup> con la finalidad de predecir el comportamiento a largo plazo de los distintos materiales, involucrados en un almacenamiento geológico de  $\text{CO}_2$  frente a los procesos anteriormente descritos. El objeto de dicha modelización es evaluar la capacidad, viabilidad, integridad y seguridad del emplazamiento. El estudio de las interacciones geoquímicas, mediante códigos geoquímicos, es importante ya que muchas reacciones que se prevén, presentan cinéticas de reacción lentas (las reacciones con aluminosilicatos a bajas temperaturas pueden ser de miles de años), siendo por tanto difícilmente observables a escala temporal de laboratorio.

## Monitorización de posibles fugas de $\text{CO}_2$

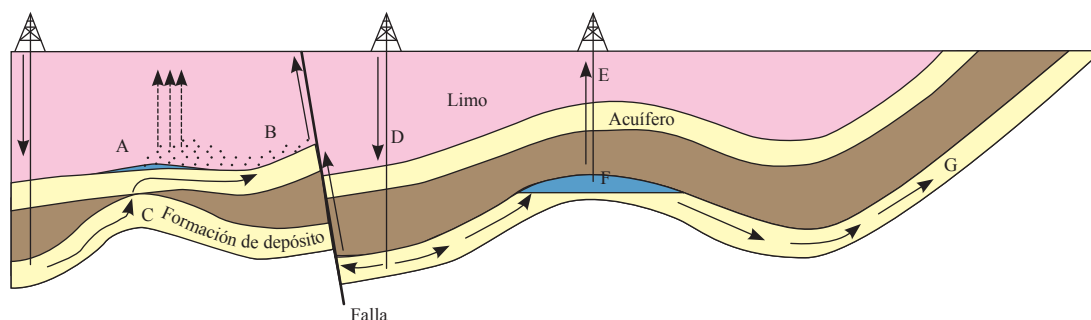
Mediante la monitorización se pretende garantizar la seguridad y estabilidad del  $\text{CO}_2$  inyectado y retenido en el subsuelo. Para ello, es necesario determinar cuáles son las posibles vías de fuga del  $\text{CO}_2$  con objeto de establecer los parámetros, tanto físicos como químicos, que son necesarios controlar en las distintas etapas: pre-operacional, operacional, clausura e incluso, la post-clausura.

Existen dos tipos de vías de fuga potenciales del  $\text{CO}_2$  inyectado: unas son de origen antropogénico, como son los pozos profundos (ya sean operativos o abandonados) y otras son de origen natural, como pueden ser pequeñas fracturas o fallas de la corteza terrestre. También puede ocurrir que el  $\text{CO}_2$  disuelto en el fluido poroso sea transportado fuera del almacén debido a la circulación natural de dicho fluido.

Como se ha expuesto anteriormente, los pozos de inyección están constituidos por materiales corrosivos en ambientes ricos en  $\text{CO}_2$  y sales, por lo que es necesario un plan de monitorización del pozo. Este tipo de fuga generaría una rápida y repentina liberación del  $\text{CO}_2$  por lo que se detectaría rápidamente pudiéndose atajar sin generar ningún problema a largo plazo.

En cuanto a las vías de fuga naturales (fallas o pequeñas fracturas), los posibles peligros están relacionados principalmente con impactos medioambientales, como por ejemplo fugas de  $\text{CO}_2$  hacia acuíferos subterráneos. Esto provocaría cambios en la composición del agua al acidificarse, ya que los minerales presentes en el acuífero se disolverían, movilizándolo, además, metales pesados y otros elementos tóxicos. Las fugas graduales a favor de las estructuras mencionadas, podrían provocar la contaminación de los acuíferos superiores a las formaciones de almacenamiento, tanto por el  $\text{CO}_2$  inyectado como por la penetración de la salmuera directamente por el  $\text{CO}_2$  inyectado o incluso por la penetración de la salmuera de la formación almacén, debido a su desplazamiento en relación con el proceso de inyección.





## Mecanismos de escape potenciales

<b>A.</b> La presión del gas de CO <sub>2</sub> supera a la presión capilar y atraviesa el limo	<b>B.</b> CO <sub>2</sub> libre se filtra desde A hasta el acuífero superior a través de la falla	<b>C.</b> Fuga de CO <sub>2</sub> a través de la 'brecha' en la roca de cubierta hacia el acuífero superior	<b>D.</b> El CO <sub>2</sub> inyectado asciende por la depresión aumentada la presión del depósito y la permeabilidad de la falla	<b>E.</b> Escape de CO <sub>2</sub> por un viejo pozo abandonado mal sellado	<b>F.</b> Flujo natural disuelve el CO <sub>2</sub> en la interfaz de separación CO <sub>2</sub> /agua y lo transporta fuera del cierre	<b>G.</b> El CO <sub>2</sub> disuelto escapa a la atmósfera o al océano
---	---	---	---	--	---	---

## Medidas de saneamiento

<b>A.</b> Extraer y depurar aguas subterráneas	<b>B.</b> Extraer y depurar aguas subterráneas	<b>C.</b> Eliminar CO <sub>2</sub> y reinjectarlo en otro lugar	<b>D.</b> Índices o presiones de inyección inferiores	<b>E.</b> Volver a sellar debidamente con cemento	<b>F.</b> Interceptar y reinjectar CO <sub>2</sub>	<b>G.</b> Interceptar y reinjectar CO <sub>2</sub>
--	--	---	---	---	--	--

Figura 8. Posibles vías de fuga y medidas de saneamiento para el CO<sub>2</sub> inyectado en formaciones salinas. (Modificado de CO2CRC).<sup>10</sup>

Otro posible impacto medioambiental que podría tener lugar en este escenario, es la llegada a superficie del CO<sub>2</sub> inyectado, pudiendo provocar efectos como la acidificación de los suelos o, incluso, un efecto letal para la vegetación por encima de un cierto umbral de concentración. Para ello, se utilizan sensores de CO<sub>2</sub> en superficie que miden directamente la concentración del gas tanto en la atmósfera como en el suelo. De esta manera se pueden monitorizar posibles fugas hacia la biosfera y atmósfera con el fin de evitar riesgos para la salud. Igualmente es conveniente llevar a cabo un plan de saneamiento para actuar de manera más eficaz si ocurre alguna de las posibles fugas de CO<sub>2</sub> (Figura 8).

En cuanto a los posibles impactos en los seres humanos, destacar que el CO<sub>2</sub> está presente en la atmósfera y es exhalado diariamente, lo cual da idea de su baja toxicidad, siempre y cuando no se encuentre en concentraciones elevadas.

## Conclusiones

El desarrollo de una alternativa energética sólida, respetuosa con el medio ambiente, capaz de sustituir a los combustibles fósiles, es uno de los grandes objetivos del siglo XXI. Mientras tanto, la solución actualmente más práctica, inmediata e internacionalmente aceptada, para conseguir los objetivos de mitigación del cambio climático así como el de disminuir las emisiones de CO<sub>2</sub> antropogénico a la atmósfera, se basa en las tecnologías de Captura y Almacenamiento de CO<sub>2</sub>. Antes de implementar estas tecnologías a gran escala natural es importante estudiar las distintas interacciones que puedan tener lugar entre el CO<sub>2</sub> y los distintos materiales presentes en un almacenamiento geológico, llevando a cabo distintas experimentaciones a escala de laboratorio para confirmar su viabilidad a largo plazo.

Igualmente, es imprescindible programar un buen plan de monitorización y vigilancia de las posibles fugas del CO<sub>2</sub> inyectado con el fin de garantizar y verificar su seguridad y estabilidad con el tiempo.

## Agradecimientos

C. Galarza agradece al CIEMAT por la concesión de una beca de Formación de Personal Investigador y a la Dra. Belén Buil por su ayuda en la preparación de este artículo.

## Bibliografía

1. *The Intergovernmental Panel of Climate Change (IPCC), Carbon Dioxide Capture and Storage*, Cambridge University Press, **2005**.
2. *Inventario de Gases de Efecto Invernadero de España 1990-2005*. Ministerio de Medio Ambiente.
3. Consumo de Energía primaria en España. Fuente: Ministerio de Industria, Turismo y Comercio. IDEA.
4. Propuesta de Directiva del Parlamento Europeo y del Consejo (23.1.2008) relativa al almacenamiento geológico de dióxido de carbono y por la que se modifican las Directivas del Consejo 85/337/CEE y 96/61/CE, y las Directivas 200/60/CE, 2001/80/CE, 2004/35/CE, 2006/12/CE y el Reglamento (CE) n°1013/2006.
5. K. Michael, A. Golab, V. Shulakova, J. Ennis-King, G. Allison, S. Sharma, T.Aitken, *Int. J. Greenhouse Gas Control* **2010**, *4*, 659–667.
6. M. Lupion, R. Diego, L. Loubeau, B. Navarrete, *Energy Procedia* **2011**, *4*, 5639–5646.
7. Proyecto OXYCFB300. [www.compostillaproject.es](http://www.compostillaproject.es), visitada el 26/02/2013.

8. C. Ruiz, R. Martínez, F. Recreo, P. Prado, R. Campos, M. Pelayo, A. de la Losa, A. Hurtado, L. Lomba, L. Pérez del Villar, G. Ortiz, J. Sastre, M.A. Zapatero, I. Suárez, A. Arenillas. Informe Técnico CIEMAT 1106. **2007**.
9. S. Bachu, *Energy Conversion Management* **2000**, *41*, 953–970.
10. The Cooperative Research Centre for Greenhouse Gas Technologies (CO2CRC). [www.co2crc.com.au](http://www.co2crc.com.au), visitada el 26/02/2013.
11. Underground Source of Drinking Water, USDW. <http://1.usa.gov/ZHjcFa>, visitada el 26/02/2013.
12. S. Bachu, W. D. Gunter, E. H. Perkins, *Energy Conversion Management* **1994**, *35*, 269–279.
13. S. Holloway, A. Karimjee, M. Akai, R. Pipatti, K. Rypday. *Directrices del IPCC de 2006 para los inventarios nacionales de gases de efecto invernadero*. Vol. 2. Capítulo 5.
14. J. W. Carey, R. Svec, R. Grigg, P. C. Lichtner, J. Zhang, W. Crow, *Energy Procedia* **2009**, *1*, 3609–3615.
15. K. S. George, S. Nestic. *Corrosion* **2007**, *63*, 178–186.
16. M. Wigand, J. P. Kaszuba, J. W. Carey, W. K. Hollis, *Chem. Geol.* **2009**, *265*, 122–133.
17. V. Barlet-Gouédard, G. Rimmelé, O. Porcherie, N. Quisel, J. Desroches, *Int. J. Greenhouse Gas Control* **2009**, *3*, 206–216.
18. B. G. Kutchko, B. R. Strazisar, D. A. Dzombak, G. V. Lowry, N. Thaulow, *Environ. Sci. Technol.* **2007**, *41*, 4787–4792.
19. J. Nordbotten, M. A. Celia, S. Bachu, H. K. Dahle, *Environ. Sci. Technol.* **2005**, *39*, 602–611.
20. T. Xu, J. A. Apps, K. Pruess, *Appl. Geochem.* **2004**, *19*, 917–936.
21. J. P. Kaszuba, D. R. Janecky, M. G. Snow, *Appl. Geochem.* **2003**, *18*, 1065–1080.
22. J. P. Kaszuba, D. R. Janecky, M. G. Snow, *Chem. Geol.* **2005**, *217*, 277–293.
23. Y. K. Kharaka, D. R. Cole, J. J. Thordsen, E. Kakouros, H. S. Nance, *J. Geochem. Explor.* **2006**, *89*, 183–186.
24. R. J. Rosenbauer, T. Koksalan, J. L. Palandri, *Fuel Process. Technol.* **2005**, *86*, 1581–1597.
25. P. Bertier, R. Swennen, B. Laenen, D. Lagrou, R. Dreesen, *J. Geochem. Explor.* **2006**, *89*, 10–14.
26. K. Bateman, C. Rochelle, A. Lacinska, D. Wagner, *Energy Procedia* **2010**, *4*, 4937–4944.
27. I. Gaus, *Int. J. Greenhouse Gas Control* **2010**, *4*, 73–89.
28. C. A. Rochelle, I. Czernichowski-Lauriol, A. E. Milodowski en *Geological Storage of Carbon Dioxide*, S. J. Baines, R. H. Worden (eds), Geological Society, London, **2004**, *233*, 87–106.
29. M. Raistrick, I. Hutcheon, M. Shevalier, M. Nightingale, G. Johnson, S. Taylor, B. Mayer, K. Durocher, E. Perkins, *Energy Procedia* **2009**, *1*, 3149–3155.
30. W. D. Gunter, E. H. Perkins, I. Hutcheon, *Appl. Geochem.* **2000**, *15*, 1085–1095.
31. C. Kjoller, R. Weibel, K. Bateman, T. Laier, L. H. Nielsen, P. Frykman, N. Springer, *Energy Procedia*, **2011**, *4*, 4724–4731.
32. T. Xu, E. Sonnenthal, N. Spycher, K. Pruess, *Comput. Geosci.* **2006**, *32*, 145–165.
33. G. Bacci, A. Korre, S. Durucan, *Int. J. Greenhouse Gas Control* **2011**, *5*, 579–588.
34. D. L. Parkhurst, C. A. J. Appelo, *U.S. Geological Survey Water-Resources investigations* **1999**, Report 99–4259.
35. K. Pruess. *The TOUGH codes*. **2004**.

ICIQ Fellowship Programs

ICIQ is a dynamic and innovative research institution located in Tarragona, 100km south of Barcelona.

The Institute has consolidated its position as one of the top level institutions for chemical research in Europe.

For further information and application, please visit: [www.iciq.es](http://www.iciq.es)  
Deadline for fellowships application May 10, 2013

**Summer FELLOWSHIPS 2013**

**A three-month internship for undergraduate students in one of ICIQ's research groups**

With the collaboration of: **BAYER**

**JULY-SEPTEMBER TARRAGONA**

# Contribución de Antonio Casares Rodríguez al desarrollo de la química en España en el siglo XIX

Ramón Cid

**Resumen:** Durante el año 2012 se ha celebrado el bicentenario del nacimiento de Antonio Casares Rodríguez, y este 2013 se cumplen 125 años de su muerte. Primer catedrático de química de la Universidad de Santiago, introductor del análisis espectroscópico en nuestro país, líder del equipo que realizó la primera anestesia clorofórmica en España, autor de libros de texto de química general que fueron utilizados en varias universidades españolas, etc. Creemos que su contribución a la química, y a la ciencia en general, no es suficientemente conocida y es propósito de este artículo ayudar a que se valore su obra convenientemente.

**Palabras clave:** Antonio Casares Rodríguez, análisis de aguas, espectroscopia, cloroformo y anestesia, nutrición.

**Abstract:** In 2012 it has been celebrated the bicentenary of the birthday of Antonio Casares Rodríguez, and 2013 marks the 125th of his death. First professor of Chemistry in the Santiago University, pioneer of the spectroscopy for chemical analysis in Spain, leader of the team that carried out the first chloroformic anesthesia in our country, author of chemistry textbooks that were used in several Spanish university, etc. We think that the contribution of Casares to the Spanish chemistry is not enough known and considered. One purpose of this article is to allow the nowadays chemist to know the important scientific contribution of Antonio Casares Rodríguez.

**Keywords:** Antonio Casares Rodríguez, water analysis, spectroscopy, chloroform and anesthesia, nutrition.

## Introducción

Tanto en el año 2012 como el 2013 se celebran aniversarios señalados del nacimiento y muerte del químico Antonio Casares Rodríguez. Nació en Monforte (Lugo) en 1812 y murió en Santiago de Compostela en 1888. En Galicia se han llevado a cabo diversos actos institucionales y se han presentado diferentes publicaciones<sup>1-3</sup> que han tenido a este químico y farmacéutico como protagonista. Sin embargo, en el resto del país no ha tenido trascendencia, y creemos que la su contribución a la química española en el siglo XIX debe ser conocida y valorada.

Antonio Casares es uno de los creadores del análisis químico en España y es el iniciador de la espectroscopia experimental en nuestro país. Es una figura también clave en la introducción de la anestesia por éter y cloroformo, y un experto en nutrición y en toxicología. Es un referente en el análisis de aguas minero-medicinales, que llevó a cabo durante cuarenta años.

Hizo notables aportaciones en vitivinicultura, en el campo de la mineralogía, y fue el iniciador de los estudios meteorológicos en Galicia. Estableció la química como verdadera disciplina científica en la universidad compostelana, siendo

la dimensión investigadora e experimental una de sus fundamentales contribuciones.

Por otra parte es autor de dos libros de texto muy importantes en la segunda mitad del siglo XIX para la enseñanza de la química en España: el “Tratado elemental de química” y el “Manual de química general con aplicación a la industria y con especialidad a la agricultura”, con cuatro ediciones a lo largo de 23 años. En 1866 publica su “Tratado de análisis de aguas”, y, además, tradujo el “Tratado de farmacia, teórico y práctico” de E. Soubeiran en 1847, y el “Tratado de química legal” de Gautier de Claubry en 1852.

Está relacionado con los mejores tiempos del trabajo experimental en la facultad de Medicina compostelana de aquella época, fue el primer decano de la facultad de Farmacia, y durante su mandato como rector de la Universidad de Santiago se creó la escuela de Veterinaria, aunque fue cerrada pocos años después.

Ilustres nombres de la química española de la primera mitad del siglo XX están relacionados con el: José Casares Gil (hijo de Antonio Casares), José Rodríguez Carracido y José Rodríguez Mourelo, que fueron alumnos de su cátedra de química.

A pesar de estos datos, son pocas las publicaciones fuera de Galicia donde podemos encontrar con una cierta extensión referencias<sup>4,5</sup> a Antonio Casares. En otras apenas ocupa unas pocas líneas, y es por ello que se presenta este artículo con el propósito de destacar algunas de sus contribuciones a la química española, aprovechando los aniversarios citados.

## Apuntes biográficos

Antonio Jacobo Casares Rodríguez nació en Monforte (Lugo) el 28 de abril de 1812, cursando los estudios primarios y secundarios en el colegio del Cardenal de su villa natal, regentado por los jesuitas. Se traslada con catorce años a Valladolid para alcanzar en su universidad el grado



R. Cid Manzano

IES de SAR (Santiago de Compostela).  
Dpto. Didáctica Ciencias Experimentales (USC).  
C-e: [ramon.cid@usc.es](mailto:ramon.cid@usc.es)

Recibido: 30/12/2012. Aceptado: 08/03/2013.



Figura 1. Antonio Casares Rodríguez (1812-1888).

de bachiller en Filosofía en 1827. Continúa estudios en el colegio de Farmacia de Madrid donde alcanzó el título de licenciado en Farmacia en 1836.

Ese mismo año gana por oposición en Madrid la cátedra de “Química aplicada a las artes”, que desempeñaría en la Sociedad Económica de Amigos del País de Santiago; siendo el primer catedrático de química de esta institución. Esta cátedra estaba orientada a la formación de artesanos y trabajadores de los incipientes procesos industriales, desarrollando durante casi diez años una intensa actividad de la mano de Casares.

En 1840 Casares comienza su carrera docente universitaria siendo nombrado profesor interino de la cátedra de Historia Natural en la Universidad de Santiago, que ocuparía durante siete años. Al año siguiente se licencia y doctora en Filosofía en la universidad compostelana, y aún en 1872 se licenciaria también en Medicina.

En 1843 se instala como farmacéutico en Santiago, siguiendo esa farmacia en funcionamiento en la actualidad, muy cerca de la céntrica *Praza do Toural* de esta ciudad, y en propiedad de descendientes directos de Casares. Ejercería la profesión de farmacéutico prácticamente durante toda a su vida.

En 1845 obtiene en propiedad la cátedra de Química General de la Universidad de Santiago, compartiendo durante dos años esta materia con la Historia Natural. Se mantendría como profesor de Química durante cuarenta y tres años, hasta su muerte.

A partir de su entrada en la universidad compostelana su actividad investigadora y docente es imparable. Además de los tratados de su autoría, y de las traducciones ya indicadas, publicó más de un centenar de artículos científicos, apareciendo cerca de un cuarenta por ciento de ellos en las revistas científicas españolas más importantes de la época.

Fue decano de la facultad de Ciencias, de la de Farmacia y profesor de Análisis Químico en los cursos de doctorado en la facultad de Medicina. En 1872 fue nombrado rector de la Universidad de Santiago, permaneciendo en ese puesto de forma prácticamente ininterrumpida hasta su muerte en 1888.

En el plano más personal, estuvo casado dos veces, alcanzando la madurez siete hijos y cinco hijas. Dos de sus hijos destacaron en la actividad científica: el ya citado José Casares Gil en química analítica, y Antonio Casares Gil, experto en briofitas.

Debemos concluir este acercamiento biográfico indicando que Casares fue esencialmente un químico experimental que se movió entre la química analítica y la química inorgánica, desde una definición actual, estando prácticamente todo su trabajo docente e investigador relacionado estrechamente con la química.

## Contribuciones a la química

Ya han sido señaladas de forma genérica las aportaciones más importantes de Casares, y en este apartado vamos a exponer de forma resumida algunas de ellas dada su especial relevancia en el campo de la química.

### Análisis de aguas minero-termales

Antonio Casares es un de los grandes expertos en el análisis químico de aguas del siglo XIX, y aún hoy sigue siendo referenciado en actividades relacionadas con esta cuestión.<sup>6</sup> Comienza esta actividad en 1837, cuando tenía 25 años, línea de investigación en la que trabaja durante cuarenta, publicando una treintena de estudios sobre aguas de toda Galicia, y también de otros lugares como Azuague en Canarias, Las Bouzas de Rivadelago en Zamora, Loeches en Madrid, y Monzón en Portugal.

En 1866 publica un extenso tratado sobre aguas minero-medicinales que sería una de las obras más importantes en esta área en su tiempo (ver referencia 3).

Casares siempre estuvo convencido de la utilidad terapéutica de las aguas minero-termales, y de la necesidad de conocer su composición y cualidades para el remedio de muchas enfermedades. En sus trabajos en este campo, además de ser muy preciso a la hora de indicar la presencia y cantidad de las sustancias de interés en las aguas que analiza, también da otras informaciones valiosas sobre las mismas, como su indicación médica, su forma de uso, las instalaciones de los balnearios estudiados, su ubicación, el número de visitantes, etc.

De extraordinario interés es el análisis que hace en aguas gallegas de la presencia de los elementos químicos rubidio y cesio, que habían sido descubiertos unos años antes, por Bunsen y Kirchhoff utilizando para ello técnicas espectroscópicas (el cesio en 1860 y el rubidio en 1861). A continuación comentamos la importancia de Casares en la introducción de esta herramienta analítica en España.

### Análisis espectroscópico

Podríamos incluir esta cuestión en un epígrafe posterior donde analizaremos de forma general el trabajo experimental de Casares, pero, por lo que veremos a continuación, debemos dedicarle un espacio específico a este asunto.

Aunque el interés científico por el estudio de la luz emitida por los cuerpos a alta temperatura se produce ya en la primera mitad del siglo XIX, se suele situar el comienzo de la difusión del análisis espectroscópico cuando los alemanes Robert Wilhem Bunsen (1811-1899) y Gustav Robert Kirchhoff (1824-1887) publican su famoso trabajo<sup>7</sup> entre

1860 y 1861. Se traduce al francés, y ya en 1862 aparece en español<sup>8</sup> desde esa traducción francesa. Inmediatamente Casares se interesa por su aplicación al análisis de sustancias, e inicia los trámites para comprar un espectroscopio. Entre 1863 y 1864 comienza a utilizar este tipo de técnica en la Universidad de Santiago, y, como indicamos en el epígrafe anterior, descubre en ese tiempo la presencia de los dos metales alcalinos recién descubiertos en aguas gallegas.

Ese descubrimiento aparecerá publicado<sup>9</sup> en 1866, año en el que también aparece el “Tratado de aguas” ya citado antes. En el dedica el capítulo IV al análisis espectral, introduciendo esta nueva técnica analítica. Hasta donde sabemos, estamos ante el primer texto en castellano en la que un autor español presenta esta nueva herramienta a partir de sus propios conocimientos experimentales. Podemos considerar, por lo tanto, a Casares como iniciador del análisis espectroscópico en España.

**Libros de texto**

Antonio Casares es el más importante promotor, durante el siglo XIX, de la infraestructura pedagógica que tuvo la Universidad de Santiago con carácter práctico y experimental, y el principal usuario de ella con fines didácticos. Preocupado por alcanzar la mayor calidad en su docencia, se dio cuenta de la necesidad que tenían sus alumnos de disponer de un libro de química conectado directamente con el programa de la materia. Procede a escribir sus propios textos, y edita su primer libro en 1848 con el título “Tratado elemental de química”. En 1857 publica su gran obra en este campo: “Manual de química general con aplicaciones a la industria y en especial a la agricultura”, con tres ediciones corregidas (1867, 1873 y 1880).

Estos libros estaban divididos en dos tomos, ocupándose en el primero de la química inorgánica, y el segundo de la orgánica, y como indica el título de su manual, dedica Casares un especial énfasis a la aplicación práctica del trabajo químico a los procesos de importancia industrial y a las aplicaciones a la agricultura. Estas obras se emplearon como texto oficial en varias universidades españolas durante casi cuarenta años.

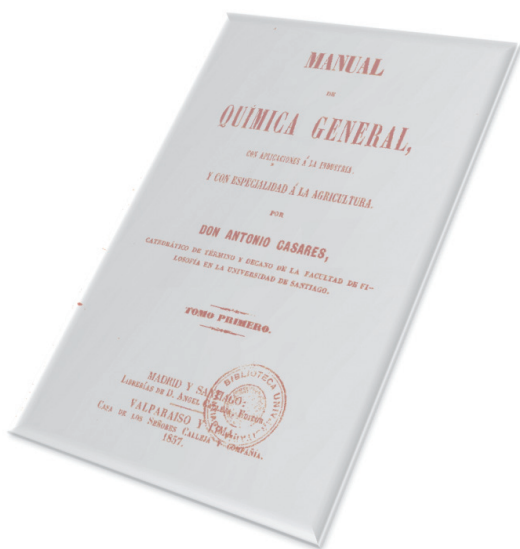


Figura 2. Portada del “Manual de química general”.

**El trabajo experimental**

Además de su trabajo en análisis de aguas, también se dedicó experimentalmente a otras áreas. Como ya se indicó anteriormente, Casares publicó más de un centenar de artículos sobre muy diferentes campos, siendo en alguno de ellos un verdadero pionero: este fue el caso de la introducción de la anestesia clorofórmica, en toxicología, y en estudios sobre nutrición. Sobre estos dos últimos campos haremos un breve comentario en un epígrafe posterior. En la Figura 3 presentamos el número de artículos publicados por áreas de investigación.

Si tenemos en cuenta el nivel general de la investigación científica en España en ese tiempo, y que Casares se encuentra en una modesta universidad periférica, creemos que los números que aparecen en la figura citada reflejan una muy notable actividad científica.

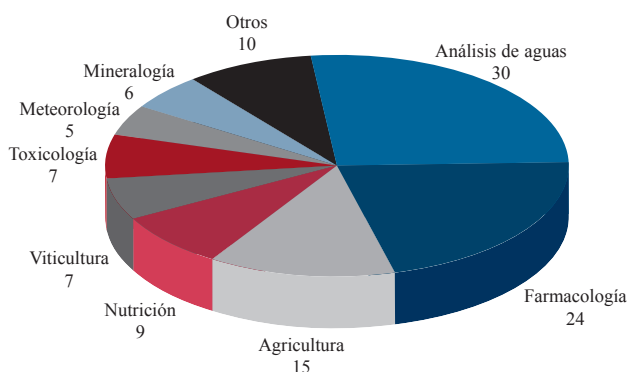


Figura 3. Artículos publicados por temáticas.

Además, llevó a las revistas de mayor impacto de España en la época una importante parte del resultado de su labor investigadora. Entendemos, pues, que su trabajo fue trascendente, e incluso pudo ser influyente, para aquellos científicos españoles que llevaban a cabo actividades de la misma naturaleza. En la Tabla 1 presentamos el número de artículos publicados en las revistas de mayor importancia en la época. Suponen cerca del cuarenta por ciento de la totalidad de sus publicaciones; el otro sesenta por ciento aparecen en revistas en el ámbito de Galicia. Creemos, por tanto, de gran relevancia la faceta de Casares en el campo de las publicaciones científicas en el Siglo XIX.

Tabla 1. Artículos en revistas de importancia.

El Restaurador Farmacéutico	17
Boletín de Medicina, Cirugía y Farmacia	9
Revista de Ciencias Médicas	6
Siglo Médico	3
Revista de los Progresos de las Ciencias	3
Gaceta Médica	2
España Médica	1

## Dos ejemplos de su actividad experimental

Como vemos en la Figura 3 fueron diversas las áreas científicas a las que se dedicó experimentalmente Casares, pero cerca de las dos terceras partes de sus investigaciones químicas estuvieron orientadas a las ciencias de la salud. Traemos aquí dos de ellas como muestra de su actividad en este campo.

El primer ejemplo es su procedimiento de síntesis<sup>10</sup> del cloroformo que fue usado en la primera operación con este anestésico en España en diciembre de 1847. Casares lleva a cabo esta síntesis utilizando el proceso conocido en la época del francés Soubeiran, pero mejorando el rendimiento del mismo.

“Poner en un baño maria un alambique con diez libras de hipoclorito de cal, cinco libras de agua y veinte o veinticuatro onzas de alcohol; se agita la mezcla para que quede homogénea. Introducir el baño en la caldera, con el agua hirviendo, y realizar la destilación. Se habrá terminado cuando el líquido caiga gota a gota y no tenga olor ni sabor a cloroformo. [...] Las ventajas de este procedimiento son: 1°. No hay entumecimiento de la masa. 2°. Se pueden emplear vasijas pequeñas. 3°. Mayor cantidad de cloroformo que el obtenido por el método de Soubeiran.”

El otro ejemplo tiene que ver con otra de sus preocupaciones en el terreno farmacológico: encontrar los principios activos de las plantas de uso medicinal. En 1856 anuncia<sup>11</sup> el aislamiento de la sustancia que confiere las propiedades médicas al durillo (*Viburnus tinus*):

“Según los ensayos analíticos que con ellas hice contienen mucha clorofila, tanino, una sustancia oleo resinosa de color algo oscuro, de sabor picante fuerte y de olor particular, no muy desagradable, y persistente, y una sustancia cristalizable, diversa de lo que hasta ahora se han descrito, y a la cual doy el nombre de VIBURNINO”.

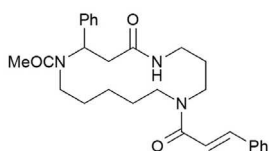


Figura 4. La molécula de Viburnino.

El viburnino es un alcaloide macrociclo derivado de la espermidina, siendo caracterizado totalmente a partir de las flores del *Verburnium rhytidophyllum*.<sup>12</sup>

En relación con sus aportaciones a la toxicología hay que destacar su traducción del “Tratado de química legal” de Gaultier de Claubry, ya citado, en la que, además, añade un apéndice de elaboración propia dedicado a mejorar los conocimientos de las personas que tienen que prestar los primeros auxilios en casos de envenenamiento o asfixia. Por otra parte, en diversas revistas, como en el *Restaurador Farmacéutico*,<sup>13</sup> publicó varios artículos sobre diferentes cuestiones relacionados con la toxicología.

En el campo de la nutrición llevó a cabo una serie de estudios experimentales, pioneros en España, con diversos animales para conocer los pormenores de la química de la digestión. En una decena de artículos expuso el resultado de sus investigaciones.<sup>14</sup>

## Conclusiones

Solo se ha esbozado de forma resumida el ingente trabajo que este químico gallego desarrolló a lo largo de cincuenta años, pero entendemos que es suficiente para poner en valor su aportación a la química española.

Creemos, por tanto, que Antonio Casares Rodríguez debe ser considerado como uno de los químicos más importantes en la conformación de la química en España como una disciplina autónoma en el siglo XIX.

## Agradecimientos

El autor desea mostrar su agradecimiento al profesor Dr. Manuel R. Bermejo Patiño, director de la tesis doctoral<sup>15</sup> sobre la figura de Antonio Casares Rodríguez, que ha servido como base para la redacción de este artículo.

## Bibliografía

1. M. Bermejo, R. Cid (Coords), Número Especial dedicado a Antonio Casares, *Boletín das Ciencias (ENCIGA, Santiago de Compostela)* **2012**, N° 75 (octubre).
2. R. Cid, *Antonio Casares Rodríguez: químico, médico y farmacéutico. Unidad Didáctica*, Real Academia Galega de Ciencias-Fundación Barrié. Vigo y A Coruña, **2012**.
3. J. A. Rodríguez Vázquez y J. L. Legido Soto (Eds.), *Tratado práctico de análisis químico de las aguas minerales y potables: con indicación de las fuentes de aguas minerales más notables de España por A. Casares, 1866*, Tórculo Artes Gráficas, Santiago de Compostela, **2012**.
4. L. Maiz Eleizegui, *Anales de la Real Academia de Farmacia* **1952**, 1, 29–42.
5. J. M. Lopez Piñero, *Investigación y Ciencia* **1988**, n° 143.
6. Sección Publicaciones del sitio web TERMAS-WORLD: <http://termasworld.com/index.php>, visitada el 11/03/2013.
7. G. Kirchoff, R. Bunsen “Chemische Analyse durch Spectralbeobachtung gen”, *Annalen der Physik und Chemie* **1860**, CX (6), 161–189 et **1861**, CXIII (7), 337–381.
8. M. M. Kirchoff y Bunsen “Análisis química fundada en las observaciones del espectro”, *Revista de los progresos de las Ciencias, Exactas, Físicas y Naturales* **1862**, tomo XII, Imprenta Aguado, Madrid (aparece en cinco entregas).
9. A. Casares, “Descubrimiento de dos nuevos metales rubidio y cesio en varias aguas minerales de Galicia”, *Revista de los Progresos de las Ciencias Exactas, Físicas y Naturales* **1866**, tomo XVI, N° 2, 74–78, Imprenta Aguado, Madrid.
10. A. Casares, “Nuevo método para preparar el cloroformo”, *El Restaurador Farmacéutico* **1848**, tomo IV, 32.
11. A. Casares, “Uso medicinal del durillo, principio nuevo contenido en esta planta, viburnino”, *El Restaurador Farmacéutico* **1856**, XII, N° 13, 52.
12. O. M. Abdallah, Z. Ibraheim, *Bull. Pharm. Sci., Assiut University* **1995**, 18, 39 (*Chem. Abstr.* **1995**, 124, 4885).
13. A. Casares, “Observaciones toxicológicas”, *El Restaurador Farmacéutico*, **1848**, Año 5, n° 10, pp. 73-75; Año 5, n° 11, 81–83.
14. G. A. Garrido García, G.A., “Antonio Casares y Rodrigo: sobre nutrición”, *Ingenium* **1990**, 2, 69–79.
15. R. Cid, “Antonio Casares Rodríguez e a súa contribución á química e ao seu ensino na Universidade de Santiago”, tesis doctoral, Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Santiago de Compostela, **2012**.

# María Josefa Molera: cinética, fotoquímica y cromatografía en la España de 1940 a 1980

A. Ulises Acuña y José M<sup>a</sup> Santiuste

**Resumen:** La Dra. María Josefa Molera comenzó su carrera científica en una España devastada por la guerra civil. Se especializó con notable éxito en el estudio de reacciones térmicas en fase gaseosa, y creó un grupo de investigación en cinética química en el Instituto de Química Física “Rocasolano” (CSIC, Madrid). Posteriormente tuvo un papel muy importante en el desarrollo de las técnicas analíticas de cromatografía de gases y en la introducción de los métodos espectroscópicos de fotólisis de destello en España, actividades que tuvieron un gran impacto en la creación de la estructura actual de la investigación en nuestro país.

**Palabras clave:** Profesora Molera, cinetoquímica, cromatografía, fotoquímica..

**Abstract:** Dr. María Josefa Molera started a scientific career in very harsh conditions, just after the Spanish civil war. Dr Molera early specialized in the study of low-temperature oxidation of organic compounds, and succeeded in setting-up a new research group on chemical kinetics at the Instituto de Química Física “Rocasolano” (CSIC, Madrid). Later on, the research interests of Dr Molera also included the fundamentals and applications of gas chromatography and the kinetic applications of flash photolysis techniques. The brilliant, untiring research activity of Dr Molera was very important for the construction of the current Spanish R+D system.

**Keywords:** Professor Molera, chemical kinetics, gas chromatography, photochemistry.

En el mes de septiembre del año 2011 fallecía en Madrid, a los 90 años, la Dra. M<sup>a</sup> Josefa Molera Mayo (Figura 1), Profesora de Investigación jubilada del CSIC y una de las protagonistas destacadas de la reconstrucción del sistema español de investigación en la segunda parte del siglo pasado. Nacida en Isaba (Navarra), el 23 de enero de 1921, su familia fue trágicamente castigada por la violencia de la guerra civil.<sup>1</sup> En condiciones muy difíciles la Dra. Molera completó, en 1942, la licenciatura en Ciencias Químicas en la Universidad Central de Madrid, en sólo 3 años y con calificaciones excepcionalmente brillantes. En ese mismo año accedió a un puesto de profesora ayudante (sin sueldo) en la cátedra de Química Técnica, dirigida por el Profesor Rius Miró, actividad que M<sup>a</sup> Josefa debía simultanear con clases particulares de Química e idiomas (inglés y francés). Rius era también Vicedirector del Instituto de Química “Alonso Barba” del CSIC, que ocupaba una parte del edificio construido en 1932 para el Instituto Nacional de Física y Química (Madrid) de la Junta para la Ampliación de Estudios. Los magníficos laboratorios, talleres y biblioteca

de este centro habían superado indemnes el caos bélico, aunque, como es bien sabido, no ocurrió así con buena parte de su personal investigador, depurado y perseguido hasta el exilio. Durante muchos años este centro ocuparía una privilegiada posición en la renovación de grupos y laboratorios de investigación en química y física en toda España. Sus laboratorios permitieron desarrollar en los años 40 trabajos de investigación de cierta complejidad técnica, gracias a los conocimientos y habilidad del personal de los talleres de soplado de vidrio, mecánico, eléctrico y electrónico,<sup>2</sup> y a la disponibilidad de aire líquido, sistemas de vacío, líneas de intensidad/voltaje variable, etc.



A. Ulises Acuña



José M<sup>a</sup> Santiuste

Instituto de Química-Física “Rocasolano”, CSIC.  
Serrano 119, 28006-Madrid.  
C-e: [roculises@iqfr.csic.es](mailto:roculises@iqfr.csic.es), [santius@iqfr.csic.es](mailto:santius@iqfr.csic.es)

Recibido: 14/02/2013. Aceptado: 27/02/2013.



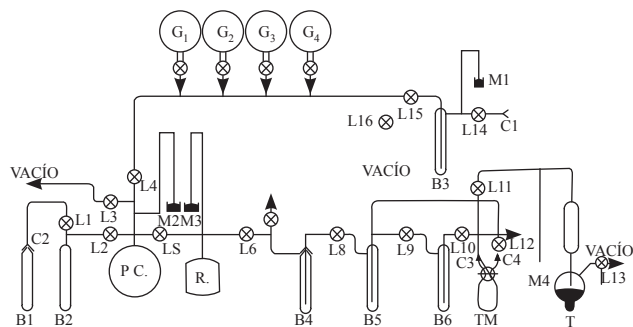
**Figura 1.** María Josefa Molera en los laboratorios del Departamento de Cinetoquímica, CSIC. (ca 1985).

El Profesor Rius ofreció a la Dra. Molera realizar la tesis doctoral en los laboratorios que él dirigía en el Instituto, dedicados a problemas electroquímicos. Sin embargo, el director del centro, Profesor Casares Gil, rechazó su solicitud de incorporación, argumentando que en el Instituto no había ninguna mujer investigadora. La joven licenciada no renunció a su propósito, pero tuvo que esperar a que Rius fuera promovido a director del recién creado Instituto de Química Física “Rocasolano” (1946) para poder trabajar como becaria en un laboratorio razonablemente equipado. Nuevamente la minúscula dotación económica de la beca la obligaba a mantener una actividad docente paralela. Finalmente, en 1948 se doctoró con Premio Extraordinario en la Universidad Central, como resultado de sus estudios sobre las aplicaciones del electrodo de vena de mercurio como posible sustituto del de gotas del mismo metal,<sup>3</sup> y, en 1949, obtuvo una plaza de Colaboradora Científica en el Instituto.

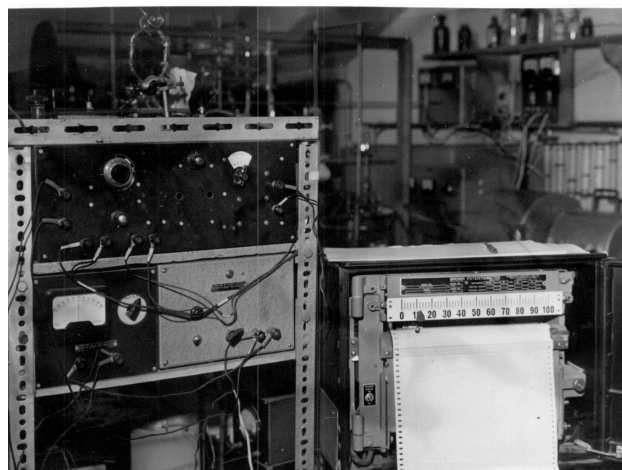
Al principio de la década de los 1950s se abre la posibilidad de enviar a laboratorios extranjeros a un grupo de jóvenes científicos del Instituto para completar su formación. De acuerdo con una planificación que se atribuye al Profesor Octavio Foz, vicedirector del Instituto, la Dra. Molera se inclinó por el *Physical Chemistry Laboratory* de la Universidad de Oxford, dirigido por el profesor Sir Cyril N. Hinshelwood, que obtendría el premio Nobel (1956) por sus estudios sobre cinética química. Nuevamente se encontró la joven investigadora con el rechazo por su condición de mujer, por lo que necesitó toda su tenacidad para vencer los prejuicios del profesor Hinshelwood.

A su vuelta a España (1951) utiliza la experiencia adquirida para poner en marcha en el Instituto de Química Física la investigación de reacciones de pirólisis y oxidación a baja temperatura de compuestos orgánicos en fase gaseosa, y crea el Departamento de Cinetoquímica que dirigiría hasta su jubilación, en 1986. Las reacciones se estudiaban en aparatos de vacío como el de la Figura 2, y su evolución se seguía mediante frágiles manómetros capilares de mercurio, cuyo contenido frecuentemente circulaba sin freno por mesas y suelo. Algunas partes del aparato se mantenían a aproximadamente 60 °C mediante arrollamientos de hilo calefactor, que se fijaba a los tubos de vidrio una y otra vez con una pasta fabricada *in situ* con polvo de amianto. Los productos de reacción se analizaban por espectroscopía IR y métodos convencionales y, además, la Dra. Molera se apoyó en técnicas radioquímicas de cierta complejidad, como las que utilizaban los espejos de <sup>212</sup>Pb de Paneth<sup>4</sup> o la síntesis de compuestos marcados con <sup>14</sup>C, para resolver problemas mecánicos.<sup>5</sup>

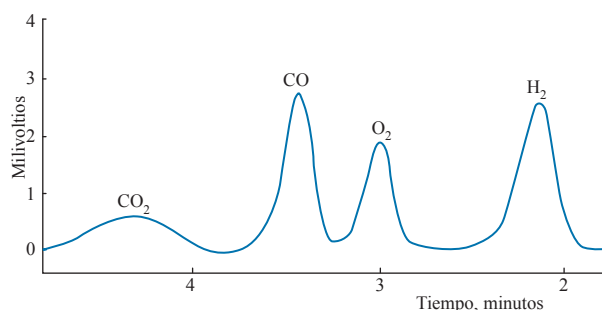
La aparición de la cromatografía de gases mejoró considerablemente la identificación y cuantificación de los productos de las reacciones de oxidación. Coincidió esta tecnología con la presencia en el departamento del que sería su más cercano colaborador, el Dr. José Antonio García-Domínguez. Además de un brillante investigador, el Dr. García-Domínguez estaba dotado de excepcionales conocimientos y habilidades técnicas, lo que hizo posible la construcción de los primeros cromatógrafos en el departamento,<sup>6,7</sup> ya que los escasos modelos comerciales eran inasequibles (Figuras 3 y 4). Muy pronto se incorporó a estos instrumentos la detección de <sup>14</sup>C, lo que ilustra las posibilidades del centro en esa época. De esta forma, la investigación que dirigía la Dra. Molera alcanzó el reconocimiento internacional, especialmente sus estudios de inhibición de pirólisis, formación de llamas frías e intervención de radicales peroxídicos.<sup>8</sup>



**Figura 2.** Esquema de un aparato utilizado en el Dpto. de Cinetoquímica, en los años 1950-1960, para el estudio de reacciones en fase gaseosa. Los reactantes se introducían en el reactor de vidrio **R.**, de unos 200 mL de volumen, colocado en el interior de un horno. Los productos de la reacción se fraccionaban en los bulbos **B4-B6**, utilizando mezclas refrigerantes, y el tomamuestras **TM** permitía recoger muestras gaseosas para su análisis.



**Figura 3.** Primer cromatógrafo de gases construido en el Departamento de Cinetoquímica. A. Herrera, tesis doctoral, 1964, y ref. 6.

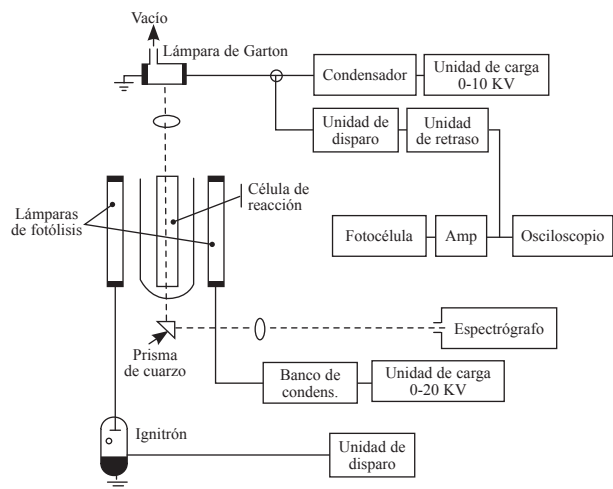


**Figura 4.** Cromatograma de los gases de la oxidación de metilal, obtenido en un columna de carbón activo (108 °C) en el cromatógrafo de la Figura 3. A. Herrera, tesis doctoral, 1964.

No ignoraba la Dra. Molera que las nuevas técnicas espectroscópicas de fotólisis con resolución temporal permitían la identificación directa de radicales libres y especies inestables, y por esta razón, en 1959 realiza una breve estancia en el laboratorio del profesor George Porter, en la Universidad de Sheffield (Reino Unido), que fue seguida por otra más extensa del Dr. García Domínguez. El profesor Porter sería distinguido con el Premio Nobel de Química (1968), junto al profesor



Ronald G. W. Norrish, precisamente por el desarrollo de los métodos de fotólisis de destello que despertaron el interés de nuestros investigadores. Esta iniciativa iba a tener un impacto muy importante en la evolución posterior de la investigación en el Instituto. Con escasos medios materiales y su probada tenacidad, la Dra. Molera inicia el largo proceso de diseño y construcción de la gran variedad de componentes eléctricos, electrónicos y ópticos que integraban en esa época un espectrómetro con resolución temporal de microsegundos, con la valiosa colaboración del Dr. García Domínguez. Finalmente, en 1971, fue posible disponer de un sistema de fotólisis de destello en el Departamento, en el que un banco de condensadores a 20 kV se descargaba a través de lámparas de 20 cm de longitud para generar un intenso pulso de radiación UV-VIS de aproximadamente 15  $\mu$ s de duración (Figura 5), sistema que fue mejorando progresivamente.<sup>9</sup> Pocos años más tarde ya se construían en el instituto láseres pulsados de nanosegundos (ns), y en la actualidad se desarrollan y utilizan numerosas técnicas de espectroscopía láser con resolución temporal, algunas en la zona del femtosegundo (fs), como parte importante de la investigación en el Instituto de Química Física.



**Figura 5.** Esquema del primer sistema de fotólisis de destello para estudios a 77 K. Los espectros de absorción T-T con resolución temporal se obtenían irradiando la muestra a través del N<sub>2</sub> líquido contenido en un vaso Dewar de cuarzo transparente. A. Ceballos, tesis doctoral, Madrid, 1976.

Las reacciones en fase gaseosa a temperaturas de 150-300 °C generaban una gran variedad de productos, cuyo análisis hacía necesario la preparación de nuevas columnas cromatográficas. Por este motivo, la Dra. Molera se interesó profundamente por los aspectos químico-físicos de la cromatografía en fase gaseosa, hasta el punto de que estos estudios se convirtieron en una de sus líneas preferentes de investigación. En esta área, y siempre en estrecha colaboración con el Dr. García Domínguez, realizó contribuciones a nivel fundamental y aplicado de notable interés, por ejemplo, en el estudio termoquímico y posterior diseño por ordenador de fases cromatográficas mixtas<sup>10</sup> y en el desarrollo de la técnica cromatografía de gases-espectrometría de masas. El grupo de análisis que se formó alrededor de la Dra. Molera llegó a ser un referente en nuestro país para la resolución de complejos problemas analíticos. Asimismo, mostró una intensa actividad

normativa e institucional en esta especialidad, creando y presidiendo el Grupo de Cromatografía y Técnicas Afines (1972), colaborando en la organización de simposios de cromatografía nacionales (Barcelona, 1974) e internacionales (Birmingham, 1976), entre otras actividades.

La contribución al nuevo conocimiento científico de la Dra. Molera, recogida en 80 publicaciones y 17 tesis doctorales, fue reconocida, dentro y fuera de nuestro país, con distinciones como el Premio Alfonso X el Sabio del CSIC, la Medalla de Química de la Real Sociedad Española de Física y Química, el Premio Perkin-Elmer Hispania de Cromatografía, etc.

María Josefa Molera será recordada por su interés por el trabajo riguroso y su infatigable dedicación experimental, que supo conciliar con una dedicada atención a su familia, a pesar de las circunstancias poco favorables de la época. Dotada de una personalidad fuerte y austera, siempre estaba disponible tanto para guiar a los jóvenes estudiantes como para aprender lo que alguno de ellos pudiera enseñar. A su legado ejemplar de fortaleza y dedicación se une su éxito en la introducción en España de ideas y métodos experimentales característicos de la química más avanzada, que contribuyeron de forma muy importante a la construcción de nuestro sistema de I+D actual.

## Agradecimientos

Agradecemos al Dr. A.V. Carrascosa su biografía de la Dra. Molera (referencia 1a), al personal de la Biblioteca del Instituto de Química Física "Rocasolano" su entusiasta colaboración y a los editores de la revista *Cromatografía y Técnicas Afines* el permiso para reproducir la fotografía de la Figura 1.

## Bibliografía

- Hay información biográfica adicional acerca de la Dra. Molera, que incluye aspectos más personales, en: a) *Diccionario Biográfico Español (R.A.H.)*, 2012, 35, 383–385. <http://www.rah.es/diccionario-biografico.htm>, visitada el 05/03/2013. b) M. D. Cabezudo, *Boletín Inform. Grupo Cromat. Técn. Afines*, 1986, 7, 56–57.
- En el período aquí mencionado trabajaban en el taller mecánico: Antonio López, Guillermo Dorado, Teodoro González, Félix Martín de Loeches, José Martínez y Manuel Verdeal Pérez; en el de electricidad: Germán López, Gonzalo Gallardo, Félix Penalba, Antonio Pomares y Manuel Verdeal González; y, en el de electrónica: J. Ruiz Vera y Alejandro Belaústegui. Luis Sanzano era el especialista en soplado de vidrio.
- A. Rius, M. J. Molera, *Anales RSEFQ* 1947, 43B, 1074–1086; 1948, 44B, 53–68, 184–190; 1949, 45B, 1151–1170.
- M. J. Molera, J. M. Gamboa, E. García, *Anales RSEFQ* 1958, 54B, 553–558.
- M. J. Molera, J. M. Gamboa, M. del Val, *Anales RSEFQ* 1959, 55B, 493–500.
- M. J. Molera, A. Herrera, J. A. García-Domínguez, *Anales RSEFQ* 1963, 59B, 687–694.
- M. J. Molera, J. A. García-Domínguez, A. Couto, *Rev. Cienc. Aplic.* 1966, 112, 385–394.
- M. J. Molera, J. A. García-Domínguez, A. Rodríguez, J. M. Santiuste, *J. Chem. Soc. Faraday I* 1977, 1900–1906.
- M. J. Molera, A. U. Acuña, A. Ceballos, J. A. García-Domínguez, *Anales Quim.* 1975, 71, 22–27.
- M. J. Molera, J. A. García-Domínguez, J. Fernández-Biarge, *J. Chromatog. Science* 1969, 7, 305–312; 1973, 11, 538–546.

# ¿Tiene(n) unidades la(s) constante(s) de equilibrio?

Ana Quílez-Díaz y Juan Quílez-Pardo

**Resumen:** En este trabajo se informa acerca de las confusiones que en muchos casos tanto profesores como libros de química general mantienen a la hora de tratar las constantes de equilibrio. Una vez se presentan las correctas definiciones de las constantes de equilibrio experimentales  $K_p$  y  $K_c$ , así como de la constante de equilibrio termodinámica,  $K^\circ$ , se analizan los errores que se suelen cometer cuando se trabaja con estos términos. Muchos textos confunden  $K_p$  con  $K^\circ$  y también suelen afirmar que las constantes  $K_p$  y  $K_c$  no tienen dimensiones. Se propone y se resuelve un problema para ejemplificar el correcto tratamiento de las correspondientes magnitudes.

**Palabras clave:** Constantes de equilibrio, presión estándar, unidades, libros de texto de química, tratamientos incorrectos.

**Abstract:** This paper reports some incorrect assumptions that many teachers and general chemistry textbooks hold when dealing with equilibrium constants. After presenting the proper definition of both the experimental constants,  $K_p$  and  $K_c$ , and the thermodynamic constant,  $K^\circ$ , the usual misrepresentations related to these terms are analysed. Many textbooks confuse  $K_p$  with  $K^\circ$  and also state that both  $K_p$  and  $K_c$  are dimensionless. One problem is proposed and solved in order to exemplify a correct treatment of the quantities involved.

**Key words:** Equilibrium constants, standard pressure, units, chemistry textbooks, misrepresentations.

## Introducción

A los estudiantes de química se les exige que presten especial atención en la expresión de las distintas magnitudes con sus correspondientes unidades. Pero estos alumnos pueden quedar confundidos cuando comprueben que unas mismas magnitudes se expresan con unidades en algunos libros de texto y en otros aparecen como magnitudes adimensionales. Este hecho se pone de manifiesto en el caso de la(s) constante(s) de equilibrio químico.

La respuesta a la pregunta que da título a este trabajo ha sido objeto de múltiples trabajos y argumentaciones, según se señala en un estudio previo<sup>1</sup>. La discusión generada en torno a si la(s) constante(s) de equilibrio se debe(n) expresar con unidades o no ha generado discrepancia entre autores de libros de texto de química general y profesores de esta disciplina, siendo en la actualidad un problema no resuelto. Parecería pues que se trata de un tema relativamente controvertido, que posee una cierta complejidad inherente. Pero, en realidad, se trata de un problema terminológico que se puede resolver didácticamente de una forma sencilla, como posteriormente se discutirá.



J. Quílez-Pardo



A. Quílez-Díaz

IES Benicalap, Departamento de Física y Química,  
Nicasio Benlloch, 46015 Valencia

C-e: [j.quilez@terra.es](mailto:j.quilez@terra.es), [ana.quilez.diaz@gmail.com](mailto:ana.quilez.diaz@gmail.com)

**Recibido:** 06/10/2012. **Aceptado:** 28/01/2013.

En la revisión realizada en el artículo citado anteriormente no se encontró ningún trabajo previo que se ocupase de estudiar este aspecto dentro del contexto español. Sin embargo, en el mismo año de su publicación apareció un nuevo artículo<sup>2</sup> en el que se analizaba con una cierta extensión el problema del tratamiento didáctico de la dimensionalidad de la(s) constante(s) de equilibrio. Este último trabajo permite ejemplificar la confusión generalizada que existe en la actualidad al respecto. Por ello, presentamos en primer lugar los argumentos que su autor realiza una vez propone un ejercicio que supone el cálculo de la constante de equilibrio  $K_p$ , planteado para intentar superar algunos errores que ha encontrado al respecto en varios libros de química de segundo de bachillerato. Para ello establece como punto de partida que las constantes de equilibrio son adimensionales; en concreto, afirma que las constantes  $K_c$  y  $K_p$  no tienen dimensiones. Para el cálculo de  $K_p$ , partiendo de valores de presiones parciales de equilibrio, este autor recomienda el empleo de unidades de bares, aunque admite que si las presiones parciales se expresan en atmósferas, se obtienen valores aceptables (también adimensionales) de la constante de equilibrio, al ser muy semejantes a los calculados cuando las unidades de las presiones parciales son bares. Pero se afirma que si se utilizasen unidades de presión de pascales, se estaría cometiendo un error importante, ya que el valor de la constante de equilibrio que se obtendría sería muy diferente del caso en el que las unidades utilizadas han sido bares. Posteriormente, se abunda en remarcar esta supuesta incorrección cuando se calcula el valor de  $K_c$  a partir del valor de  $K_p$ . Finalmente, un nuevo argumento en contra del carácter dimensional de  $K_p$  se fundamenta a partir de la relación termodinámica  $\Delta G^\circ = -RT \ln K_p$ , en donde necesariamente  $K_p$  no debe tener dimensiones. En el citado artículo se concluye finalmente señalando que el profesorado de química de bachillerato debería valorar la conveniencia de indicar que las constantes de equilibrio son adimensionales. Además, por lo que respecta a las unidades de los valores de las presiones parciales, establece que se podría continuar utilizando atm para el cálculo de  $K_p$ , en lugar de bares, pero nunca pascales.

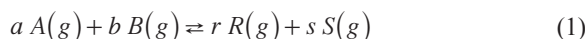
## Objetivo

La mayor parte de las afirmaciones del trabajo referido en el apartado anterior se sustentan en un problema terminológico, lo que ha dado origen a diversas incorrecciones a la hora de tratar las constantes de equilibrio. El objetivo de este trabajo es tratar de contribuir a evitar la confusión que existe en lo que respecta a la terminología asociada a estas magnitudes y a sus unidades, siendo los argumentos citados en el párrafo anterior un nuevo ejemplo de los tratamientos erróneos que realizan muchos libros de texto y profesores a la hora de definir y de calcular las constantes de equilibrio.

### $K_p$ , $K_c$ y $K^\circ$

Se pueden definir tres constantes de equilibrio:  $K_p$ ,  $K_c$  y  $K^\circ$ . Las dos primeras,  $K_p$  y  $K_c$ , son constantes experimentales y la tercera,  $K^\circ$ , es la constante termodinámica<sup>3-6</sup>.

Nuestra discusión se centrará en equilibrios químicos en los que participan gases. Por ejemplo, en el caso del siguiente equilibrio,



$K_p$  se define como una magnitud experimental

$$K_p = \frac{p_R^r p_S^s}{p_A^a p_B^b} \quad (2)$$

donde  $p_i$  es la presión parcial de cada uno de los gases que participan en la reacción. Estos valores de presión se suelen expresar en atm.

De forma análoga,  $K_c$  se define como

$$K_c = \frac{[R]^r [S]^s}{[A]^a [B]^b} \quad (3)$$

donde los valores de concentración se suelen expresar en mol/L.

Por tanto, en estos casos, las unidades de  $K_p$  deben ser  $(\text{atm})^{\Delta\nu}$ , mientras que las de  $K_c$  deben ser  $(\text{mol/L})^{\Delta\nu}$ , donde,  $\Delta\nu = (r+s) - (a+b)$ . Sin embargo, en el estudio realizado por Quílez<sup>1</sup>, en el 78% de los libros de texto de química general analizados se establecía que tanto  $K_p$  como  $K_c$  son magnitudes adimensionales.

La constante de equilibrio termodinámica se define

$$K^\circ = \frac{\left(\frac{p(R)_{eq}}{p^\circ}\right)^r \left(\frac{p(S)_{eq}}{p^\circ}\right)^s}{\left(\frac{p(A)_{eq}}{p^\circ}\right)^a \left(\frac{p(B)_{eq}}{p^\circ}\right)^b} \quad (4)$$

donde  $p^\circ = 1$  bar. Evidentemente,  $K^\circ$  es una magnitud adimensional.

Así pues, la IUPAC<sup>6</sup> permite el empleo de dos constantes con unidades,  $K_p$  y  $K_c$  y de una tercera constante,  $K^\circ$ , que es adimensional. Conociendo el valor de una de ellas, se puede establecer el de las otras dos. Veamos cómo se relacionan entre sí.

La relación entre  $K_p$  y  $K^\circ$  es inmediata

$$K_p = K^\circ (p^\circ)^{\Delta\nu} \quad (5)$$

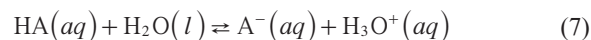
Dado que  $p^\circ = 1$  bar, si las unidades de  $K_p$  son  $(\text{bar})^{\Delta\nu}$ , su valor es idéntico al de  $K^\circ$ . Pero, dado que  $(\text{atm})^{\Delta\nu}$  son normalmente las unidades de  $K_p$ , entonces ambos valores difieren entre sí.

Otra relación es la siguiente

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta\nu} \quad (6)$$

En la expresión (6), si se toma el valor  $R = 0,082 \text{ atm}\cdot\text{L}/\text{mol}\cdot\text{K}$ , resulta evidente que  $K_p$  debe expresarse en  $(\text{atm})^{\Delta\nu}$  y  $K_c$  en  $(\text{mol/L})^{\Delta\nu}$ .

Por otro lado, si bien este trabajo se centra en el caso de equilibrios en los que participan gases, conviene recordar que en el caso de equilibrios en disolución la expresión de la constante de equilibrio termodinámica se define de forma análoga, teniendo en cuenta que el estado estándar de referencia en este caso es  $c^\circ = 1 \text{ mol/L}$  o bien  $c^\circ = 1 \text{ mol/kg}$ <sup>6</sup>. Por ejemplo, para el caso de disociación acuosa de un ácido débil,  $\text{HA}(aq)$ ,



la expresión matemática de la constante de equilibrio termodinámica es

$$K^\circ = \frac{\left(\frac{[\text{A}^-]_{eq}}{c^\circ}\right) \left(\frac{[\text{H}_3\text{O}^+]_{eq}}{c^\circ}\right)}{\left(\frac{[\text{HA}]_{eq}}{c^\circ}\right)} \quad (8)$$

cuyo valor es adimensional y depende del valor de concentración elegido para el estado de referencia. En consecuencia, en el caso de equilibrios en disolución se debe indicar siempre el estado de referencia elegido cuando se proporciona el valor de la constante termodinámica de equilibrio. Para el mismo equilibrio,  $K_c$  se expresa,

$$K_c = \frac{[\text{A}^-]_{eq} [\text{H}_3\text{O}^+]_{eq}}{[\text{HA}]_{eq}} \quad (9)$$

cuyo valor tiene unidades de concentración.

Los valores de  $K^\circ$  y  $K_c$  poseen el mismo valor sólo cuando coinciden las unidades de concentración empleadas y las del estado de referencia elegido. Por ejemplo, si  $c^\circ = 1 \text{ mol/L}$  y los valores de concentración de  $c_i$  se expresan en unidades de mol/L, los valores numéricos de  $K_c$  y  $K^\circ$  coinciden. Pero, si se trata de otras unidades (por ejemplo, mol/kg, en el caso de valores de molalidad), ambas constantes no tienen el mismo valor.

## Tratamiento de las constantes de equilibrio en los libros de texto de química

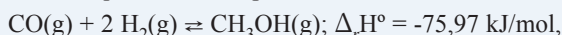
Normalmente, las constantes de equilibrio  $K_p$  y  $K_c$  se definen como una de las características del estado de equilibrio químico, empleando generalmente unidades de atmósferas para los valores de presión parcial y de mol/L para los de concentración. En el nivel universitario, en una etapa más avanzada del tema,

**Tabla 1.** Resumen de los tratamientos incorrectos que realizan libros de texto universitarios de química general al definir y calcular las constantes de equilibrio.

1. Varios libros de texto no explican por qué omiten las unidades cuando efectúan el cálculo de las constantes de equilibrio experimentales ( $K_c$  y  $K_p$ ).
2. En la mayoría de los casos no se hace distinción entre la constante de equilibrio termodinámica,  $K^\circ$ , y las constantes  $K_c$  y  $K_p$ .
3.  $K_c$  y  $K_p$  son magnitudes adimensionales.
  - En algunos casos se explica que las unidades no se proporcionan a las constantes de equilibrio ya que existen modos más precisos de tratamiento de las mismas.
  - En otros libros se señala que es costumbre omitir las unidades de las constantes de equilibrio.
  - Otros textos hacen referencia a las actividades, una vez definida  $K_c$ , señalando que la constante de equilibrio no tiene unidades porque los valores empleados para  $K_c$  son idénticos a los de las concentraciones, pero sin dimensiones.
4.  $K^\circ$  es la misma constante que  $K_p$ .
5.  $\Delta G^\circ = RT \ln K_p$ . Además, las diferentes formas en las que los libros proporcionan información acerca de esta relación matemática contienen una serie de nombres diferentes para la constante de equilibrio termodinámica (por ejemplo,  $K$ ,  $K^\circ$ ,  $K_p$ ,  $K_{eq}$ ,  $K_{th}$ ).
6. Algunos libros calculan la constante de equilibrio con unidades cuando se evalúa a partir de la siguiente ecuación:  $K = e^{-\Delta G^\circ / RT}$ .

### Ejemplo 1

Para el equilibrio correspondiente a la síntesis del metanol,



calcúlese el valor de las constantes de equilibrio  $K^\circ$ ,  $K_p$  y  $K_c$  a 298,15 K.

Datos:  $S^\circ[\text{CO}(g)] = 197,56 \text{ J/K mol}$ ;  $S^\circ[\text{H}_2(g)] = 130,57 \text{ J/K mol}$ ;  $S^\circ[\text{CH}_3\text{OH}(g)] = 239,70 \text{ J/K mol}$ .

(Nota: valores termodinámicos a 298,15 K;  $p^\circ = 1 \text{ bar}$ ).

#### Solución

Para conocer el valor de  $\Delta_r G^\circ$  utilizaremos la siguiente expresión:  $\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \Delta_r S^\circ$ .

$$\Delta_r H^\circ = -75,97 \text{ kJ/mol}.$$

$$\Delta_r S^\circ = S^\circ[\text{CH}_3\text{OH}(g)] - 2S^\circ[\text{H}_2(g)] - S^\circ[\text{CO}(g)] = -219,00 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \Delta_r S^\circ = -10675,15 \text{ J/mol}.$$

$$K^\circ = e^{-\Delta_r G^\circ / RT} = 74,34$$

$K_p = K^\circ / (p^\circ)^2 = 74,34 \text{ bar}^{-2}$ ; como  $1 \text{ atm} = 1,01325 \text{ bar}$ ,  $K_p = 76,32 \text{ atm}^{-2}$ ; además, ya que  $1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$ , también podemos escribir:  $K_p = 7,434 \cdot 10^{-9} \text{ Pa}^{-2}$

$$K_c = K_p (RT)^2 = 76,32 \text{ atm}^{-2} \left[ (0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})(298,15 \text{ K}) \right]^2 = 4,56 \cdot 10^4 (\text{mol/L})^{-2}$$

se suele introducir el concepto de actividad y se realiza un tratamiento termodinámico para introducir y calcular la constante de equilibrio termodinámica. En este desarrollo suelen existir algunas confusiones que generan varios errores. En la Tabla 1 se proporciona un resumen de los principales errores encontrados al analizar el tratamiento de las constantes de equilibrio por los libros de texto universitarios de química general. Un estudio detallado de los distintos casos señalados se puede encontrar en un trabajo previo<sup>1</sup>. Cuando hemos ampliado la muestra a libros de texto de química preuniversitarios en el contexto español, se ha encontrado que, en un 60% de los mismos, los valores de  $K_p$  y de  $K_c$  se expresan sin unidades, sin que se proporcione, en la mayoría de los casos, una explicación de este hecho.

Finalmente, y antes de proceder a ejemplificar el tratamiento adecuado de las constantes de equilibrio, conviene discutir un nuevo aspecto de la constante de equilibrio termodinámica. En el 80% de los libros de química de bachillerato se introduce la expresión  $\Delta G^\circ = RT \ln K_p$ , que también se encuentra presente en la mayoría de los libros universitarios de química general analizados. Esta ecuación posee dos incorrecciones; se asume que: 1)  $K_p = K^\circ$  y 2)  $\Delta G^\circ = \Delta_r G^\circ$ . Nuestra discusión se centrará en profundizar en el análisis del primero de los errores. Para un estudio detallado del segundo error, pueden consultarse dos artículos recientes<sup>7,8</sup>.

### Cálculo de las constantes de equilibrio

En el *ejemplo 1* se realiza el cálculo de  $K^\circ$ ,  $K_p$  y  $K_c$ . En el mismo se calcula el valor de  $K^\circ$ , una vez conocido el valor de  $\Delta_r G^\circ$ . Es decir, a partir de la siguiente expresión

$$\Delta_r G^\circ = -RT \ln K^\circ \quad (10)$$

podemos escribir

$$K^\circ = e^{-\Delta_r G^\circ / RT} \quad (11)$$

El valor de la constante termodinámica,  $K^\circ$ , no sólo depende de la relación estequiométrica de la ecuación que representa la correspondiente reacción química, sino que además también depende del valor de presión usado para definir el estado estándar<sup>9-11</sup>. En el *ejemplo 1* hemos calculado que  $K^\circ = 74,34$  ( $p^\circ = 1$  bar) y entonces  $K_p = 74,34 \text{ bar}^{-2}$ ; pero, si  $p^\circ = 1$  atm (como ocurría hasta 1982)<sup>12</sup>, entonces  $K^\circ = 76,32$  (en general, estas diferencias no suelen ser superiores al 5%). En consecuencia, en la actualidad se cumple:  $K_p = K^\circ (\text{bar})^{\Delta\nu}$ , y hasta 1982 (cuando la Comisión de Termodinámica de la IUPAC recomendó el empleo de  $p^\circ = 1$  bar), se cumplía que  $K_p = K^\circ (\text{atm})^{\Delta\nu}$ . Esta circunstancia puede explicar que en la actualidad muchos libros de texto asuman que la constante de equilibrio termodinámica es  $K_p$ .

Por otro lado, el cambio en el valor de la presión estándar no afecta al valor de  $K_p$ . El mismo depende, como se ha puesto de manifiesto en el *ejemplo 1*, de las unidades empleadas para medir los valores de las distintas presiones parciales. Se han obtenido sendos valores para unidades de bar, atm y Pa.  $K_c$  también posee unidades; lo más habitual es que sean  $(\text{mol/L})^{\Delta\nu}$ .

Por todo lo señalado, en el caso de equilibrios entre gases se debe resaltar que si el cálculo de  $K^\circ$  se refiere al valor actual de presión estándar ( $p^\circ = 1$  bar), el valor de  $K^\circ$  difiere del correspondiente de  $K_p$ , cuando las unidades de presión parcial ( $p_i$ ) no son bar. Es decir, la ecuación  $\Delta_r G^\circ = -RT \ln K^\circ$  (en realidad,  $K^\circ = e^{-\Delta_r G^\circ / RT}$ ) permite encontrar indirectamente el valor numérico correcto de  $K_p$ , ya que es idéntico al de  $K^\circ$  cuando  $p_i$  se miden en bar:  $K_p = K^\circ (\text{bar})^{\Delta\nu}$ , según se ha reiterado en varias ocasiones en la discusión que precede. Por el contrario, si los valores de  $p_i$  no se expresan en bar, se encuentra que en lo que concierne a valores numéricos, se cumple que  $K_p \neq K^\circ$ .

Para el caso de equilibrios en disolución conviene insistir en estos aspectos realizando una breve consideración final. Como ya se comentó cuando se definieron las distintas constantes de equilibrio, en el caso de que  $c^\circ = 1$  mol/L, los valores de  $K_c$  y  $K^\circ$  coinciden si las unidades de concentración de  $c_i$  son mol/L, pero ambas constantes poseen valores diferentes si  $K_c$  se calcula con valores de concentración expresados en otras unidades. Por ejemplo, a 25 °C, para el ácido acético  $K_c = 1,751 \cdot 10^{-5} \text{ mol/L}$  y  $K^\circ = 1,751 \cdot 10^{-5}$ , pero si las unidades de concentración utilizadas son de molalidad (mol/kg), entonces  $K_c = 1,756 \cdot 10^{-5} \text{ mol/kg}$ <sup>13</sup>. Análogamente, cuando  $c^\circ = 1$  mol/kg, los valores de  $K_c$  y  $K^\circ$  sólo coinciden si los valores de  $c_i$  se expresan en unidades de mol/kg.

## Conclusiones

Las constantes de equilibrio experimentales,  $K_p$  y  $K_c$ , poseen dimensiones (por ejemplo,  $K_p$ :  $(\text{atm})^{\Delta\nu}$ ,  $(\text{bar})^{\Delta\nu}$ ,  $(\text{Pa})^{\Delta\nu}$ ;  $K_c$ :  $(\text{mol/L})^{\Delta\nu}$ ,  $(\text{mol/kg})^{\Delta\nu}$ ) y la constante de equilibrio termodinámica,  $K^\circ$ , es una magnitud adimensional.

En general, el valor de  $K^\circ$  depende del estado de referencia elegido. En equilibrios entre gases, el valor de  $K^\circ$  depende del valor de presión usado para definir el estado estándar, a

diferencia del valor de  $K_p$ . En la actualidad, ya que  $p^\circ = 1$  bar, cuando los valores de  $p_i$  se miden en atmósferas, los valores de  $K_p$  y  $K^\circ$  no coinciden, pero sí se cumple que  $K_p = K^\circ (\text{bar})^{\Delta\nu}$ .

En la mayoría de los libros de texto de química general la constante de equilibrio termodinámica se expresa sin dimensiones, pero se suele extender este carácter adimensional a las constantes de equilibrio  $K_p$  y  $K_c$ , estableciéndose, además, por lo general, que en el caso de equilibrios entre gases los valores de  $K_p$  y  $K^\circ$  coinciden siempre, de modo que incluso en ocasiones la constante de equilibrio termodinámica se designa como  $K_p$ . Quizás ello se deba en parte a que todavía se sigue empleando como valor de presión estándar  $p^\circ = 1$  atm, en lugar de  $p^\circ = 1$  bar.

Muchos libros de texto, tanto universitarios de química general como de segundo de bachillerato, emplean incorrectamente la ecuación  $\Delta_r G^\circ = -RT \ln K_p$  para el cálculo de la constante de equilibrio termodinámica, asumiéndose, en consecuencia, que  $K_p = K^\circ$ . Esta circunstancia induce a pensar que  $K_p$  también es una magnitud adimensional. Los autores de libros de texto de química general deberían ser más precisos con la terminología usada a la hora de definir y de calcular las distintas constantes de equilibrio, evitando con ello las confusiones y los errores presentes actualmente en los mismos. En el caso de los libros de química de segundo de bachillerato bastaría con no introducir la ecuación referida ya que este tratamiento termodinámico no se encuentra incluido en el currículum oficial de este nivel.

Los libros de texto de química de segundo de bachillerato deberían definir únicamente las constantes de equilibrio  $K_p$  y  $K_c$ , y expresar sus valores con las correspondientes unidades. La introducción de la constante de equilibrio termodinámica, su cálculo y su relación con  $K_p$  y  $K_c$  se deberían posponer para un estudio más avanzado en el nivel universitario, evitándose con ello las confusiones existentes en la actualidad.

## Bibliografía

1. J. Quílez, *J. Sci. Educ.* **2008**, *9*, 86–88.
2. F. A. Centellas, *EduQ.* **2008**, *1*, 10–16.
3. F. Brénon-Audat, C. Busquet, C. Mesnil, *Thermodynamique Chimique*. Hachette: París. **1993**.
4. I. M. Mills, *J. Chem. Educ.*, **1989**, *66*, 887–889.
5. I. M. Mills, *J. Chem. Educ.* **1995**, *72*, 954–955.
6. I. M. Mills, T. Cvitas, K. Homann, N. Kallay, K. Kuchitsu (Eds). *Quantities, Units, and Symbols in Physical Chemistry*, Blackwell, Oxford, **1993**.
7. J. Quílez, *Ens. Cien.* **2009**, *27*, 317–330.
8. J. Quílez, *J. Chem. Educ.* **2012**, *89*, 87–93.
9. R. D. Freeman, *J. Chem. Educ.* **1985**, *62*, 681–686.
10. R. J. Tykodi, *J. Chem. Educ.* **1986**, *63*, 582–585.
11. R. S. Treptow, *J. Chem. Educ.* **1999**, *76*, 212–215.
12. J. D. Cox, *Pure Appl. Chem.* **1982**, *54*, 1239.
13. A. D. Pethybridge, I. M. Mills, *Ed. Chem.* **1979**, *16*, 191.

# Introducción a la química de los polímeros biodegradables: una experiencia para alumnos de segundo ciclo de la ESO y Bachillerato

Francisco G. Calvo-Flores y Joaquín Isac

**Resumen:** En el presente artículo se diseña una actividad teórico-práctica dirigida a alumnos de segundo ciclo de la ESO y bachillerato, encaminada a la preparación de materiales poliméricos biodegradables a partir de patatas, cola blanca (acetato de polivinilo), alcohol polivinílico y algodón, con diversas texturas, colores y propiedades mecánicas en función del método de obtención y de la adición de plastificantes y colorantes. Dicha actividad ha sido parte del Campus Científico de Verano desarrollado en la Universidad de Granada.

**Palabras clave:** Polímeros biodegradables, prácticas de laboratorio, enseñanza no universitaria.

**Abstract:** In this paper, a theoretical-practical activity is designed to high school students, in order to prepare biodegradable polymeric materials from potatoes, polyvinyl acetate, polyvinyl alcohol and cotton, with several textures, colours and mechanical properties depending on the synthetic procedure and the addition of plastificants. This activity was developed, partially at University of Granada into a Summer Scientific Campus.

**Keywords:** Biodegradable Polymers, laboratory experiments, high school teaching.

## Introducción

Los materiales poliméricos tienen una presencia en la vida cotidiana cada vez más evidente<sup>1</sup>. Sin embargo, su tratamiento en los niveles educativos de enseñanza secundaria obligatoria y bachillerato suele ser superficial, a pesar de la importancia y sus enormes aplicaciones prácticas.

El objetivo de este trabajo es el diseño de cuatro actividades de tipo teórico-práctico para introducir a alumnos participantes en los Campus Científicos de Verano celebrados en la Universidad de Granada en la química de los polímeros. Los participantes en dichos Campus son alumnos que cursan, en el año académico en el que se realiza la convocatoria, cuarto curso de Enseñanza Secundaria Obligatoria o primer curso de Bachillerato de las áreas científica y/o tecnológica.

A lo largo de todas las actividades propuestas se potencia la concienciación de los estudiantes acerca de los problemas

medioambientales generados por las malas prácticas relacionadas con el uso y posterior eliminación de los materiales poliméricos.

Aunque las actividades se han realizado en los laboratorios del Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Granada, pueden adaptarse con relativa facilidad a un entorno no universitario, con recursos más limitados.

## Fundamentos teóricos

Antes de realizar el trabajo de laboratorio se procede a la explicación a los alumnos de algunos conceptos teóricos básicos necesarios para la comprensión y realización del trabajo práctico de acuerdo con los siguientes ítems.

### Definición de polímero y sus tipos

A partir de la etimología de la palabra polímero: *polys* (πολύ) mucho y *meros* (μέρος) parte,<sup>2</sup> se puede introducir al alumno en el concepto de polímero. Según la IUPAC, un polímero es una macromolécula, es decir, una molécula con masa molecular relativamente grande, formada esencialmente por la repetición múltiple de unidades derivadas de otras moléculas de masa molecular más pequeña denominadas monómeros mediante el proceso de polimerización.<sup>3</sup> Un ejemplo concreto se puede ver en la Figura 1, que representa la formación del poliestireno a partir del estireno que es el correspondiente monómero.

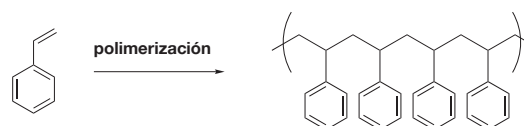


Figura 1. Polimerización del estireno.

Como modelo visual se propone el uso de clips de colores. Este sistema de visualización permite abordar fácilmente, por ejemplo, el concepto de monómero, como componente básico



F. G. Calvo-Flores



J. Isac

Grupo de Modelización Molecular  
Departamento de Química Orgánica. Facultad de Ciencias.  
Universidad de Granada  
Severo Ochoa s.n. Campus Fuentenueva.  
18071 Granada  
C-e: fgarcia@ugr.es

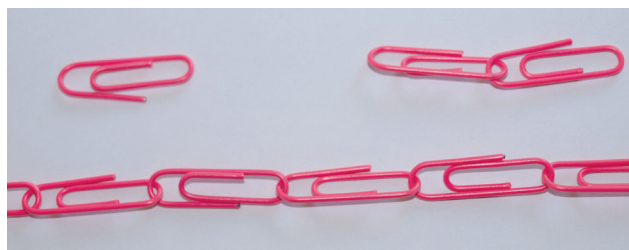
Recibido: 12/07/2012. Aceptado: 07/12/2012.

de un polímero, dímero, como la unión entre dos monómeros y polímero (Figura 2).

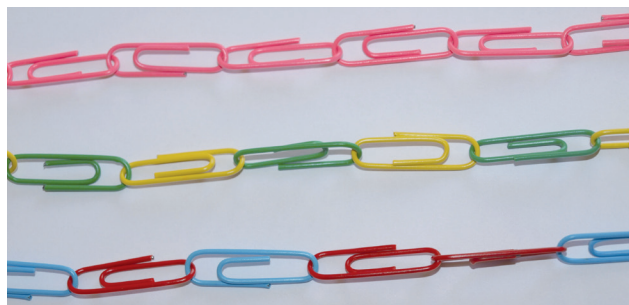
En una segunda fase se puede definir el concepto de homopolímero entendido éste como la macromolécula formada por un solo tipo de monómero, y copolímero, es decir como el material obtenido a partir de dos o más tipos de monómeros diferentes que se unen entre sí. El uso de clips de colores permite la descripción de homopolímeros y copolímeros alternados, aleatorios o por bloques sin dificultad (Figura 3).

En este apartado se indica al alumno que los polímeros no son una invención humana, con ejemplos de materiales como el cabello, la lana o el algodón se le mostrará hasta qué punto están extendidos los polímeros en la naturaleza y cómo cuando están formados por los seres vivos reciben, según la IUPAC, el nombre genérico de biopolímeros.<sup>3</sup>

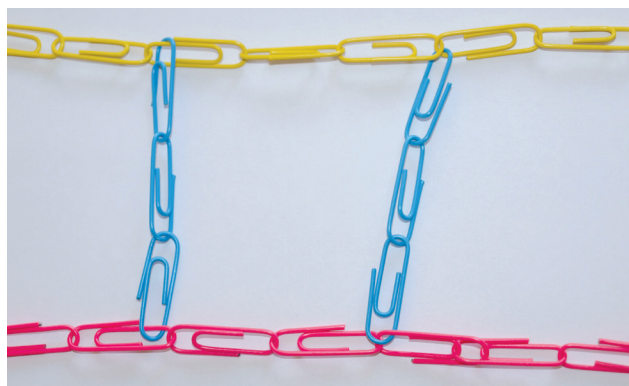
Por último, dentro de este bloque se define el concepto de entrecruzamiento entre cadenas de polímeros, entendido como



**Figura 2.** Modelo de monómero, dímero y polímero basado en clips coloreados.



**Figura 3.** Modelo de homopolímero y copolímero con ordenación alternada y aleatoria.



**Figura 4.** Modelo de polímero entrecruzado.

la unión entre cadenas de polímeros a través de otros átomos o moléculas y cómo puede influir este efecto en las propiedades finales del material. Como modelo para visualizar esta propiedad, se puede usar de nuevo un modelo basado en clips, tal como se puede apreciar en la Figura 4. La formación de cadenas de clips resulta un modelo adecuado para la visualización de las cadenas formadas por uniones de tipo covalente.

### Clasificación de los materiales poliméricos

En otro bloque de la explicación previa, se pueden abordar las diferentes clasificaciones posibles para los materiales poliméricos (Tabla 1).<sup>4</sup> Debido al nivel de conocimientos que presentan los alumnos a los que va dirigida esta actividad, se pueden obviar algunas clasificaciones como las que aluden a la formación y tacticidad, que pueden resultar complejas y que no aportan mucho para los objetivos propuestos.

**Tabla 1.** Clasificaciones de los materiales poliméricos.

Bases de la clasificación	Tipo
Origen	Natural, sintético, semisintético
Respuesta térmica	Termoestables, termoplásticos
Formación	Adición, condensación
Estructura	Lineales, ramificados, entrecruzados
Aplicaciones	Fibras, plásticos, elásticos
Tacticidad	Isotácticos, sindiotácticos, atácticos

### Aplicaciones

En este bloque se puede explicar, basado en la propiedades<sup>5</sup> de los polímeros, tales como su resistencia, termoplaticidad, dureza, conductividad o aislamiento eléctrico, etc., algunas aplicaciones que explican tales su uso masivo en la vida cotidiana en materiales tan diversos como en el recubrimiento de cables eléctricos, la fabricación de lentes orgánicas en óptica, la fabricación de envases de todo tipo, textiles, tuberías o cuerdas (Figura 5), o la fabricación de prendas y chalecos antibalas con Kevlar<sup>®</sup>, un polímero cuya estructura se describe en la Figura 6, y que es cinco veces más resistente que el acero<sup>6</sup>.



**Figura 5.** Objetos fabricados con polímeros.

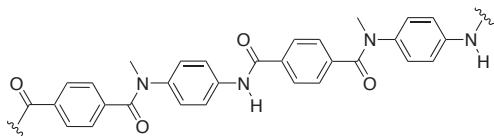


Figura 6. Estructura del Kevlar®.

Una vez llegados a este punto, se hará ver al alumno que los polímeros que se comercializan son en realidad las denominadas *formulaciones*, en donde a un polímero base se le añaden una serie de aditivos para modificar sus propiedades; como por ejemplo los retardantes de llama, colorantes o plastificantes, entre otros. Estos últimos se definirán como moléculas de pequeño tamaño tales como agua, urea, glicerol, ftalatos, etc. y, que se intercalan en las cadenas de los polímeros, modificando sus propiedades mecánicas, y por tanto, su capacidad para la fabricación de objetos, por ejemplo, con mayor o menor rigidez.

Como modelo, se puede describir el caso del almidón ya que es el que van a usar los alumnos en el trabajo de laboratorio y cómo se ve afectada su flexibilidad por la presencia o ausencia de plastificantes (Figura 7).

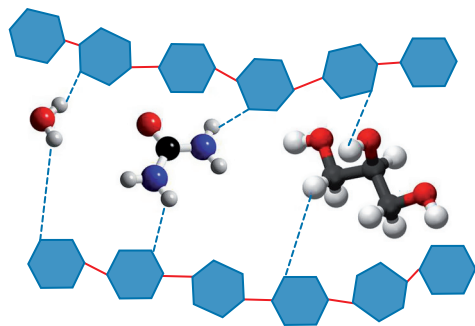


Figura 7. Modelo de plastificantes entre cadenas de almidón.

### Polímeros y medio ambiente

En este último bloque se procede a plantear la problemática medioambiental del uso de polímeros en la vida cotidiana, tanto en el proceso de fabricación, como una vez que se supera la vida útil del objeto. Por un lado, la mayor parte de los polímeros disponibles en el mercado, se obtienen a partir de materias primas agotables, lo cual supone a medio plazo una dificultad, en cuanto a su disponibilidad futura, y por otro lado, la difícil degradación en el medio ambiente de la mayoría de los polímeros que se obtienen hoy en día a partir del petróleo. Por citar un caso de problema ambiental, podemos mencionar el de las anillas de plástico que sirven para empaquetar las latas de bebidas y que supone un serio perjuicio para los animales acuáticos.

Finalmente se fija la atención del alumno en tres vías para la mejora de los posibles efectos no deseados sobre el medio ambiente de los materiales poliméricos haciendo especial mención sobre el tercer punto.

1. Reciclado de materiales fabricados con polímeros evitan su vertido al medio ambiente mediante transformación en otros objetos.

2. Uso de materias primas renovables en la fabricación de los polímeros frente a las materias primas agotables.
3. Fabricación de polímeros biodegradables.

### Polímeros biodegradables

Para introducir el concepto de biodegradabilidad,<sup>7</sup> se puede diseñar un modelo sencillo que queda reflejado en la Figura 8, basado en cómo los microorganismos actúan, preferentemente, cuando encuentran en la materia orgánica, en general, y en los polímeros en particular, lugares más propicios para la degradación, como los átomos de nitrógeno y oxígeno,<sup>8</sup> que en el caso de los polímeros deben estar preferentemente intercalados en las cadenas de la macromolécula, para que el ataque de los microorganismos en el proceso de biodegradación se vea favorecido.

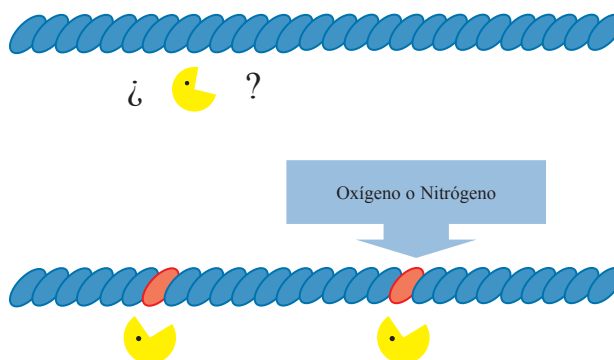


Figura 8. Modelo de polímeros biodegradables y no biodegradables.

### Trabajo de laboratorio

#### Primera actividad: obtención de polímeros a partir de patatas

El almidón es un polímero de origen natural presente en los cereales o las patatas, formado por unidades de glucosa. Es un componente fundamental de la alimentación humana, pero a su vez puede usarse como base para la elaboración de polímeros semisintéticos, de múltiples aplicaciones, por adición de moléculas como urea o glicerol que se intercalan en las cadenas de amilosa y/o amilopectina modificando las propiedades mecánicas del polímero natural (ver Figura 7). Basándose en estas propiedades se procederá a la preparación de polímeros.<sup>9</sup>

#### Procedimiento

El almidón de la patata se extrae rallando 100 g de patatas mediante un rallador de cocina. La patata rallada se coloca en un mortero al que se le añaden 100 mL de agua y con ayuda del pistilo se machaca la ralladura hasta formar una pasta lo más homogénea posible (Figura 9). La mezcla se filtra con un colador sobre un vaso de precipitado. La operación se realiza dos veces sobre cada muestra de patata para aumentar la eficiencia en la obtención del almidón. La mezcla se deja reposar hasta que se forma en el vaso de precipitado un depósito con una pasta. Se decanta para eliminar la mayor parte del



líquido sobrenadante evitando que se remueva y finalmente, con la ayuda de una pipeta Pasteur, se elimina el agua que no se pudo quitar por decantación y sobre este material se realiza la siguiente operación. Se lleva a cabo dos veces para disponer de dos muestras de almidón.

#### a. Obtención de un polímero quebradizo

##### Reactivos

- Patatas.
- Glicerol, 2 mL.
- Disolución de ácido clorhídrico 0,1M, 3 mL.
- Disolución de hidróxido de sodio 0,1M, 3 mL.
- Colorante alimentario.

A una muestra de almidón obtenido según el procedimiento indicado, se le añaden 20 mL de agua y 3 mL de ácido clorhídrico 0,1 M. La mezcla se calienta suavemente procurando que no llegue a ebullición durante 15 minutos.



Figura 9. Procesado de las patatas.



Figura 10. Polímeros obtenidos a partir de patatas.

Se añade gota a gota una disolución de NaOH 0,1 M hasta neutralidad, comprobando el resultado con un trozo de papel indicador. Se obtiene un líquido viscoso al que se le añade dos gotas de colorante alimentario. Se mezcla con ayuda de una varilla de vidrio hasta formar una pasta homogénea. Se extiende sobre un vidrio de reloj hasta formar una película y se introduce en una estufa a 80 °C durante 1,5 horas aproximadamente, o bien se deja secar al aire hasta el día siguiente.

#### b. Obtención de un polímero flexible.

Se sigue un procedimiento análogo al caso anterior adicionando 2 mL de glicerol como agente plastificante. Una vez obtenidos se comparan ambos materiales (Figura 10).

#### Segunda actividad: fabricación de una canica saltarina

La cola blanca o cola alemana es un polímero que fue preparado por primera vez por el químico alemán Fritz Klatte (1880-1934) en 1912.<sup>10</sup> Se obtiene mediante la polimerización espontánea del acetato de vinilo, el cual se prepara a partir de etileno, haciendo reaccionar éste con oxígeno y ácido acético en presencia de un catalizador de paladio.<sup>11</sup> (Figura 11).

##### Reactivos

- Cola blanca.
- Bórax.
- Harina de maíz comercial.

##### Procedimiento

En un vaso de precipitado de 50 mL se mezclan dos cucharadas de agua caliente y media cucharada de polvo de bórax agitando suavemente con una varilla de vidrio. En un segundo vaso de precipitado se vierte una cucharada de cola blanca (acetato de polivinilo), y se le añade media cucharada de solución de bórax sin remover. Se adiciona a esta mezcla de cola y bórax, una cucharada de almidón de maíz. Se espera 10 o 15 segundos y se agita hasta que se endurezca. Con ayuda de una cucharilla se retira la mezcla del vaso de precipitado y se tomará entre las manos (será pegajosa y no tendrá una forma definida). Se amasa la mezcla hasta formar una pelota, que cuanto más se amase menos pegajosa será. Una vez formada la bola ya se podrá botar y jugar con

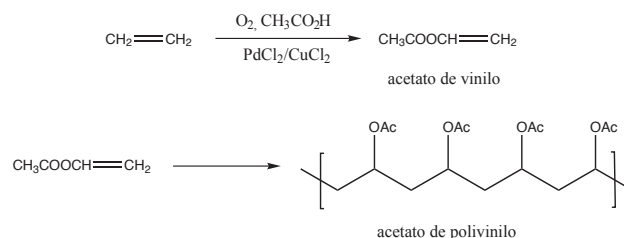


Figura 11. Reacciones de síntesis del acetato de polivinilo.



Figura 12. Canica saltarina.

ella (Figura 12). Se pueden alterar las proporciones de los materiales usados para conseguir distintas texturas así como adicionar unas gotas de colorante alimentario para obtener pelotas de distintos colores.<sup>12</sup> Para una mejor conservación, se puede guardar en una bolsa de auto-cierre.

### Tercera actividad: Obtención de *slime*

*Slime* significa en inglés baba. Este nombre se aplica a un polímero no tóxico y biodegradable que se prepara a partir de alcohol polivinílico (PVA), bórax y al que se le puede añadir un colorante o fluoresceína. El PVA es un polímero que a su vez se prepara a partir del acetato de polivinilo, por tratamiento de éste con hidróxido sódico en metanol (Figura 13). No es un proceso de polimerización, sino de la transformación de un polímero en otro.

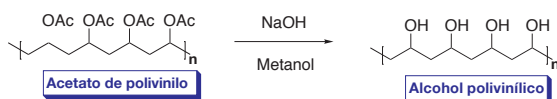


Figura 13. Reacción de síntesis del alcohol polivinílico (PVA).

El PVA presenta múltiples aplicaciones como por ejemplo, preparación de lágrimas artificiales y disoluciones para conservar lentillas, lubricantes, como barrera para agentes químicos en guantes de laboratorio, bolsas de detergente que se disuelven, emulsionante, estabilizar muestras biológicas para su análisis, preparar otros polímeros, etc. Existen en el mercado diferentes tipos de PVA con diversos rangos de masa molecular. Dependiendo del alcohol polivinílico que se use, se obtendrá un material más o menos denso, que según sus características se utiliza para la fabricación de juguetes, fluido para reparar pinchazos o en efectos especiales en el mundo del espectáculo para hacer sangre viscosa, máscaras para caracterizar a zombis y cadáveres, simular heridas, etc.

El bórax es el tetraborato de sodio decahidratado ( $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ ) que al disolverse en agua se hidroliza dando ácido bórico e iones hidroxilo ( $\text{OH}^-$ ), dando un pH próximo a 9.<sup>13</sup> Posteriormente, el ácido bórico reacciona con el agua para formar el anión borato. Cuando se mezclan una disolución acuosa de bórax y PVA, el ion borato se intercala

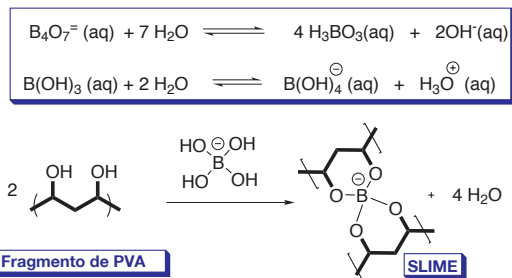


Figura 14. Estructura del *Slime*.



Figura 15. Alumna manipulando una muestra de *Slime*.

entre las cadenas del polímero (Figura 14), formando enlaces covalentes,<sup>14</sup> lo cual lleva a una modificación de sus propiedades para dar un material viscoso (Figura 15). No obstante, hay otras fuentes que postulan la formación de puentes de hidrógeno entre los iones borato y los hidroxilos de las cadenas de alcohol polivinílico.<sup>13</sup> La viscosidad del material obtenido dependerá de la masa molecular del PVA empleado en la experiencia y de la proporción de bórax usada ya que ésta determinará el grado de entrecruzamiento de las cadenas. Para este caso concreto se usó un PVA de masa molecular en torno a 130,000 u.m.a. (Mowiol® 18-88 de Sigma-Aldrich®).

### Reactivos

- Bórax, 1 g.
- Alcohol polivinílico, 4 g.
- Fluoresceína.
- Colorante alimentario.

### Procedimiento

Se disuelve 1 g de bórax en 25 ml de agua. Simultáneamente se prepara otra disolución de 4 g de alcohol polivinílico en 100 mL de agua. Para conseguir una total disolución de éste es conveniente calentar suavemente la mezcla a una temperatura que no supere los 50 °C. En este punto se añaden unas gotas de colorante alimentario o bien fluoresceína a la disolución de alcohol y se mezclan ambas disoluciones. Rápidamente se forma el *slime* que se puede guardar en una bolsa de plástico

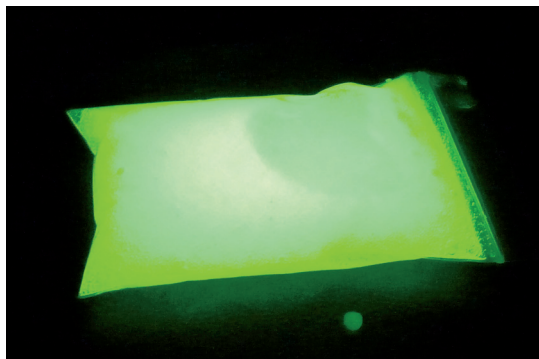
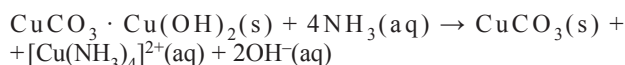


Figura 16. Slime fluorescente.

con auto cierre para evitar que se seque. Cuando se adicione fluoresceína, se puede comprobar la fluorescencia del material iluminando con una lámpara UV de una muestra (Figura 16).

#### Cuarta actividad: preparación de rayón

El rayón es una fibra que se obtiene a partir de la celulosa. Las fibras obtenidas se pueden teñir, hilar y tejer por lo que son muy usadas en la industria textil para la fabricación de toda clase de prendas, en decoración para la confección de colchas, mantas, tapicerías..., y en otras ramas de la industria (material quirúrgico, productos no tejidos, armazón de neumáticos...) y otros. Están descritos varios procedimientos para la preparación de rayón.<sup>17</sup> En esta actividad se emplea el método denominado de cupramonio que usa sales de cobre e iones amonio y algodón o papel de filtro como fuente de celulosa.<sup>18</sup> La reacción es:



En este caso el cobre se asocia a los grupos -OH de las cadenas de celulosa (Figura 17).<sup>15,16</sup> El tratamiento con ácido sulfúrico 1 M del material obtenido, conduce a la formación de rayón.

#### Reactivos

- $\text{CuCO}_3 \cdot \text{Cu(OH)}_2$ , 10 g.
- Algodón, 2 g.
- Disolución de amoníaco concentrado, 100 mL.
- Disolución de ácido sulfúrico, 1 M, 500 mL.

#### Procedimiento

Se colocan 10 g de  $\text{CuCO}_3 \cdot \text{Cu(OH)}_2$  en un vaso de precipitado de 250 mL y se añaden 100 mL de amoníaco concentrado. La mezcla se agita magnéticamente durante dos minutos en una vitrina de gases. Se deja reposar y se decanta la disolución de color azul profundo obtenida, que contiene tetramincobre (II) vertiéndola en un segundo vaso de precipitados de 250 mL. A esta disolución se le añaden 2 g de algodón en porciones pequeñas lo más deshilachado posible, lentamente y con una buena agitación, hasta que la solución tiene la consistencia de un gel.

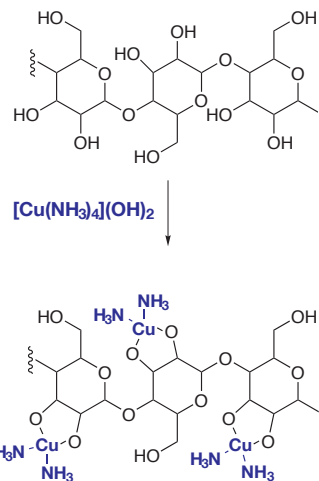


Figura 17. Celulosa modificada.

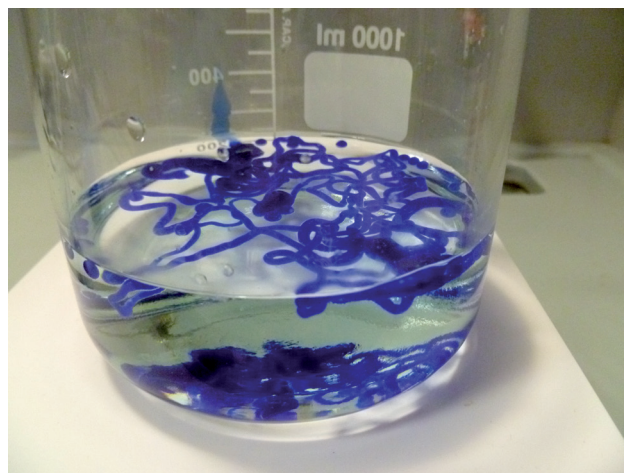


Figura 18. Fibras de rayón en un baño de ácido sulfúrico 1M.

Hay que agitar hasta que no queden grumos, evitando la formación de burbujas de aire en el líquido. La disolución completa del algodón puede tardar hasta una hora. Con ayuda de una espátula o de una cucharilla, se toma una cantidad de esta disolución con aspecto de gel, que se llama *viscosa*, y se llena una jeringa de plástico evitando introducir cualquier resto de grumos. Posteriormente, se inyecta el contenido de la jeringa sobre unos 500 mL de ácido sulfúrico 1 M en un vaso de precipitados de 1000 mL en una cubeta de plástico. Se obtienen unas fibras cuyo grosor dependerá de la jeringa usada que están impregnadas del complejo de cobre (Figura 18). Al cabo de unos minutos se observa la decoloración de las fibras que se pueden secar sobre un papel de filtro.

#### Conclusiones

En los laboratorios del Departamento de Química Orgánica de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Granada se han realizado las actividades descritas como parte del Campus Científico de Verano CEI BioTic de esta Universidad, en su segunda edición. El objetivo fue de iniciar a alumnos de 4º de ESO y 1º de Bachillerato en la química de

los polímeros mediante la realización de cuatro actividades de tipo práctico precedidas de una introducción teórica. En todos los casos, los participantes en el Campus han mostrado una actitud muy positiva y un gran interés tanto por el trabajo de laboratorio como por las explicaciones recibidas. Debido al tipo de reactivos utilizados, y los procedimientos usados, dichas actividades pueden adaptarse a otro tipo de laboratorios con recursos más limitados.

### Agradecimientos

Los autores agradecen a la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología, al Ministerio de Educación, Cultura y Deporte y a la Obra Social “la Caixa” la financiación recibida, así como a la Dra. Doña Ana García López (Departamento de Ingeniería Química de la UGR) su labor como coordinadora del proyecto Campus Científico de Verano CEI BioTic de la Universidad de Granada.

### Bibliografía

1. R. J. Young, P. A. Lovell, *Introduction to Polymers*, 3ª Ed, CRC Press, **2011**.
2. Etimología y origen de algunos términos científicos. Universidad de Valencia <http://www.uv.es/~jaguiar/historias/etimol.html>, visitada el 22/02/2013.
3. *IUPAC Compendium of Chemical Terminology. The Gold Book edición online*. <http://goldbook.iupac.org/>, visitada el 22/02/2013.
4. P. Ghosh, *Polymer Science and Technology: Plastics, Rubbers, Blends and Composites*, 2ª Ed., pg 5, McGraw-Hill, **2001**.
5. D. M. Teegarden, *Polymer Chemistry: Introduction to an Indispensable Science*, National Science Teachers Association, Capítulo 8, **2004**.
6. <http://bit.ly/IrEetx>, visitada el 22/02/2013.
7. G. E. Luckachan, C. K. S. Pillai, *J. Polym. Environ.* **2011**, *19*, 637–676.
8. B. Puyuelo, S. Ponsá, T. Gea, A. Sánchez, *Chemosphere* **2011**, *85*, 653–659.
9. <http://bit.ly/UpydSz>, visitada el 22/02/2013.
10. Patente alemana GP 281687, **1912**.
11. *McGraw-Hill Dictionary of Scientific and Technical Terms*, 6ª Ed., **2002**.
12. <http://bit.ly/139DpdG>, visitada el 22/02/2013.
13. E. Z. Casassa, A. M. Sarquis, C. H. Van Dyke, *J. Chem. Educ.* **1986**, *63*, 57–60.
14. L. V. Angelova, P. Terech, I. Natali, L. Dei, E. Carretti, R. G. Weiss, *Langmuir* **2011**, *27*, 11671–11682.
15. <http://bit.ly/VahqSz>, visitada el 22/02/2013.
16. G. B. Kauffman, M. Karbassi, *J. Chem. Educ.* **1985**, *62*, 878.
17. M. A. Knopp, *J. Chem. Educ.* **1997**, *74*, 401.
18. L. J. Pickard, M. E. Harris, *J. Chem. Educ.* **1999**, *76*, 1512–1513.

## International School on Biological Crystallization

The 'Laboratorio de Estudios Cristalográficos' is pleased to announce the  
**4<sup>th</sup> International School on Biological Crystallization (ISBC2013)**  
**Granada, May 26<sup>th</sup> to 31<sup>st</sup>, 2013**

The aim of the School is to introduce all participants into the fundamental knowledge about the behaviour of crystallizing solutions and their applications to the field of **biomacromolecules crystallization**, including **large crystals for neutron diffraction and tiny crystals for XFEL**.

One day will be fully devoted to case studies on the crystallization of **membrane proteins, viruses and large macromolecular complexes**.

ISBC2013 is intended for postgraduate/postdoctoral students and research scientists from industrial and academic backgrounds

This School is part of the Master in Crystallography and Crystallization  
 UIMP/CSIC Official Program



# Trabajos experimentales de química y de física con un estropajo de acero

María Luisa Prolongo-Sarria

**Resumen:** En este artículo se describen un conjunto de actividades educativas experimentales que se han desarrollado con alumnos de Educación Secundaria, con los objetivos fundamentales de motivarles y de profundizar en diversos aspectos físicos y químicos. El hilo conductor de las actividades es el uso, como material de partida, de estropajo de acero (también conocido como lana de acero), fácilmente accesible en supermercados, droguerías y ferreterías. En las actividades se trabaja con diversos fenómenos físicos (efecto Joule, magnetismo, tensión superficial...) y con reacciones químicas (pilas de combustible, formación de fuegos artificiales, reacciones de formación de complejos, reducción-oxidación, precipitación...) que se pueden realizar con el hierro, componente fundamental del estropajo de acero.

**Palabras clave:** Química del hierro, experiencias prácticas, educación secundaria, estropajo de acero.

**Abstract:** In this paper, experiments concerning different physical and chemical properties are shown, with the aim of motivating and to improve the learning process in secondary students. All activities have in common the use of steel scourer (also known as steel wool or wire wool), easily available in supermarkets, drugstores or ironmonger's shops. This is due to the fact that every activity can be carried out with iron, the fundamental component of the steel scourer. Different physical phenomena (Joule effect, magnetism, surface tension...) and chemical reactions (fuel cells, fireworks formation, complexation reactions, redox, precipitation...) were studied.

**Keywords:** Iron chemistry, experiments, secondary education, steel scourer.

## Introducción

La utilización de un producto comercial para introducir diversas actividades de física y/o de química para alumnos de diversos niveles educativos es un recurso que, si bien no es habitual en la práctica educativa, sí que se recoge en distintos trabajos en la bibliografía. Así, se pueden destacar trabajos publicados en esta misma revista, sobre aspectos particulares como la preparación de mermelada<sup>1</sup> o estudios sobre el azúcar<sup>2</sup> como recursos didácticos. Sin ánimo de exhaustividad, se pueden destacar otros casos que inciden en la importancia de contextualizar la ciencia,<sup>3</sup> mediante el estudio de minerales que se aplican en la vida cotidiana,<sup>4</sup> el agua potable,<sup>5</sup> las bebidas autocalentables y autoenfriables,<sup>6</sup> los dentífricos,<sup>7</sup> las sustancias antipolillas,<sup>8</sup> el cocinado de alimentos<sup>9</sup> o la información ofrecida en etiquetas de productos habituales,<sup>10</sup> por citar algunos ejemplos.

Los objetivos de todos estos casos suelen ser comunes. Por una parte, se intenta motivar a los alumnos hacia el estudio de diversas propiedades y características de distintos

materiales y sustancias, a través de un utensilio, sustancia o material común y bien conocido. Por otra parte, se pretende que el estudio focalizado en ese objeto o experiencia de la vida cotidiana sirva para estudiar distintos fenómenos.

En este trabajo, se muestran un conjunto de actividades educativas experimentales que se han desarrollado con alumnos de Educación Secundaria, con los dos objetivos generales indicados. En algún caso, como el estudio detallado de reacciones de formación de complejos, se exceden los objetivos educativos de dicho nivel, pero se recogen en este trabajo para su posible adaptación para Bachillerato y primeros cursos universitarios.

El hilo conductor de las actividades es el uso, como material de partida, de estropajo de acero (también conocido como lana de acero), fácilmente accesible en supermercados, droguerías y ferreterías.

Este material está formado por hebras de fibras de acero y se usa fundamentalmente para limpieza y pulido de objetos, tanto a nivel industrial como en el hogar, por lo que es ampliamente conocido.

La base fundamental de las actividades propuestas son diversos fenómenos y reacciones químicas que se pueden realizar con el hierro, componente fundamental del estropajo de acero. Las reacciones y sus peculiares propiedades se ven favorecidas por la gran relación superficie/volumen que presenta este material comercial.

Un objetivo adicional es facilitar la posibilidad de trabajar en el laboratorio con productos económicos y de uso corriente, demostrando con ellos fenómenos físicos y químicos que se han estudiado previamente en clase.

Hace ya una década, Schwedt publicó el libro "*Experimente mit Supermarktprodukten. Eine chemische Warenkunde*",<sup>11</sup> donde recopiló una serie de ensayos y experimentos que se desarrollaron en el "*Clausthaler SuperLab*", el laboratorio de prácticas escolares del Instituto de Química Inorgánica y Analítica de la Universidad Técnica de Clausthal. Como se



M. L. Prolongo

Departamento de Física y Química, IES Manuel Romero,  
Villanueva de la Concepción, 29230 Málaga.  
C-e: [marisaprolongo@hotmail.com](mailto:marisaprolongo@hotmail.com)

Recibido: 09/01/2013. Aceptado: 04/02/2013.

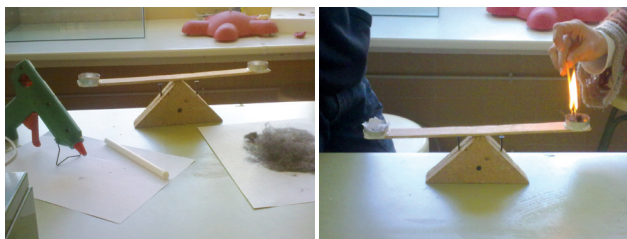
indica en la introducción de este libro, la iniciativa surgió como un proyecto dentro de un programa denominado PUSH (*Public Understanding of Science and Humanities*) que buscaba mejorar el diálogo entre ciencia y sociedad. El proyecto trataba de contrarrestar el prejuicio ampliamente extendido según el cual se deben utilizar cosas o productos que “no contengan química”. Para responder a ese prejuicio, Schwedt indicaba que “todo lo que tiene que ver con nuestra vida es química”, y propone en su obra nada menos que 160 experiencias con “productos del supermercado”.

Algunas de las experiencias recogidas en este trabajo hacen uso de propuestas del citado libro, si bien no se articulaban en torno a estropajos de acero, como es el caso del presente estudio, sino a otro tipo de materiales. También se han recogido experiencias de páginas web seleccionadas<sup>12,13</sup> y de los textos de Gillespie *et al.*<sup>14</sup> y de las Profesoras Martín Sánchez.<sup>15</sup>

## Experimentos sobre fenómenos físicos y químicos realizados con estropajo de acero

### Experiencia 1: Demostración del cambio de masa en combustión

Necesitamos un estropajo, una regla grande de madera, papel de aluminio, cuña de madera, plastilina y fuego. Realizamos el montaje que se muestra en la Figura 1, donde inicialmente se dispone una pequeña cantidad de estropajo de acero en un lado de la balanza y una cantidad de plastilina de masa similar (se mantiene el equilibrio) en el lado opuesto. Al quemar la lana de acero se desequilibra la balanza, debido a que se forma óxido de hierro (III), de mayor peso. En este punto, los alumnos observan la facilidad que presenta la lana de acero para quemarse, por fuego, chispa o incluso con una pila, como se aprecia en otra experiencia. De hecho, puede hacerlo incluso mojada y por eso se ha empleado a veces como yesca en situaciones de emergencia.



**Figura 1.** Tras colocar en una balanza un trozo de plastilina y otro de estropajo de acero en equilibrio (izquierda), se quema el acero (derecha) y se desequilibra la balanza por el aumento de peso al formarse óxido de hierro.

### Experiencia 2: Observación del campo magnético en 3D

Las limaduras de hierro se alinean con la presencia de fuertes campos magnéticos y así se puede visualizar la forma de estos campos. Algo similar ocurre con los campos eléctricos creados por alto voltaje y por la electricidad estática. Si se exponen pequeñas fibras de acero a un campo eléctrico o magnético muy fuerte, se alinearán con el campo y lo harán visible.

Se necesita un imán, lana de acero para uso doméstico, una botella de plástico llena de aceite para bebés y tijeras.

Mientras las fibras de acero están aún flotando en el aceite, se coloca un imán a un costado de la botella y se observan las virutas, que se alinearán con el campo magnético del imán y nos mostrarán una figura tridimensional (3D), como se observa en la Figura 2.



**Figura 2.** Observación de campos magnéticos.

### Experiencia 3: Formación de fuegos artificiales

Para realizar el experimento necesitamos una vela y limaduras de hierro o lana de acero. Si encendemos la vela y dejamos caer limaduras de hierro directamente sobre la llama se observan unas chispas que salen de la llama en todas las direcciones. Se debe a que el hierro en forma de limaduras presenta una superficie de contacto con el aire muy grande y puede arder si suministramos el calor suficiente. La llama de la vela, por ejemplo, proporciona la energía inicial que desencadenará la reacción de combustión entre el hierro y el oxígeno del aire, como se muestra en la Figura 3.



**Figura 3.** Formación de “fuegos artificiales” con lana de acero.

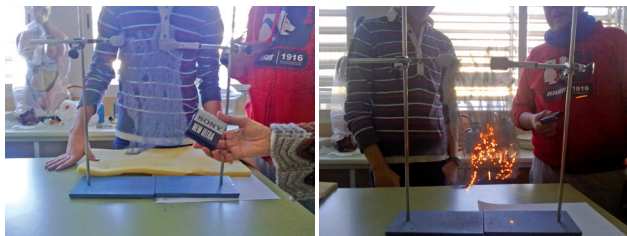
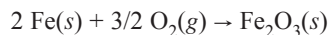
En la fabricación de fuegos artificiales se emplean ciertos metales (en forma de óxidos y otras sales) que, al quemarse, producen chispas muy brillantes de diferentes colores.<sup>16</sup> Al dejar caer limaduras de hierro sobre la llama de la vela el metal alcanza temperaturas muy altas (del orden de los 1500 °C), reacciona con el oxígeno del aire y produce la emisión de chispas.

### Experiencia 4: Corriente eléctrica y efecto Joule

Para realizar este experimento necesitamos una pila de petaca (de 4,5 V o 9 V) y lana de acero.

Si tocamos un trozo de lana de acero con uno de los bornes de la pila vemos que no pasa nada. Pero si lo tocamos con los dos bornes se observa que la lana de acero comienza a arder lentamente. Se debe a que, como material metálico, presenta alta conductividad eléctrica. Al tocar la lana de acero

con los dos bornes de la pila se genera una corriente eléctrica. Debido al efecto Joule, al circular la corriente eléctrica aumenta la temperatura del conductor (lana de acero) y el calor que se genera es suficiente para iniciar su combustión en presencia del oxígeno del aire (ver Figura 4). La reacción química entre la lana de acero y el oxígeno del aire produce óxido de hierro (III), como se aprecia por el cambio de color de gris a negro, según la ecuación:

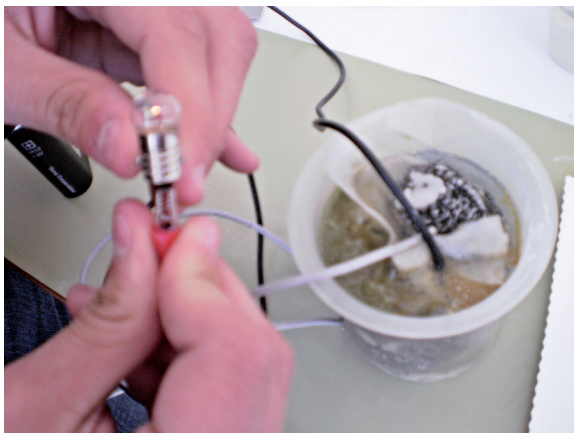


**Figura 4.** Colocación de la lana de acero (izquierda) para observar el efecto Joule que se genera con una pila y que provoca la combustión del metal (derecha).

#### Experiencia 5: Electrólisis y pila de combustible

Se construye una pila de combustible basada en la combustión del hidrógeno.<sup>17</sup> Para lograr la obtención de este elemento, de manera sencilla y económica, realizamos una electrólisis del agua.

Se produce la electrólisis con dos estropajos de acero, a los que van conectados los bornes de la pila, separados por láminas de papel de filtro; para acelerar el proceso, se añade una cucharada de sulfato de sodio (que aumenta la conductividad eléctrica) sobre el agua en el que se introducen los estropajos. Se deja todo el dispositivo aproximadamente un cuarto de hora, para que el oxígeno y el hidrógeno sean absorbidos por los estropajos. Luego se quita la pila y se introduce, en la misma posición, una bombilla o un dispositivo eléctrico (pequeño motor, LED...) y se observa que se genera una energía, gracias al funcionamiento de la pila de combustible, que permite encender la bombilla, accionar el motor, etc.

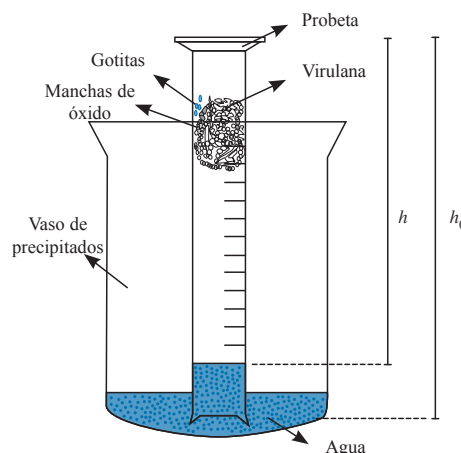


**Figura 5.** Fotografías de la pila de combustible encendiendo una bombilla según lo descrito en la experiencia 5.

#### Experiencia 6: Contenido de oxígeno en el aire

Para realizar el experimento necesitamos un vaso (o probeta), un plato, lana de acero y agua. En primer lugar, introduciremos un trozo de lana de acero en el vaso. Luego llenamos con agua el plato y colocamos el vaso con la lana de acero boca abajo sobre el plato con agua.

Si esperamos unas horas vemos que la lana de acero cambia de color (de gris a rojizo) y que el nivel de agua en el interior del vaso sube unos centímetros. Se debe a que la lana de acero en contacto con el agua y con el oxígeno del aire se oxida. Esta reacción química consume el oxígeno del aire atrapado en el interior del vaso, con lo que disminuye la presión interna. La presión atmosférica externa, superior, hace que entre agua en el vaso. Si medimos con una regla (o directamente en una probeta si se opta por este recipiente en vez de utilizar un vaso) podemos ver que al subir el nivel del agua el volumen de aire atrapado en el interior del vaso disminuye, aproximadamente, en un 20 %, como se observa en la Figura 6. Este es el porcentaje aproximado de oxígeno en el aire.



**Figura 6.** Esquema del procedimiento descrito en la experiencia 6 (arriba) y fotografía del procedimiento seguido.

### Experiencia 7: Variación de la tensión superficial

En un vaso o copa llena de agua volcamos virutas de hierro; la tensión superficial del agua crea fuerzas de suficiente intensidad en la superficie que impiden que las virutas se hundan. Si añadimos unas gotas de jabón líquido o detergente disminuye la tensión superficial y se hunden las virutas.

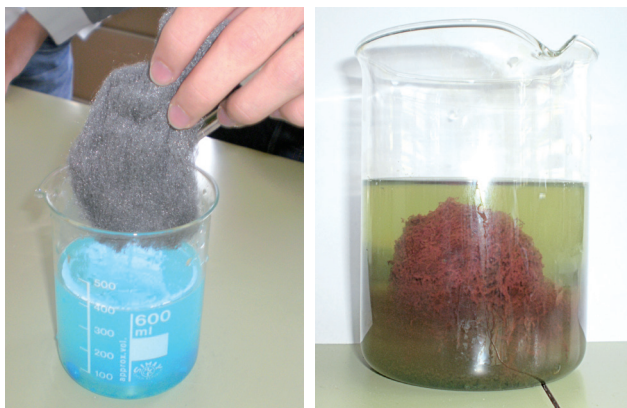
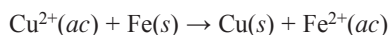
La tensión superficial se debe a las fuerzas intermoleculares y produce que la superficie del agua se comporte como si fuera una delgada película elástica (membrana). Esto permite que las virutas de acero puedan flotar en el agua (ver Figura 7). Al descender la tensión superficial por el jabón, las virutas de acero, más densas que el agua, se hunden.



**Figura 7.** En la copa izquierda se observan las virutas de estropajo de acero en la superficie del agua. En la de la derecha, una vez añadido el detergente, las virutas de acero caen al fondo.

### Experiencia 8: Reducción de sulfato de cobre (II)

Se sumerge el estropajo en sulfato de cobre (II) y se observa lo que ocurre (la disolución cambia de color, de azul intenso a verde y el estropajo se recubre de una sustancia rojiza) (ver Figura 8). Se debe a la producción de la reacción redox siguiente.

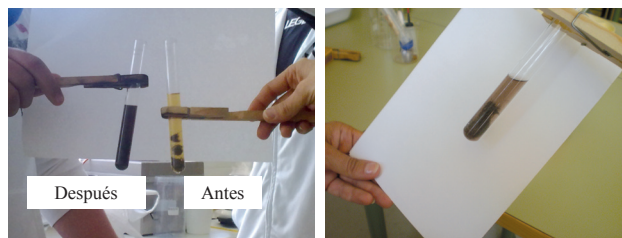


**Figura 8.** En la fotografía de la izquierda se introduce el estropajo de acero en una disolución de sulfato de cobre (II), produciéndose cambios en el color del sólido, como se observa en la fotografía de la derecha.

### Experiencia 9: Fabricación de tinta

Para esta experiencia se necesita una bolsita de té negro, aparte de estropajo de acero.

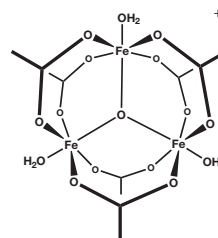
En un vaso de precipitado se ponen unos mililitros de té poco concentrado, y se diluye hasta que el color se vuelva amarillo pálido. Una parte servirá de control y otra se calienta hasta ebullición con el estropajo. Durante el calentamiento se observa que el té se va oscureciendo hasta llegar a tener una coloración negra, parecida a la tinta, como se observa en la Figura 9. Se debe a que entre los componentes del té se encuentra el ácido gálico, que forma con los iones de hierro un complejo de color intenso, como se detalla en el experimento 105 del texto de Schwedt.<sup>11</sup>



**Figura 9.** Fotografías que nos muestra el cambio de color al calentar té negro con estropajo de acero.

### Experiencia 10: Preparación de la “disolución o solución férrica”

Se mezcla ácido acético con virutas de estropajo de acero, formándose una disolución de acetato de hierro (II), que se calienta, se filtra y se deja reposar dos o tres días. La sal de hierro (II) se va oxidando lentamente, pasando de amarillo a rojo-negro formándose acetato de hierro (III), que diluiremos en agua hasta obtener una coloración naranja. Esta disolución, llamada en el libro de Schwedt<sup>11</sup> “solución férrica”, contiene iones de hierro (III) además de iones hierro (II), y la utilizaremos para otras reacciones (Figura 10).

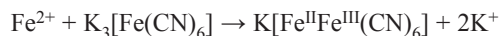


**Figura 10.** En la fotografía se muestra el aspecto de la “disolución férrica” concentrada (arriba) y diluida (abajo). El dibujo muestra la estructura molecular del acetato férrico.

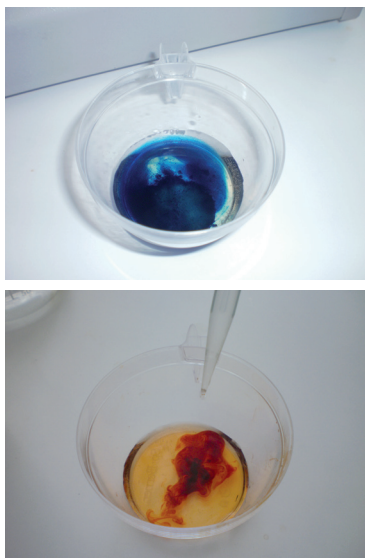
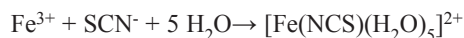


### Experiencia 11: Detección del hierro por formación de complejos con hexacianoferrato (III) y con tiocianato amónico

Utilizaremos la solución férrica diluida de la experiencia 10 (de color naranja). En un tubo de ensayo, se añaden unas cuantas gotas de disolución de hexacianoferrato (III) de potasio a una pequeña porción de la solución férrica. Se produce así una reacción mediante la que se detecta el ión  $\text{Fe}^{2+}$  de la solución férrica. La reacción de identificación del ión  $\text{Fe}^{2+}$  es la formación del complejo hexacianoferrato (II) de hierro (III), conocido como *azul de Prusia* (Figura 11 arriba).



Otra reacción que se realiza es la siguiente: se toma otra muestra de la solución férrica diluida en agua (de color naranja) y se introduce en otro tubo de ensayo; se añaden unas gotas de la disolución de tiocianato de amonio, con lo que se detecta la presencia del catión  $\text{Fe}^{3+}$ , al formarse el complejo pentaacuotiocianato-N-hierro (III), de color rojo sangre (Figura 11 abajo).



**Figura 11.** Fotografía de dos vasos que representan la formación de azul de Prusia (arriba) y rojo sangre del pentaacuotiocianato-N-hierro(III) (abajo).

### Experiencia 12: Oxidación del ácido ascórbico

Se disuelve vitamina C en agua y se añade, gota a gota, la disolución férrica (color naranja) formada en la experiencia 10. Se anota el cambio de color donde cae la gota (se pasa de color verde a negro), como observamos en la Figura 12.

En el sitio donde cae la gota el color cambia del verde al negro, lo que se explica por la reducción de los iones hierro (III) a iones de hierro (II). Si hacemos ahora la prueba de la detección de hierro (III) con tiocianato de amonio de la experiencia 11 nos da negativa, no sale el rojo sangre.

Según el libro de Schwedt,<sup>11</sup> la oxidación del ácido ascórbico tiene lugar en presencia de trazas de metal a través de un

proceso en dos etapas pasando a ácido dehidroascórbico. La acción reductora se debe a la estructura del endiol.



**Figura 12.** Fotografía donde se observa el oscurecimiento de la disolución de vitamina C al caer las gotas de la solución férrica.

### Experiencia 13: Formación del complejo salicilato

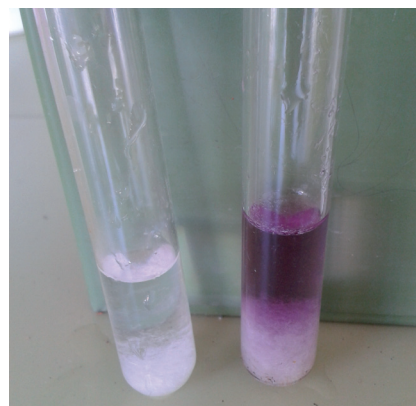
Necesitamos dos aspirinas, vaso de precipitado, ácido clorhídrico concentrado y solución férrica diluida de la experiencia 10.

En un vaso de precipitado se echan una o dos pastillas de aspirina, se añaden unos 75 mL de agua y unas gotas de ácido clorhídrico concentrado, y se hierve hasta que quede una disolución transparente. Se deja enfriar hasta el día siguiente y habrán aparecido los cristales.

La aspirina es el ácido acetilsalicílico, que se hidroliza con agua, en presencia de iones  $\text{H}^+$  que actúa como catalizador, produciendo ácido acético y ácido salicílico. Este último es un sólido que cristaliza, mientras que el ácido acético es líquido y queda en disolución.

El ácido salicílico, se pueden reconocer porque con la disolución de hierro (III) da una coloración morada, porque se forma el complejo de salicilato. Si la concentración es alta puede incluso aparecer como negra de lo oscura que es y es necesario diluir para apreciar el color morado.

Esta reacción es la que se utiliza en toxicología para investigar intoxicaciones con ácido salicílico o con sus derivados.



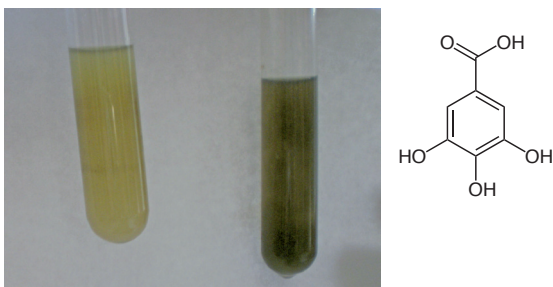
**Figura 13.** Fotografía de dos tubos de ensayo: en la izquierda la disolución hidrolizada de la aspirina y en el tubo de la derecha cuando se le echa la disolución de hierro (III).

### Experiencia 14: Componentes fenólicos en el aceite de tomillo

Se mezcla el tomillo en etanol y se filtra y a esa disolución se le añade gota a gota la disolución de hierro (III) (proceso que se observa en la Figura 14).

Se produce un complejo entre los componentes fenólicos vegetales (que contiene el tomillo) y los iones de hierro (III), que hace que se intensifique el color.

El tomillo contiene la molécula timol (ver Figura 14) con funcionalidad fenólica, que es el grupo hidróxido unido a un anillo aromático, que forma un complejo fuertemente coloreado con el hierro (III).

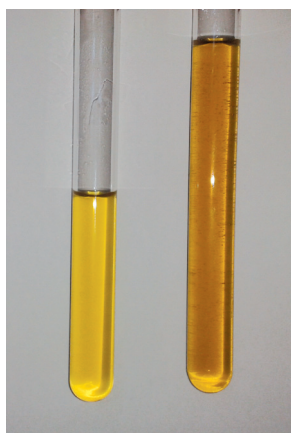


**Figura 14.** Molécula de timol que contiene el tomillo y en la foto, aspecto de las disoluciones descritas en la experiencia 14: en el tubo de la izquierda, disolución de tomillo con etanol y en el tubo de la derecha, la misma disolución después de añadir la disolución de hierro (III).

### Experiencia 15: Los fenoles vegetales del comino como formadores de complejos de hierro

Se hace una disolución en caliente de comino en agua y luego se filtra. La disolución es de color amarillo. Cuando se le añade la disolución férrica se produce un complejo entre los componentes fenólicos vegetales (que contiene el comino) y los iones de hierro (III) de tal manera que se oscurece la disolución.

El comino contiene como componentes diversos terpenos, entre los que se pueden citar el limoneno y el cuminaldehído, que forman complejos fuertemente coloreado con el ión hierro (III).



**Figura 15.** En el tubo de la izquierda de muestra la disolución de comino y, en el de la derecha, la disolución de comino con solución férrica observando un color más intenso.

### Experiencia 16: Componentes fenólicos del café como formadores de complejos de hierro

En frío se prepara una disolución con una pequeña cantidad de café soluble en agua, que esté poco coloreada. Se filtra y se añade, a continuación, unas gotas de la disolución férrica y se observa el color en el sitio donde caen las gotas.

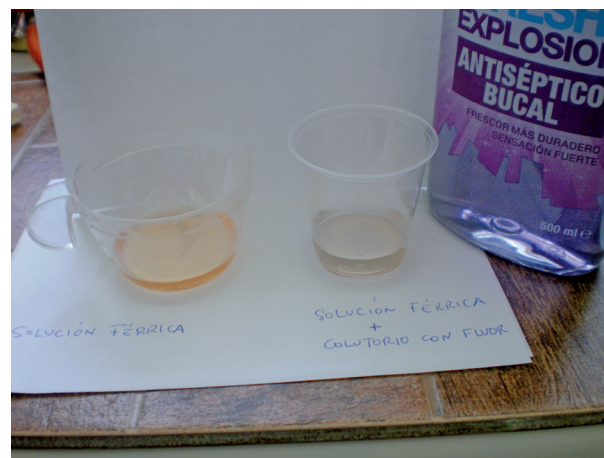
El extracto de café toma primero un color verde que luego vira a marrón, porque, según Schwedt,<sup>11</sup> en el extracto de café los iones hierro (III) se reducen primero a hierro (II), y forman después un complejo de hierro con los componentes fenólicos del café. Es una muestra del poder reductor de los extractos de café (Figura 16).



**Figura 16.** Tubo de ensayo con un poco de café de sobre con agua (derecha) y la misma disolución de café con disolución férrica (izquierda). Se observa una intensificación del color.

### Experiencia 17: Complejo de hierro (III) con fluoruro

A la disolución férrica se le añade gota a gota un colutorio que contiene flúor, observándose que desaparece lentamente el color porque se forma el complejo hexafluoroferrato (III),  $[\text{FeF}_6]^{3-}$ , que es incoloro (Figura 17).



**Figura 17.** Disolución férrica (izquierda) y disolución férrica con colutorio que contiene flúor (derecha).

### Experiencia 18: Precipitación del fosfato de hierro (III) con las bebidas de cola

Se calienta hasta ebullición una bebida de cola y una vez fría se añade, gota a gota, la disolución férrica.

Las bebidas de cola contienen como agentes acidificantes el ácido fosfórico que, al mezclarlo con la solución férrica, forma fosfato de hierro (III) difícilmente soluble, por lo que se decolora la disolución y aparece una turbidez que va precipitando lentamente.

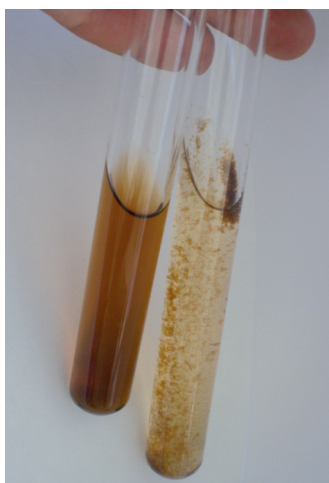


Figura 18. Bebida de cola calentada (izquierda) y la misma bebida de cola con disolución férrica (derecha). Se observa cómo la disolución se decolora y precipita muy lentamente el fosfato de hierro (III).

### Participación en certámenes científicos

Este proyecto, con el título de “Ciencia con estropajo”, participó en la actividad de “Ciencia en el Aula” del Parque de la Ciencias de Granada (Figura 19). Además, obtuvo dos reconocimientos: primer premio del concurso de “Experimentos de Ciencia”, Categoría B (E.S.O.), convocado por el Centro de Ciencia Principia de Málaga (2012), y mención de honor en la modalidad de “Demostraciones de Química” en el Certamen de Ciencia en Acción (Alcobendas, Madrid, 2012). En ambos casos, los alumnos se implicaron de diferente manera, presentando incluso los trabajos ante jurados que calificaban las acciones realizadas. Estas circunstancias suponen un aliciente y una labor de aprendizaje adicional por parte de los alumnos. Por ejemplo, en la Figura 20 se muestra el póster que prepararon para la presentación en el segundo certamen citado y, en la Figura 21, se muestra el aspecto del stand que prepararon.

### Conclusiones

El estropajo de acero es un producto económico, que se encuentra fácilmente y es bien conocido por alumnos de educación secundaria. Como hemos explicado, permite demostrar fenómenos físicos y químicos cualitativamente (de forma acorde a los objetivos de la educación secundaria). Además, dicha actividad sirve para que puedan integrar



Figura 19. Participación en “Ciencia en el Aula” en el Parque de la Ciencias de Granada (2012).



Figura 20. Cartel preparado por los alumnos para participar en un certamen científico con las experiencias descritas.



Figura 21. Aspecto del stand donde se presentó el trabajo en el certamen de Ciencia en Acción (2012).

lo aprendido y valorar más la utilidad del aprendizaje, al comprobar sus posibilidades de aplicación a casos reales. Sirve también para que los alumnos desarrollen ciertas competencias, como trabajo experimental, creatividad y comunicación. Por ello se recomienda su realización y se sugiere que, con distinta profundidad, podría aplicarse también en otros niveles educativos.

### Agradecimientos

Se agradecen las facilidades prestadas por el IES Manuel Romero de Villanueva de la Concepción (Málaga) para desarrollar el trabajo educativo aquí presentado, así como el interés de los alumnos que participaron en él; destacando la labor desarrollada por las alumnas Estefanía García, Lucía Hoyos y Flores Aldana. Se agradece también al Centro de Ciencia Principia de Málaga y al programa de Ciencia en Acción, que desarrollan una importante labor de divulgación científica, por la motivadora acogida que prestaron a la actividad.

### Bibliografía

1. J. A. Martínez Pons, *Anales Quím.* **2009**, *105*, 221–226.
2. A. Sánchez Soberón, A. I. Bárcena Martín, *Anales Quím.* **2007**, *103*, 46–49.
3. A. Caamaño, *Alambique: Didáct. Cienc. Experim.* **2005**, *46*, 5–8.
4. V. Escandell, X. Salat, A. Vilaseca, *Alambique: Didáct. Cienc. Experim.* **2005**, *46*, 47–59.
5. M. F. Paixao, *Alambique: Didáct. Cienc. Experim.* **2005**, *46*, 60–67.
6. M. L. Prolongo, G. Pinto, *Educ. Quím.* **2010**, *7*, 4–14.
7. G. Pinto, *J. Chem. Educ.* **2009**, *86*, 185–187.
8. G. Pinto, *J. Chem. Educ.* **2005**, *82*, 1321–1324.
9. P. Castells Esqué, *Educ. Quím.* **2010**, *7*, 37–45.
10. G. Pinto, M. L. Prolongo, *Internat. J. Engin. Pedag.* **2013**, *3*, 24–28.
11. G. Schwedt, *Experimentos con productos de supermercado: merceología química*, Acibia, Zaragoza, **2009**.
12. El rincón de los experimentos (I.E.S. Victoria Kent de Torrejón de Ardoz, Madrid). <http://bit.ly/UpGsE>, visitada el 28/02/2013.
13. Fq experimentos; experimentos caseros de física y química. <http://bit.ly/TbhlDm>, visitada el 28/02/2013.
14. R. J. Gillespie, D. A. Humphreys, N. C. Baird, E. A. Robinson, *Química*, Reverté, Barcelona, 1990.
15. M. T. Martín Sánchez, M. Martín Sánchez, *Ideas para realizar trabajos de tipo experimental. Química. Guía del profesor*, Salamanca, 1995.
16. F. I. de Prada Pérez de Azpeitia, *Anales Quím.* **2006**, *102*, 54–59.
17. M. Segura, J. Valls, J. Martí, *La batería de hidrógeno y la pila de combustible*. <http://bit.ly/1420eFT>, visitada el 28/02/2013.



## 5th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces

Donostia - San Sebastián, 26-28 June 2013

### Jointly promoted by ...

Grupo Especializado de Coloides e Interfases (GECI) of the Reales Sociedades Españolas de Química y de Física (RSEQ and RSEF) and Grupo de Colóides, Polímeros e Interfaces (GCPI) of Sociedade Portuguesa de Química (SPQ).



# Química y energía: una unión indisoluble

Valentín González

**Resumen:** Las reacciones químicas se producen siempre con intercambio de energía. Igualmente, en la producción de energía se necesita la química, de forma directa o indirecta, para liberarla. En este artículo se pasa revista a los procesos utilizados para producir energía y se pone de manifiesto la aportación de la química a su desarrollo. Se analiza el papel de las energías renovables en la producción y coste de la energía y se concluye el papel fundamental de la química en la producción de energía sostenible y a bajo coste de producción.

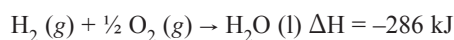
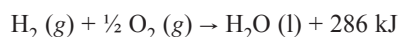
**Palabras clave:** Química y energía, energía térmica, energía de fisión, energía de fusión, energías renovables.

**Abstract:** Chemical reactions always proceed liberating or absorbing energy. Likewise, in energy production, chemistry is necessary to liberate it, in a direct or indirect way. In this paper, used processes for energy production are reviewed and the role of chemistry is pointed out. The role of renewable energies is also pointed out, taking into account its costs, finalizing with the important role of the chemical research to reach a procedure to generate sustainable energy to lower production costs.

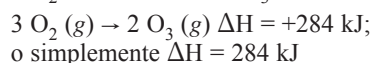
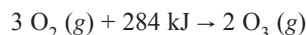
**Keywords:** chemistry and energy, thermal energy, fission energy, fusion energy, renewable energies.

Todas las reacciones químicas están afectadas por un término energético y, para obtener energía, de forma directa o indirecta, es imprescindible la química.

Así, en la reacción de obtención del agua se desprende energía. Se trata de una reacción exotérmica. Este hecho se expresa de cualquiera de las dos formas siguientes:



En cambio, la reacción de obtención del ozono a partir del oxígeno, precisa el aporte de energía para progresar:



El intercambio energético que acompaña a un proceso se expresa en forma de *variación de entalpía*,  $\Delta H$ . Por convenio, a las reacciones exotérmicas se les asigna una variación de entalpía negativa:  $\Delta H < 0$ . Y a las reacciones endotérmicas, se les asigna una variación de entalpía positiva:  $\Delta H > 0$

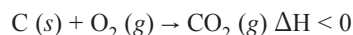
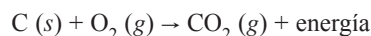


V. González

Área Departamental de Ingeniería Química  
Facultades de Ciencias  
Universidad Autónoma de Madrid  
C-e: [valentin.gonzalez@uam.es](mailto:valentin.gonzalez@uam.es)

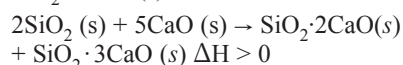
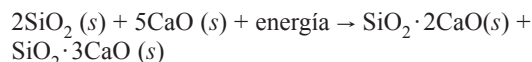
Recibido: 06/06/2013. Aceptado: 09/01/2013.

Las reacciones químicas más utilizadas para la obtención de energía son las de combustión de combustibles fósiles, como carbón, petróleo, gas, madera, etc., que son, sencillamente, procesos de oxidación de la materia que contiene carbono; que se pueden expresar de alguna de estas dos formas:



En algunos procesos de obtención de energía (hidroeléctrica) parece que no interviene la química, sin embargo la química es imprescindible en la obra civil necesaria.

Así, cuando tenemos que levantar un dique de hormigón que cierre la presa, es necesario producir miles de toneladas de cemento y, el cemento, es una sustancia (mezcla de silicatos dicálcico y tricálcico) que se produce por reacción entre la sílice,  $\text{SiO}_2$ , y la cal,  $\text{CaO}$ , según:



Hay que aclarar que la mezcla de silicatos dicálcico y tricálcico (componentes esenciales del cemento) no se obtienen a partir de los compuestos puros, sílice y cal, pues para ello se precisarían temperaturas superiores a los 2.000 °C. Para rebajar la temperatura de reacción hasta unos 1400 °C (lo que disminuye muy ostensiblemente los costes de fabricación), es por lo que se utiliza arcilla y caliza.

Particularmente para las presas se ha de producir un cemento de fraguado lento, con silicato dicálcico como componente mayoritario, pues el silicato tricálcico es de fraguado rápido y, el calor desprendido rápidamente produce el resquebrajamiento del dique durante la construcción, pues no es fácil evacuar el calor generado. El fraguado del cemento es un proceso en el que las partículas de cemento se hidratan, según una reacción exotérmica, transformándose en otras partículas mucho menores, tan pequeñas que se atraen por fuerzas

moleculares tipo Van der Waals, alcanzando unas resistencias mecánicas a la compresión de hasta 500 Kg/cm<sup>2</sup>. El compuesto que se forma por hidratación del cemento es un silicato complejo denominado gel de tobermorita, por ser de estructura parecida a unas rocas que se encuentran en Tobermory, Inglaterra y tiene la particularidad que se transforma en una masa plástica que se adhiere a la arena, rocas, ferralla, etc., formando el mortero, el hormigón y el hormigón armado.

## Producción de energía

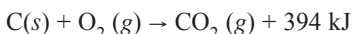
Actualmente utilizamos numerosos procesos convencionales que generan calor y, además, contamos con las llamadas energías renovables que no utilizan directamente reacciones químicas para obtener energía: como es el caso de la energía eólica, solar, de las mareas, etc.

Veamos los principales procesos para producir energía:

1. Combustión de compuestos carbonosos: carbón, petróleo, gas, madera, biomasa, etc.
2. Fisión nuclear del uranio de masa atómica 235 (<sup>235</sup>U), que constituye el 0,7% del uranio contenido en los minerales. El resto, el 99,3%, es uranio de masa atómica 238 (<sup>238</sup>U), no físil. El <sup>238</sup>U, aunque no es físil, puede producir plutonio de masa atómica 239, que sí lo es. Este hecho se utiliza en los reactores reproductores, de cuarta generación, que son reactores con un espectro de neutrones rápidos, en los que se coloca un recubrimiento de <sup>238</sup>U alrededor del núcleo para que se produzca plutonio con los neutrones sobrantes de la fisión.
3. Las energías renovables están basadas en fuentes de energía inagotable para periodos de tiempo de magnitud humana, como por ejemplo el sol. Las más significativas son: la solar térmica y fotovoltaica, la eólica, la hidráulica (extendida en el mundo desde hace bastantes años), la biomasa (también utilizada tradicionalmente) y, como menos significativas a nivel global: la geotérmica, mareomotriz y de las olas.

## La combustión de los compuestos carbonosos

Se basa en la oxidación del carbono que se transforma en dióxido de carbono con desprendimiento de energía:



Esta reacción es válida para cualquier compuesto que contenga carbono, como carbón, petróleo, gas, madera, biomasa, etc., aunque en el caso de los hidrocarburos contenidos en el petróleo y el gas natural, o los componentes orgánicos diversos que contienen la madera y la biomasa, no solo se oxida el carbono, sino también el hidrógeno, azufre, etc., que entran en su composición.

La energía térmica obtenida en un proceso de combustión, puede destinarse a calentar agua hasta convertirla en vapor, que se alimenta en una turbina, acoplada a un generador, para producir energía eléctrica. En otras ocasiones el agua caliente se utiliza directamente en un intercambiador de calor

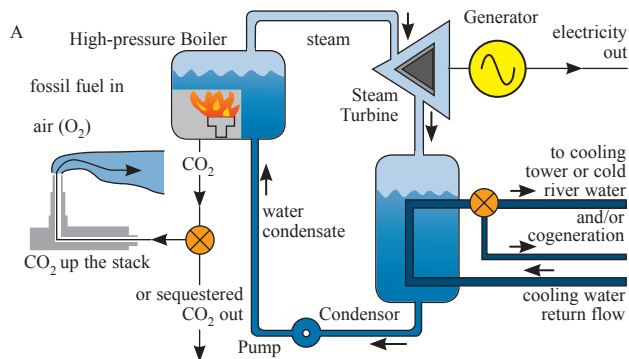


Figura 1. Esquema de la producción de energía por vía térmica.

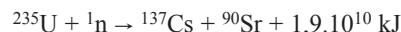
para calentar otras sustancias. En la Figura 1 se presenta un esquema de la producción térmica de energía eléctrica. El rendimiento de la transformación de la energía térmica en energía eléctrica oscila entre un 33% y un 38%<sup>1,2</sup>.

Una vez que comienza a condensar el agua, ha de descargarse el vapor de la turbina, condensarlo y retornarlo a la caldera, con lo que se cierra el ciclo.

Hoy en día se tiende a aumentar en lo posible el rendimiento de transformación de la energía térmica en eléctrica; para ello se utilizan las centrales de ciclo combinado en las que, de acuerdo con el ciclo de Carnot, el rendimiento se eleva aumentando la temperatura del foco caliente, en este caso la combustión; así, se quema el combustible y el gas de combustión se alimenta a una turbina de gas, unida a un alternador, produciendo energía eléctrica; como la temperatura del gas es todavía alta, cuando sale de la turbina, se utiliza para producir vapor de agua que, a su vez se alimenta a una turbina de vapor, unida a un alternador. El rendimiento global se eleva a un 50-58%<sup>2</sup>. Pero, para poder utilizar el ciclo combinado, el combustible ha de ser limpio, para evitar la existencia de partículas que erosionen los alabes de la turbina de gas, por lo que estas centrales solo pueden operar con gas natural u otro tipo de gas combustible limpio.

## Fisión de elementos físbiles

La fisión termonuclear es un proceso térmico de producción de energía basado en la fisión, rotura, de los átomos de uranio 235, o de torio 232, vía producción de uranio 233 por captura neutrónica y dos desintegraciones beta posteriores, según:



El cesio y el estroncio son los productos de fisión sólidos mayoritarios que aparecen en la fisión, rotura, de los átomos de uranio; realmente los radisótopos que aparecen en los elementos combustibles al descargarlos del reactor son unos 2200.

La cantidad de energía desprendida por mol de uranio fisionado es 50 millones de veces mayor que la que se desprende al quemar un mol de carbono. Por esto la cantidad de residuos que se generan son también 50 millones de veces menos que en la combustión del carbono.

La aportación de la química a la fisión nuclear es muy amplia. Comienza con la extracción y concentración del uranio del mineral, que suele hacerse mediante una lixiviación ácida

del mismo, con ácido sulfúrico diluido, recuperándose una disolución diluida de sulfato de uranilo ( $\text{UO}_2\text{SO}_4$ ); el siguiente paso es la concentración de la disolución, que puede realizarse por intercambio iónico o extracción líquido-líquido, operaciones típicas de la ingeniería química y, a continuación, precipitar el uranio con sosa o amoníaco, obteniéndose diuranato de sodio ( $\text{Na}_2\text{U}_2\text{O}_7$ ), o diuranato de amonio [ $(\text{NH}_4)_2\text{U}_2\text{O}_7$ ], respectivamente. Estos diuranatos son productos comerciales, denominados *yellow cake* (torta amarilla) por su color amarillo; contienen un 60-70% de uranio, expresado como  $\text{U}_3\text{O}_8$ . Esta sustancia debe purificarse para transformarlo en un producto de pureza nuclear. Así se evita la absorción de neutrones por esas impurezas que podrían impedir la fisión, o la reacción en cadena, por no dejar suficientes neutrones libres.

La disolución del *yellow cake* con ácido nítrico, seguida de una extracción-reextracción, con un agente extractor específico del uranio, fostato de tributilo al 30% en queroseno, permite obtener nitrato de uranilo de la pureza requerida.

A continuación se somete la disolución de nitrato de uranio puro a operaciones de evaporación para concentrarlo; calcinación en atmósfera de aire para transformarlo en trióxido de uranio ( $\text{UO}_3$ ); reducción con hidrógeno a dióxido de uranio ( $\text{UO}_2$ ), y conversión posterior en tetrafluoruro de uranio ( $\text{UF}_4$ ) por reacción con fluoruro de hidrógeno y, finalmente, convertirlo en hexafluoruro de uranio ( $\text{UF}_6$ ) por reacción con flúor elemental. El  $\text{UF}_6$  sublima por encima de  $65^\circ\text{C}$  a presión atmosférica.

El hexafluoruro de uranio en fase vapor debe ser enriquecido en  $^{235}\text{UF}_6$ , pues el  $^{235}\text{U}$  es el isótopo fisil. Este proceso se lleva a cabo por difusión del compuesto a través de membranas con un tamaño de poro adecuado, que separan el  $^{235}\text{UF}_6$  del  $^{238}\text{UF}_6$  (la velocidad de difusión de un gas es inversamente proporcional a su masa molecular: ley de Graham). Se requiere un gran número de pasos para llegar a concentraciones de  $^{235}\text{UF}_6$  del orden del 5% en el  $\text{UF}_6$  total, que es el valor requerido para preparar los combustibles nucleares de los reactores comerciales.

El compuesto enriquecido se hace reaccionar con vapor de agua e hidrógeno, a unos  $600^\circ\text{C}$ , para conseguir la hidrólisis-reducción del  $\text{UF}_6$  a  $\text{UO}_2$ . El dióxido de uranio se transforma en pastillas y sinteriza (proceso realizado a alta temperatura que transforma al producto en un material casi inerte) para transformarlo en un producto cerámico. En las Figuras 2 y 3 se presentan las pastillas de  $\text{UO}_2$  sinterizadas y un elemento combustible comercial. De esta manera, queda de manifiesto la importancia de la química para llegar a fabricar el elemento combustible.

El núcleo de un reactor de 1.000 MW ha de contener 120 de estos elementos combustibles con un peso total de 60 toneladas que, una vez cargados producen la fisión nuclear y la consiguiente producción de energía, térmica. Esta energía térmica, se utiliza para producir vapor que se alimenta a una turbina. En la Figura 4 se presenta un esquema de un reactor nuclear de agua a presión.

Durante la operación es necesario mantener el agua del circuito primario, que es la que refrigera el núcleo, con un nivel muy bajo de contaminación, para evitar la irradiación de los operarios; para ello se utilizan filtros y resinas intercambiadoras de iones para mantener la limpieza del agua. La contaminación puede provenir de pequeñas fugas de los elementos combustibles a través de poros que pudieran formarse, particularmente en las soldaduras aunque, la probabilidad de éstas es muy baja; de hecho, actualmente, se producen pequeñas fugas en uno de cada doscientos mil elementos combustibles, gracias a los estrictos



Figura 2. Pastillas sinterizadas de dióxido de uranio enriquecido (cortesía de ENRESA).

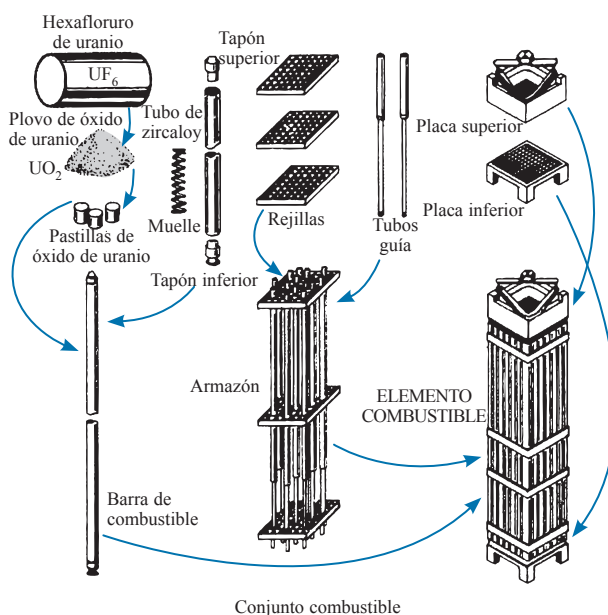


Figura 3. Conjunto combustible de dióxido de uranio: proceso de fabricación (cortesía de ENRESA).

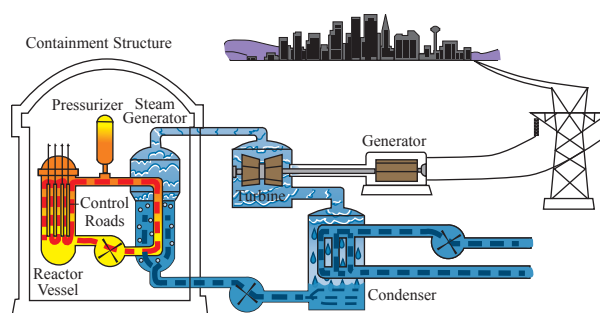


Figura 4. Esquema de un reactor nuclear de agua a presión (fuente: blog <http://www.madrimasd.org/blogs/energiafusion/>).

controles de calidad que se aplican en su fabricación. Los filtros y resinas son residuos radiactivos ya que retienen los radisótopos contenidos en el agua, ya sea en forma de pequeñas partículas o por reacción química en las resinas de intercambio iónico.

Por otra parte, las labores de mantenimiento, sustitución o reparación de piezas, precisan aplicar la química para descontaminarlas antes de proceder a su reparación o sustitución; si no se puede descontaminar, la pieza se trata como residuo radiactivo.

Los residuos líquidos se concentran por evaporación o se incineran, en el caso de los incinerables y, finalmente, se incorporan en una matriz de mortero de cemento u hormigón para evitar su dispersión y almacenarlos hasta que decaiga su radiactividad, en unos 200-300 años. Estos son los residuos de baja y media radiactividad.

Cuando los combustibles usados se descargan del reactor, han de almacenarse en una piscina para refrigerarlos pues su potencia térmica es de unos 10 kW debido a la desintegración radiactiva de los radisótopos que contienen. Al cabo de 3 años, la potencia ha bajado a 1 kW, gracias al decaimiento radiactivo. En la piscina se refrigeran y se ha de descontaminar el agua, igual a como se hacía en el circuito primario del reactor, en prevención de fugas potenciales.

Una vez pasado unos tres años, los combustibles pueden almacenarse temporalmente o reprocesarlos para extraer el uranio sobrante y el plutonio que todavía contienen para aprovechar su energía. Este proceso es típicamente químico pues, primero se disuelven las pastillas de combustible con ácido nítrico concentrado y, posteriormente, a través de extracciones líquido-líquido se separan el uranio y el plutonio del resto de los residuos. Estos últimos son productos de fisión y activación que constituyen un 4% del total.

Estos residuos son de alta radiactividad que precisan un tiempo de 500-1000 años para que decaiga su radiactividad  $\beta$  y  $\gamma$  por desintegración radiactiva. Para evitar su dispersión e irrupción en la biosfera, se incorporan a una matriz de vidrio especial, denominado al borosilicato por ser los óxidos de boro y de silicio los formadores de la red; este vidrio, que es el que se utiliza en los laboratorios químicos, es 100 veces más insoluble que el vidrio sodocálcico que se utiliza en las ventanas de los edificios. Posteriormente, se ha de almacenar hasta que decaiga su radiactividad.

Como se ha mostrado en este resumen, las operaciones y procesos químicos que se emplean en el denominado ciclo del combustible nuclear son numerosos y variados. En la Figura 5 se presenta ese ciclo del combustible.

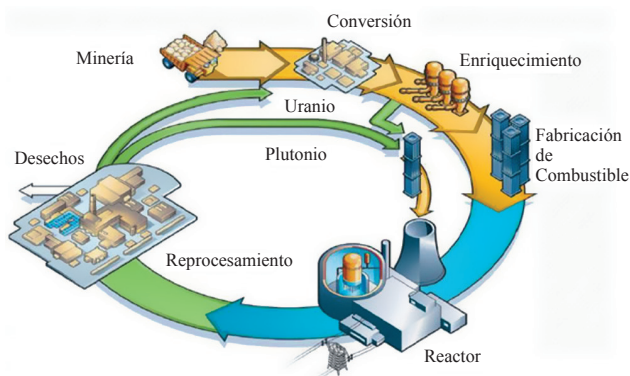


Figura 5. Esquema del ciclo del combustible nuclear (cortesía de AREVA).

## Energía solar

El Sol emite  $3,85 \cdot 10^{26}$  J/s y la tierra recibe de 800 a 900 W/m<sup>2</sup>; esto supone unas 10.000 veces la energía que consumimos, es decir, si el rendimiento de captación fuera del 100%, con una superficie de 500 x 500 km, algo menos de la mitad de la península ibérica, tendríamos cubiertas las necesidades energéticas mundiales.

La energía solar podemos aprovecharla mediante la utilización directa del calor (solar térmica) y mediante la captación de la radiación con semiconductores que transformen la energía en electricidad (solar fotovoltaica).

### Energía solar térmica

La energía solar térmica aprovecha, directamente, la energía del sol transformándola en calor para calentar agua, o cualquier otro fluido, por ejemplo aceites, que pueden utilizarse para fines sanitarios, para sistemas de calefacción y refrigeración, para producción de otras formas de energía, etc. Según su uso, se cuenta con tres tipos de colectores:

- Baja temperatura.** Se utilizan colectores para la producción de agua sanitaria y para calefacción y refrigeración de viviendas. Se componen de un marco de aluminio, una cubierta de vidrio, placa absorbentes, enrejado de tubos de circulación, cabezales de alimentación y descarga de agua, aislante, usualmente poliestireno y depósito acumulador de agua caliente. Suelen tener una superficie normalizada de 2 m<sup>2</sup>. En la Figura 6 puede verse un colector típico.
- Media-alta temperatura.** Los colectores son del tipo canal parabólico pues utilizan reflectores parabólicos en una configuración de canal para enfocar la radiación solar directa sobre un tubo largo que corre a lo largo de su foco y que conduce al fluido de trabajo, que puede alcanzar temperaturas de hasta 500 °C. La Figura 7 muestra un ejemplo de estos canales y la Figura 8 muestra cómo se consigue la concentración, por reflexiones. También se usan sistemas de torre central con heliostatos, espejos altamente reflectantes, para enfocar la luz solar, con la ayuda de un ordenador (Figura 9). En ambos casos, se calienta un fluido térmico a media-alta temperatura que puede, a su vez, calentar agua para generar vapor, o utilizar el calor en otros usos.
- También se utiliza la radiación solar en hornos solares,** que concentran la irradiación solar con lentes, llegando a alcanzar temperaturas de más de 3.000 °C.

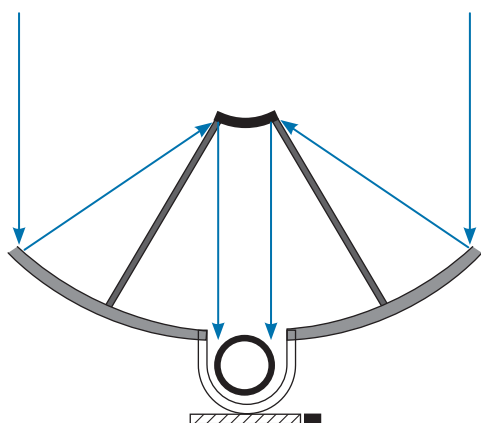


Figura 6. Colector típico de energía solar térmica, de baja temperatura, con depósito acumulador (fuente: WIKIPEDIA).





**Figura 7.** Colectores cilíndrico-parabólicos captadores de energía solar térmica de media temperatura.



**Figura 8.** Esquema de la reflexión en los captadores cilindro-parabólicos (fuente: WIKIPEDIA).



**Figura 9.** Captación de energía solar térmica de torre central con heliostatos.

### Energía solar fotovoltaica

Este aprovechamiento de la energía solar, se basa en el efecto fotoeléctrico que se produce al incidir la luz (fotones) sobre un material semiconductor que genera electrones (electricidad) Esto puede conseguirse utilizando varios tipos de células solares:

- Células de silicio monocristalino.
- Células de silicio policristalino.
- Células de silicio amorfo.
- Células de capa fina (por ejemplo, arseniuro de galio).
- Células de polímeros orgánicos.

Las células de silicio, producidas por procedimientos químicos, necesitan para su fabricación una gran cantidad de energía por lo que, las instalaciones solares fotovoltaicas son caras, por su proceso de producción y, por tanto, la inversión para construir uno de estos conjuntos de producción de electricidad por vía fotovoltaica es muy elevada. Esto hace que el kW·h producido por esta tecnología tenga un coste casi cinco veces mayor que el producido con procedimientos térmicos; por ello, para hacer atractiva la inversión en estas instalaciones es necesario prever subvenciones, normalmente de los Estados.

Es indiscutible la participación de la química en la obtención del silicio necesario para producir las células, en cualquiera de sus formas cristalinas o no, a partir de dióxido de silicio, muy extendido en la naturaleza así, como en la obtención de los componentes de las capas finas, como el arseniuro de galio. En la Figura 10 se muestra un llamado huerto solar.



**Figura 10.** Huerto solar de producción de energía eléctrica (fuente: WIKIPEDIA).

Tiene gran importancia el desarrollo de las células de polímeros orgánicos semiconductores, que pueden presentar esta propiedad por su estructura molecular o por dopar la estructura orgánica con un compuesto metálico pues, según los expertos, si se consiguiera llegar a un rendimiento por encima del 15%, podrían utilizarse estas células que tienen un bajo coste de fabricación, en competencia económica con el resto de los procedimientos clásicos de producción de energía. Su rendimiento actual está entre el 5-7% aunque en la bibliografía se reivindican rendimientos de hasta el 8-9%<sup>3,4</sup>.

### Energía eólica

Se basa en el aprovechamiento de la energía del viento al circular por diferencias de temperatura o de presión. La producción de energía se realiza transformando, mediante engranajes, el movimiento giratorio del eje de las palas en el movimiento del rotor de un alternador que produce la corriente eléctrica. En la Figura 11 puede verse un grupo de aerogeneradores.

La potencia instalada mundial en 2010 es de unos 200.000 MW; ha crecido rápidamente pues se ha multiplicado por diez desde el año 2.000. España tiene una potencia total



**Figura 11.** Campo de aerogeneradores eólicos (fuente: WIKIPEDIA).

instalada de más de 20.000 MW, que es casi un 10% del total mundial. Solo Alemania, en Europa, tiene una potencia instalada superior a la española.<sup>5, 6</sup>

La química participa en la mayor parte de la construcción de un generador eólico, con los materiales necesarios: aluminio, cobre, acero, cemento, etc. Una parte esencial del aerogenerador son las palas que transforman el movimiento lineal del aire en el movimiento de rotación. Los materiales corrientemente utilizados son resina de poliéster reforzada con fibra de vidrio, resina epoxy reforzada con fibra de vidrio, fibra de carbono, aramidas (Kevlar), composites de madera, madera-epoxy o madera-fibra-epoxy. Todos estos materiales son preparados por métodos químicos.

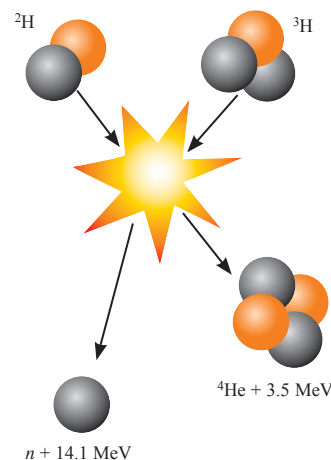
### Otras energías renovables

Hay otro conjunto de energías renovables que tienen un peso menor en la producción eléctrica como la geotérmica, las mareas, las olas, etc., pues son procedimientos que precisan unas condiciones mínimas que no se dan en cualquier emplazamiento. Así, en el caso de la geotérmica es rentable en determinadas zonas en las que el vapor de agua aparece cerca de la superficie, como es el caso de Islandia e Italia. En otras localizaciones, los trabajos a realizar, principalmente de acceso mediante obra civil, puede hacer inviable, por el coste, su explotación.

Las mareas, por su parte, precisan para ser rentables de diferencias de altura superiores a los 6-7 metros, que no se dan en cualquier ensenada. La energía de las olas precisa mecanismos muy complejos para transformar su movimiento en energía por lo que, hasta el momento, no hay instalaciones que hayan demostrado su viabilidad.

### Fusión termonuclear

Es un procedimiento de producción de energía en el que se han dedicado muchos medios a su investigación pero en el que no se han conseguido llevar las variables del plasma (densidad, tiempo de confinamiento y temperatura) hasta los valores en los que se produzca más energía, por fusión, que la suministrada para su formación; el plasma es un gas ionizado que se forma a temperaturas del orden de  $10^8$  K. Hay grandes máquinas toroidales (tipo *Tokamak*) que han llegado a valores próximos y se reivindica que el JET (*Joint European Thorus*) lo consiguió durante un tiempo muy corto. El reactor JET fue



**Figura 12.** Reacción de fusión termonuclear deuterio-tritio (fuente: WIKIPEDIA).

un proyecto de la Unión Europea en el que participaron un gran número de países, entre ellos España.

Hoy día se espera alcanzar esa situación con el proyecto ITER, en el que participan la Unión Europea, Rusia, Estados Unidos, China, Corea e India. El reactor se está construyendo en el sur de Francia, en Cadarache y tendría que estar finalizado en el año 2019, aunque los efectos de la crisis actual podrían retrasarlo.

El funcionamiento previsto es por confinamiento magnético, es decir, un campo magnético sustentaría el plasma, formado por una mezcla de deuterio y tritio para conseguir la reacción que se resume en la Figura 12.

### Conclusiones

Como resumen de todo lo expuesto anteriormente podríamos concluir con algunos comentarios sobre las relaciones entre la química y la energía:

1. La energía es el motor indiscutible de nuestra civilización.
2. No hay energía sin química.
3. El futuro de la producción de energía está en las energías renovables aunque, por el momento, pueda parecer una solución utópica.
4. Hasta alcanzar esa "utopía" necesitamos energías puentes (nucleares de fisión y de fusión).
5. La QUÍMICA ha de resolver grandes retos energéticos; la fabricación de células solares de polímeros orgánicos es uno de los fundamentales.

### Bibliografía

1. M. Lucini, *Turbomáquinas de vapor y de gas, su cálculo y construcción*, Editorial Labor, Barcelona
2. J. W. Kane, M. M. Sternheim, *Física*, Editorial Reverte, Barcelona.
3. MIT TECH TALK, *Boosting the Power of Solar Cells*, vol. 53, nº 10, 3 de diciembre, **2008**.
4. J. Kalowekamo, E. Baker, *Solar Energy* **2009**, 83, 1115–1424,.
5. <http://bit.ly/10jvAeQ>, visitada el 07/03/2013.
6. Foro de la Industria Nuclear Española, *Energía 2012*. Junio **2012**.

# Celebrando en Málaga el 2011 AIQ

Teresa Lupión, Carlos Criado, Juan T. López-Navarrete y J. Joaquín Quirante

**Resumen:** La celebración del 2011 como Año Internacional de la Química constituyó una oportunidad única para poner de manifiesto la importancia de la química para resolver los retos que tiene planteados la sociedad. La Sección Territorial de la RSEQ en Málaga junto con la Universidad de Málaga y otras instituciones locales llevaron a cabo una serie de actividades que en este artículo se resumen.

**Palabras clave:** 2011 Año Internacional de la Química, Universidad de Málaga, Sección Territorial de Málaga de la RSEQ, actividades de divulgación.

**Abstract:** The celebration of 2011 as the International Year of Chemistry was an unique opportunity to highlight the importance of chemistry to sort out the main challenges of the society. In this paper we report the activities carried out in 2011 by the Málaga Section of the RSEQ in collaboration with the University of Málaga.

**Keywords:** 2011 International Year of Chemistry, University of Málaga, Málaga Section of the RSEQ, outsourcing activities.

## Introducción

No cabe duda que tras celebraciones como las del año 2000, con motivo del Año Mundial de las Matemáticas, o del 2005 por el Año Internacional de la Física, que constituyeron oportunidades para poner de manifiesto la enorme contribución de estas disciplinas científicas al avance del conocimiento y al progreso de la sociedad, muchos químicos esperábamos algo similar en torno a nuestra ciencia. La declaración del año 2011 como Año Internacional de la Química por la Asamblea General de la Organización de las Naciones Unidas (2011IYC), bajo el atrayente lema “*Chemistry: our life, our future*”, satisfizo finalmente esta aspiración colectiva y supuso el punto de partida de lo que finalmente resultó ser una celebración a escala planetaria, basada en un sinnúmero de actividades de muy diverso tipo, alineadas con los objetivos marcados por la IUPAC y la

UNESCO, entidades encargadas de coordinar internacionalmente ese magno evento.<sup>1</sup> No está mal recordar que estos objetivos eran los de incrementar la apreciación pública de la química como herramienta fundamental para satisfacer las necesidades de la sociedad, promover el interés por la química entre los jóvenes, generar entusiasmo por el futuro creativo de la química y finalmente, y no por ello menos importante, hacer hincapié en el papel de la mujer en la investigación científica, esto último inspirado sin duda en una de las efemérides del 2011, el centenario de la concesión del Premio Nobel de Química a Marie Curie.

Desde la Facultad de Ciencias de la Universidad de Málaga, como en las conmemoraciones que se han citado, se promovió ya en 2010 la creación de un Comité para coordinar diferentes iniciativas en relación con el 2011IYC (2011AIQ en España). Se contó con la participación de entidades como la Sección Territorial en Málaga de la Real Sociedad Española de Química, el Centro de Ciencia Principia, el Centro de Formación del Profesorado de Málaga o la Asociación de Químicos de Andalucía, entre otros, y estuvo abierto a cuantos quisieron participar de uno u otro modo. Como consecuencia del esfuerzo colectivo y generoso de muchas personas de éstas y otras organizaciones relacionadas con la ciencia, en general, y con la química en particular, se llevaron a cabo a nivel local un más que representativo número de actividades que resumiremos a continuación, no sin antes significar que aparte de las que aquí reflejamos tuvieron lugar algunas otras en el marco de iniciativas de divulgación científica que cuentan ya con una importante tradición en la ciudad, como el XIV ciclo de conferencias “*Presente y Futuro de la Ciencia y Tecnología*”, que organiza el Excmo. Ayuntamiento de Málaga, la IX edición del “*Encuentros con la Ciencia*”, que patrocinan unos grandes almacenes implantados en la ciudad, así como la Bolsa de Conferencias de Divulgación Científica que coordina el Prof. Criado,<sup>2</sup> que en mayor o menor extensión tuvieron en cuenta la celebración de nuestro Año Internacional en su programación para el año 2011. Tampoco sería justo olvidar todas aquellas actividades que a su vez se llevaron a cabo autónomamente en centros de enseñanza secundaria por parte de sus docentes.



T. Lupión<sup>1</sup>

C. Criado<sup>2</sup>

J. T. López-Navarrete<sup>3</sup>

J. J. Quirante<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ciencias de la Educación Universidad de Málaga, Campus de Teatinos, s/n. 29071-Málaga (España)  
Centro de Profesorado de Málaga.  
C/ Noé, 3. 29007 Málaga (España)

<sup>2</sup> Departamento de Física Aplicada I. Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga, Campus de Teatinos, s/n. 29071-Málaga (España)

<sup>3</sup> Departamento de Química Física. Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga, Campus de Teatinos, s/n. 29071-Málaga (España)  
C-e: [quirante@uma.es](mailto:quirante@uma.es)

Recibido: 06/02/2013. Aceptado: 11/03/2013.

**Ciclo de conferencias “La química: una ciencia, infinitas posibilidades”**

La que más se extendió en el tiempo y que de alguna manera sirvió de hilo conductor de la celebración del 2011AIQ en Málaga fue el ciclo de conferencias que llevó por título “La química: una ciencia, infinitas posibilidades” (Figuras 1 y 2), que se inauguró el 6 de abril de 2011 con la charla de Nazario Martín y se cerró, precisamente el día 15 de noviembre, con la de Enrique Ortí.

Todas las conferencias tuvieron lugar por la tarde, en la Sala de Actos del edificio del Rectorado de la Universidad de Málaga, junto al céntrico Paseo del Parque, con objeto de

que el horario y la ubicación facilitaran la asistencia. En la Tabla 1 se muestra el detalle del ciclo para cuyo programa se pretendió que estuvieran presentes algunos de los campos en los que la química ha ofrecido y ofrece soluciones a los grandes retos que la sociedad viene demandando. Dada la amplitud temática a abordar con este ciclo de conferencias, se tuvieron en cuenta otras actividades que tenían lugar en paralelo de modo que no se produjeran repeticiones en los temas. Por tanto y en base a esa complementariedad, nos queremos hacer aquí eco de las conferencias impartidas en el Museo del Patrimonio Municipal de Málaga, dentro del XIV ciclo de conferencias “Presente y futuro de la Ciencia y la Tecnología” (Figura 3) por Bernardo Herradón (“La química y el medio



Figura 1. Exterior del díptico anunciado el ciclo de conferencias. “La química: una ciencia, infinitas posibilidades”.



Figura 2. El profesor Acuña impartiendo su conferencia en el Salón de Actos del Rectorado.



Figura 3. Cartel de otro ciclo de divulgación científica que se sumó a la celebración del 2011AIQ.

Tabla 1. Programa del Ciclo de Conferencias “La química: una ciencia, infinitas posibilidades”.

Título	Día	Ponente
“Nanociencia: la importancia de lo pequeño”	6-abr-11	Nazario Martín
“Química y salud: nuevos medicamentos y más”	27-abr-11	Pilar Goya
“Aportación de la química a la Investigación criminal a través de la policía científica”	18-may-11	Francisco Ramírez
“Química de la luz: origen y aplicaciones de la fluorescencia”	31-may-11	A. Ulises Acuña
“¿Qué sabemos de la presión?: De la Tierra a Titán pasando por el laboratorio”	10-jun-11	Miguel A. Alario Franco
“La evolución de la química de alimentos: la revolución de los alimentos funcionales”	24-jun-11	Javier Señoráns
“La estructura tridimensional de proteínas como instrumento para el diseño de nuevos fármacos”	13-oct-11	Guillermo Giménez-Gallego
“Generando luz con moléculas: Sistemas moleculares electroluminiscentes”	15-nov-11	Enrique Ortí

ambiente: los problemas y soluciones”) y por Nazario Martín León (“Nanotecnología del carbono”), o la impartida por Antonio Heredia (“Querida química”) dentro de la IX edición del ciclo de conferencias “*Encuentros en la Ciencia*”, en la Sala de Ámbito Cultural de El Corte Inglés.

A lo largo del Ciclo “*La química: una ciencia, infinitas posibilidades*” resultó encomiable el trabajo del gabinete de comunicación de la Universidad de Málaga para dotar al mismo del mayor efecto mediático, uno de los objetivos implícitos en este tipo de celebraciones. También el del personal del Vicerrectorado de Cultura y de Relaciones Internacionales de la Universidad de Málaga. Se llevaron a cabo tanto presentaciones a los medios de comunicación así como la emisión de notas de prensa acerca de las respectivas charlas.

Esta actividad fue expresamente considerada por parte del panel internacional coordinador del 2011IYC como actividad oficial de dicho evento.

### Jornadas de puertas abiertas en la Facultad de Ciencias: “*La química que investigamos*”

Durante los días 27 y 28 de Abril de 2011 tuvieron lugar unas jornadas de puertas abiertas en la Facultad de Ciencias bajo el título “*La química que investigamos*” (Figuras 4 y 5). La tabla 2 recoge el número y procedencia de los estudiantes no universitarios que participaron en las mismas.



**Figura 4.** Demostración con el sistema de teleanálisis láser en las Jornadas “*La química que investigamos*”.



**Figura 5.** Experiencias en el laboratorio a cargo de profesores de la Facultad de Ciencias.

Estas jornadas estuvieron dirigidas tanto a los estudiantes de la facultad como a estudiantes de educación secundaria persiguiendo, por una parte, dar a conocer la labor investigadora que se desarrolla en la facultad en relación con la química y, por otra, despertar el interés por esta ciencia y por la investigación en unos y otros estudiantes. Esta actividad también recibió el sello “*2011IYC Official Activity*”. En estas jornadas se realizaron actividades como:

- *Exposición de paneles sobre investigaciones llevadas a cabo en educación secundaria.* El alumnado de ESO y Bachillerato participantes que consiguieron premios en las sucesivas ediciones del concurso que anualmente promueve la Sección Territorial de la RSEQ y la Facultad de Ciencias, con la colaboración de la Delegación Provincial de Educación de la Junta de Andalucía a través del Centro del Profesorado de Málaga, tuvieron la oportunidad de dar a conocer sus trabajos a través de una exposición de paneles. Esta actividad se desarrolló el miércoles día 27 de abril.
- *Sesiones abiertas de pósteres y/o presentaciones orales sobre la investigación en la Facultad.* Durante los dos días indicados, jóvenes investigadores, miembros de los distintos grupos de investigación de la Facultad de Ciencias relacionados con la química, expusieron las líneas actuales de sus grupos de investigación mediante pósteres y/o breves presentaciones orales. Como datos globales diremos que 14 grupos de investigación participaron en las jornadas a través de 16 comunicaciones orales y una veintena de pósteres.

**Tabla 2.** Datos sobre la participación de estudiantes no universitarios en las Jornadas de Puertas Abiertas “*La Química que Investigamos*”

Centros de Secundaria Participantes	Día	Número de Estudiantes
IES Pablo Picasso (Málaga)	27	10
Colegio Cerrado de Calderón (Málaga)	27	32
IES Huerta Alta (Alhaurín de la Torre)	27	15
IES Nuestra Señora de la Victoria (Málaga)	27	50
IES Ciudad Jardín (Málaga)	27	15
IES Manuel Romero (Villanueva de la Concepción, Málaga)	27	40
IES Bezmiliana (Torre del Mar, Málaga)	27	25
IES Universidad Laboral (Málaga)	27	45
CES Santa María de los Ángeles (Málaga)	28	18
IES Llano de la Viña (Villagordo, Jaén)	28	15
Colegio Virgen Inmaculada Santa María de la Victoria (Málaga)	28	30
Colegio La Presentación (Málaga)	28	25
Centro Concertado María Auxiliadora (Fuengirola)	28	45
Colegio Sierra Blanca (Málaga)	28	20
<b>Total</b>		<b>385</b>

- *Visita a las instalaciones y departamentos de la facultad relacionados con la química.* Para los estudiantes de educación secundaria, se organizaron visitas guiadas por instalaciones y departamentos de la facultad, en las que pudieron asistir a experiencias prácticas montadas al efecto o visitar laboratorios o instalaciones, entre otros, los de los Servicios Centralizados de Apoyo a la Investigación. Destacaron en este apartado las experiencias de teleanálisis mediante rayos láser, las exhibiciones tituladas “*Química por un tubo*”, a cargo de químicos del centro de ciencia “Principia” de Málaga, las sesiones de experimentos en los laboratorios de alumnos por parte de personal de los departamentos de la facultad, o las de ilustración de conceptos científicos con la ayuda de juguetes a cargo del profesor Criado.

### Edición del póster “*Historia de la química*”

Los profesores de la Facultad de Ciencias, Carlos Criado y Javier Ruiz acometieron con motivo del 2011AIQ la elaboración de un mural titulado “*Historia de la química*”,<sup>3</sup> contando para ello con la participación y asesoramiento de profesores de diferentes departamentos químicos de la facultad. El póster, que puede descargarse libremente para ser impreso desde la página web de la Facultad, [www.ciencias.uma.es](http://www.ciencias.uma.es), se suma a los anteriormente editados para las Matemáticas (año 2000) la Física (2005) o la Astronomía (2009), que han venido teniendo una acogida excepcional a tenor de las peticiones que sus autores vienen recibiendo desde los más variados puntos geográficos así como por las descargas registradas. Con financiación del proyecto de divulgación científica Atalaya, de la Consejería de Innovación Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía, se realizó una primera tirada de 1000 ejemplares en papel a tamaño 138 cm x 63 cm, así como otros a tamaño mural como el que hoy preside el pasillo de entrada del módulo de química de la Facultad de Ciencias de la UMA y otros edificios relacionados con la química a lo largo de la Comunidad Autónoma Andaluza.

En relación con el póster se llevó a cabo una presentación oficial a los medios de comunicación, el día 9 de junio de 2011, y se comenzó su distribución al día siguiente entre los asistentes a una de las conferencias del 2011AIQ. En ella uno de sus autores, el Profesor Criado, insistió en que “el cartel se ha realizado de forma totalmente altruista con el único objetivo de crear una imagen más cercana de la química y motivar de una forma sencilla y divertida a los estudiantes, por ello el póster contiene no sólo informaciones e imágenes sino también detalles anecdóticos e incluso chistes, aunque no se dejan atrás datos históricos como la lista de los Premios Nobel de Química, el Sistema Periódico y muchos otros contenidos”.

### Edición del libro titulado “*Experiencias de investigaciones escolar en las aulas de química de ESO y Bachillerato*”

En libro editado (Figura 6) se ha llevado a cabo una recopilación impresa y en formato digital de los trabajos premiados en las tres primeras ediciones del concurso escolar sobre química que anualmente viene convocando la Sección Territorial de la RSEQ en colaboración con la Facultad de Ciencias y el Centro del Profesorado de Málaga. Las sucesivas ediciones del



Figura 6. Portada del libro “*Experiencias de investigaciones escolar en las aulas de química de ESO y Bachillerato*”.

concurso giraron anualmente en torno a temáticas diferentes pero siempre con el objetivo de potenciar en los estudiantes de secundaria el interés por la ciencia en general y por la química en particular. Se pretendió además que, con ayuda de sus profesores, los estudiantes identificasen a través de sus trabajos los aspectos más divulgativos y positivos de la química, ciencia central que impregna prácticamente todas las facetas de nuestra existencia. La generalidad de los conceptos químicos que con los materiales elaborados se ilustran hizo pensar en la posible utilidad para profesores y estudiantes de esos niveles educativos en sus respectivas actividades docentes y discentes.

Se han recogido así hasta 17 trabajos, de los cuales 10 han sido realizados por estudiantes de ESO y otros 7 por estudiantes de Bachillerato, que fueron los que resultaron ganadores del concurso en las sucesivas ediciones y modalidades. Para cada uno de ellos se ha elaborado una ficha y el correspondiente documento multimedia presentado por los equipos participantes (video, presentación, etc.).

### Jornada Formativa “*Educación-química-sociedad*”

También en el marco del 2011AIQ, a iniciativa del Centro del Profesorado de Málaga y en colaboración con la Facultad de Ciencias de la Universidad de Málaga, el 3 de noviembre de 2011 tuvo lugar en un céntrico hotel de Málaga una jornada formativa centrada en la “Educación en química” y en la repercusión de esta ciencia en la sociedad. Bajo la denominación de “*Jornada Educación-química-sociedad*” (Figura 7), se dirigió al profesorado de niveles educativos de



**Figura 7.** Desarrollo de una sesión de las jornadas formativas con la exposición “Entre Moléculas” al fondo de la sala.

primaria y secundaria de la provincia y llegó a contar con la participación de más de 90 docentes. La actividad fue reconocida oficialmente por la Junta de Andalucía, con el código 122922GE034, cara a la actualización continua del personal docente a su servicio.

A través de conferencias generales a cargo de expertos así como de talleres o seminarios más específicos, se abordaron, entre otros, los principales retos educativos que plantea la enseñanza-aprendizaje de la ciencia, en general, y de la química en particular, el conocimiento de investigaciones educativas de las que se derivan estrategias metodológicas y que aportan recursos para el trabajo en el aula y, finalmente, la sensibilización del profesorado acerca de la importancia de la actualización científico-didáctica y de la función social de la ciencia. En esta jornada se presentó también una copia de los carteles de la exposición “Entre moléculas”, del CSIC (Figura 7),<sup>4</sup> que desde ese momento se constituyó en exposición itinerante en préstamo para aquellos centros escolares que quisieran contar con ella como un recurso didáctico más.

## Conclusiones


Como resumen podemos decir que gracias al entusiasmo por la tarea de acercar la Química a nuestros conciudadanos, en especial a los más jóvenes, por parte de todos cuantos trabajaron en torno al 2011AIQ, esperamos que se haya contribuido a mejorar la valoración general de la química en nuestro ámbito geográfico más inmediato. También parece evidente que muchas de las actividades que se han puesto en marcha en el 2011AIQ merecerían tener continuidad en el tiempo. En torno a esta gran celebración se han generado muchas ideas y materiales que a partir de ahora pueden ser de gran ayuda para seguir avanzando en los objetivos generales que en su día se marcaron con motivo de este año dedicado a la química.

## Agradecimientos

Muchas de las iniciativas no hubieran sido nunca posible si no se hubiera contado con un amplio apoyo por parte de diferentes organismos o instituciones, entre ellos la propia Universidad de Málaga a través del entonces llamado Vicerrectorado de Cultura y Relaciones Institucionales, con la Vicerrectora Doña Isabel Calero al frente del mismo, la FECYT a través del Proyecto financiado FCT-11-1557, el Proyecto Atalaya de la Asociación de Universidades Públicas de Andalucía, la Delegación de Málaga de la Consejería de Educación de la Junta de Andalucía y la Excm. Diputación Provincial de Málaga.

## Bibliografía


1. <http://www.ciencias.uma.es/aiq>, visitada el 14/03/2013.
2. <http://www.ciencias.uma.es/divulgacion-cientifica>, visitada el 14/03/2013.
3. <http://bit.ly/Wqtiqz>, visitada el 14/03/2013.
4. L. Ferrando, L. Llera, P. Tigeras, *Anales Quim.* **2012**, *108*, 258–262



**VI REQOMED**  
GRANADA 19-21 JUNIO 2013

# VI Mediterranean Organic Chemistry Meeting

## (Granada, Spain, 19-21 June, 2013)



**Organizing Committee (Universidad de Granada):**  
Alejandro Fernández Barrero (Chair)  
María del Mar Herrador  
Pilar Arteaga Burón  
José Francisco Quiloz del Moral  
Andrés Parra  
José Antonio Dobado  
Alejandro F. Arteaga (Secretary)  
Manuela M. Lechuga Villena (Secretary)

**Scientific committee:**  
Miguel Yus (Universidad de Alicante)  
Joan Bosch (Universidad de Barcelona)  
Fernando López (Universidad de Almería)  
Isidro C. Collado (Universidad de Cádiz)  
Alejandro F. Barrero (Universidad de Granada)


**Confirmed lectures**


Prof. Ezequiel Inestrosa	Universidad de Málaga
Dr. Antonio Caballero	Universidad de Murcia
Prof. José Miguel Sansano	Universidad de Alicante
Prof. Gonzalo Blay	Universidad de Valencia
Dra. Yolanda Díaz	Universidad Rovira y Virgili
Dr. Alexandr Shafir	UAB/ICIQ
Prof. Elisabet Duñach	Université Nice Sophia Antipolis
Dr. Uwe Pischel	Universidad de Huelva
Dr. Antonio José Macías	Universidad de Cádiz
Prof. Andrés García Granados	Universidad de Granada
Dr. Juan Manuel Casas Solvas	Universidad de Almería

Early registration	April, 30th
Abstract submission	April, 30th
Late registration	June, 10th


	Early registration	Late registration
General	200 euros	250 euros
Accompanying person	120 euros	150 euros

The delegate pass includes admission to all sessions, all conference documentation, refreshments & lunches, Cocktail reception and Symposium dinner





[www.ugr.es/local/reqomed](http://www.ugr.es/local/reqomed)



## La química en la web

El material disponible de carácter divulgativo y/o educativo, con recursos diversos (experimentos, problemas, ejercicios, unidades didácticas, etc.), es abundante en la web. Esta sección recomienda sitios de interés e iniciativas de distintas índoles.

### Sitios web recomendados

#### Página web de la Real Sociedad Española de Química

La nueva página web (<http://www.rseq.org/>) pretende ser un sitio de referencia de la química en España y en castellano. La web recoge información de muy diversa índoles (ofertas de empleo, becas, noticias, cursos, seminarios, congresos, etc.). Los artículos publicados en *Anales de Química* están disponibles en la web de la RSEQ. Todos los socios de la RSEQ pueden suministrar información de interés que será colgada en la página web. Los artículos publicados en *Anales de Química* están disponibles en la web de la RSEQ.

#### Página Tienes química

Sitio web (<http://www.tienesquimica.com/>) gestionado por el Foro Química y Sociedad (*Anales Quim.* 2012, 107, 352) y creado para informar a los jóvenes de las posibilidades que tiene la química para ellos, para su formación y para un futuro trabajo.

#### A hombros de gigantes

Programa semanal de radio dedicado a la ciencia con frecuente mención a la divulgación de la química. Se emite en RNE en las madrugadas del domingo al lunes a partir de las 00:05. Hay varias secciones: entrevista con un científico relevante, biografías de científicos, avances en biomedicina, la ciencia en el cine, noticias científicas de actualidad, conociendo los centros del CSIC, las mujeres en la ciencia, historias de naturaleza y la ciencia de lo cotidiano. Frecuentemente se tratan temas relacionados con la química, especialmente en el espacio *La ciencia de lo cotidiano*, con la participación de Bernardo Herradón. En el último trimestre se han tratado temas diversos, de interés para los químicos, como: los procesos físicos y químicos en la cocina, la contaminación ambiental, la alimentación, las vitaminas y las hormonas. Los *podcast* se pueden descargar de la web (<http://bit.ly/ptKKjO>).

#### Los avances de la química y su impacto en la sociedad

Los temas tratados en el curso de divulgación “Los avances de la química y su impacto en la sociedad” han sido diversos: biomateriales, historia, materiales para la energía, las dos caras de la química, ciencia y medios de comunicación, fármacos, biomedicina, patentes, enseñanza de la química, química y futuro, alimentación, análisis sensorial, y nanociencia. El material (resúmenes de las sesiones, *posts* relacionados y copia de las presentaciones) se pueden descargar en <http://bit.ly/RcmZEI>.

#### ChemistryViews

Plataforma administrada por Wiley-VCH y ChemPubSoc con información completa y variada en investigación, divulgación, enseñanza e historia de la química. Publica artículo

los cortos destacando noticias de interés para la comunidad química, resúmenes de publicaciones recientes, reseñas de libros, etc. Se puede visitar en <http://bit.ly/9gMBuH>.

### Celebración del 125º aniversario de *Angewandte Chemie*

La revista *Angewandte Chemie* cumple 125 años en 2013. Desde la RSEQ queremos unirnos a las felicitaciones. Para conmemorar esta celebración, se ha organizado en Berlín un simposium con una brillante y multitudinaria asistencia (<http://bit.ly/Ye5cQy>). Una reseña del mismo se ha publicado en *Chem Eng News* (25 de marzo de 2013, pg 38; <http://bit.ly/QH0Snh>).

Con motivo del jubileo, la revista *Angewandte Chemie* ha dedicado un par de ediciones (los números 1 y 10) a la conmemoración, con la publicación de artículos, comentarios, entrevistas, ensayos y revisiones escritos por más de 50 químicos muy destacados (entre ellos 16 Premios Nobel). La mayoría de los artículos de estas dos ediciones están accesibles gratuitamente en la web (<http://bit.ly/ZVq8xt> y <http://bit.ly/VdAabC>). Especialmente destacable es el artículo *125 Years of Chemistry in the Mirror of “Angewandte”*, escrito por François Diederich (<http://bit.ly/ZtB7c0>), en el que hace un repaso al desarrollo de la química en los últimos 125 años.



### Carnavales de química

El *carnaval de química* es una iniciativa en la web en la que se publican *posts* relacionados con la química. Cada edición es gestionada por un *bloguero* distinto y tiene una duración aproximada de un mes. Las últimas tres ediciones se han alojado en los siguientes sitios:

#### XXI Carnaval de química

La edición de enero de 2013 fue alojada en el blog *Pero esa es otra historia...* (<http://worlderlenmeyer.blogspot.com.es/>), contando con la participación de 47 artículos (<http://bit.ly/14B1188>), tratando una extensa variedad de temas.



## XXII Carnaval de química

Esta edición (febrero de 2013) fue alojada por el blog *Roskencia* (<http://roskencia.wordpress.com/>), gestionado por Ismael Díaz, un joven bloguero de 14 años y estudiante de 3º de ESO. Esta edición ha contado con la participación de 37 *posts* de temática muy variada, tales como la historia de la química, la tabla periódica, demostraciones de química, entre otros (<http://bit.ly/ZgfSfn>).

## XXIII Carnaval de química

La edición de marzo de 2013 ha sido alojada en el blog *Moles y Bits: educación en ciencia y tecnología* (<http://molesybits.blogspot.com.es/>), que gestionan Luis Reig y Jorge Alemany, dos profesores de educación secundaria. Se han publicado 48 artículos de muy diversa temática, muchos de ellos de interés para la enseñanza de la química (<http://bit.ly/Z1MI5T>).



## La cristalografía en la web

Como es conocido, 2014 ha sido declarado por la ONU como el *Año Internacional de la Cristalografía* (IYCr). En esta sección nos haremos eco de algunas novedades en esta ciencia estrechamente relacionada con la química.

### Web del IYCr

La página web <http://www.iucr.org/iycr>, gestionada por la *International Union of Crystallography* contiene actividades previstas en IYCr.

### Laue Centennial Issue

Se ha publicado una edición especial de la revista *Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography* conmemorando el centenario de la primera observación de la difracción de rayos X por cristales, realizada por Max von Laue en 1912; uno de los descubrimientos más importantes en la historia de la ciencia. Los artículos, que se pueden descargar en *open access* de la web (<http://bit.ly/11f2T0I>), contienen una excelente descripción del entorno en el que se desarrolló la carrera científica de Laue, el desarrollo de la teoría de la difracción y la historia del análisis estructural.

## Redes sociales

### Feelsynapsis

Es una red social en español en la que participan científicos de todas las áreas. En este sitio web se publican artículos, anuncios de diversa índole y ofertas de trabajo.

Feelsynapsis edita la revista *Journal of Feelsynapsis* (JoF, <http://feelsynapsis.com/jof/index.html>), de la que se ha publicado el número 8, que se puede descargar de la web. La descarga es gratuita.

### Grupo de la RSEQ de Facebook

Grupo abierto en el que se cuelga información de interés, tales como enlaces a artículos científicos, noticias de política científica, anuncios de becas y contratos de trabajo, congresos, etc. Para acceder a cualquier cuenta de Facebook, es necesario crear el perfil en esta red social. Cualquier miembro del grupo puede colgar la información que considere pertinente relacionada con la química y la ciencia. El grupo continúa creciendo, estando formado por 915 miembros (<http://on.fb.me/zORV36>).

### Grupo de Química de Facebook

Grupo de discusión y exposición sobre los avances de la química. Principalmente, pero no exclusivamente, se mencionan artículos publicados recientemente en revistas científicas (<http://on.fb.me/ArIUwb>).

### Página *Todo es química-2012* de Facebook

Se enlazan y comentan artículos de divulgación, historia de la química y biografía de químicos (<http://www.facebook.com/todoesquimica2012>).

### Twitter de la RSEQ

En 140 caracteres se informa de novedades en química y en la RSEQ (<https://twitter.com/#!/rseq2012>).

## Olimpiada de Química

La Olimpiada de Química es un programa del Ministerio de Educación, Cultura y Deporte en colaboración con la Asociación Nacional de Químicos de España (ANQUE) y la Real Sociedad Española de Química (RSEQ), que se propone estimular la creatividad y el interés de los estudiantes del último año de secundaria. En él participan todos los centros de secundaria que lo deseen, a través de sus alumnos más interesados por la química; todas las universidades a través de coordinadores de pruebas de acceso a la universidad; y las dos asociaciones que representan a más de 15000 químicos en ejercicio. El programa no está dirigido exclusivamente a quien va a estudiar química, sino que es una oferta para todos, premiando a los mejores estudiantes.

Durante el mes de marzo se han celebrado las fases locales (autonómicas) que sirven para clasificar a estudiantes (entre 3 y 18, dependiendo del número de universidades públicas de cada autonomía) para la fase nacional, que este año se celebrará en Alicante del 26 al 28 de abril. Los cuatro primeros clasificados en la Olimpiada Nacional de Química representarán a España en la Olimpiada Internacional y en la Olimpiada Iberoamericana. La información sobre las olimpiadas (hasta la fase internacional) se puede encontrar en <https://olimpiadasquimica.es/>.

En la próxima edición de *Anales de Química* se informará detalladamente de los resultados y otros aspectos relacionados con la presente edición de la Olimpiada Nacional.

Selección realizada por: **Bernardo Herradón**

*Desde el Comité Editorial de Anales queremos felicitar a los socios que han sido galardonados con diversos premios y distinciones en reconocimiento a su trabajo y a sus grupos de investigación respectivos.*

## Concesión de tres ERC *Advanced Grants* a tres investigadores españoles

El Consejo Europeo de Investigación (*European Research Council*, ERC) ha concedido tres *Advanced Grants* a nuestros compañeros:

- Antonio M. Echavarren, con el proyecto “Advancing Gold Catalysis”;
- Nazario Martín con el proyecto “Chiral Allotropes of Carbon”;
- Romà Tauler con el proyecto “Chemometric and High-throughput Omics Analytical Methods for Assessment of Global Change Effects on Biological and Environmental Systems”.

“Las becas ERC *Advanced Grant* están dirigidas a investigadores que se han establecido como líderes excepcionales en sus respectivos campos de investigación”—tal como dice la página web de las becas ERC *Advanced Grants*.

Estas becas millonarias concedidas por el único criterio de excelencia científica permiten a los directores de investigación, **reconocidos como excepcionales**, realizar proyectos pioneros de alto riesgo que abran nuevos caminos en sus respectivos campos de investigación o en otros dominios. El ERC promueve una investigación de la máxima calidad en Europa mediante la financiación competitiva y respaldar las investigaciones de vanguardia iniciadas por los propios investigadores en todos los campos de investigación, con arreglo al criterio de la excelencia científica.



Profesor Antonio M. Echavarren

El **Profesor Antonio M. Echavarren**, es *Group Leader* y Subdirector de asuntos académicos del Instituto Catalán de Investigaciones Químicas (ICIQ). “La concesión de esta beca supone una de las mayores satisfacciones en mi carrera

científica”, dice Antonio Echavarren. “Es un reconocimiento al esfuerzo personal tanto como al de un grupo formado por colaboradores jóvenes que, aunque ha ido cambiando mucho con el tiempo, siempre se ha destacado por su talento y entusiasmo”.

Antonio M. Echavarren se ha establecido como un investigador de referencia en la investigación sobre catálisis del oro. Su equipo se ha convertido en uno de los grupos de investigación pioneros en este campo. Echavarren ha jugado un notable papel en el desarrollo de la catálisis homogénea del oro y así lo reconoce la concesión de esta beca europea.

“La beca ERC *Advanced Grant* nos va a permitir explorar nuevas áreas de la química del oro, desarrollando nuevos tipos de catalizadores que permitan acceder a objetivos sintéticos más ambiciosos, tanto en lo que se refiere a nuevos métodos de construcción de moléculas complejas como en aplicaciones en química de materiales”.

El ICIQ es uno de los centros de investigación españoles más exitosos y que cuenta con un mayor porcentaje de ERC por grupo de investigación, con dos *Advanced Grants* y cinco *Starting Grants*, un total de 7 ERC entre los 18 grupos de investigación con los que cuenta el centro.



Profesor Nazario Martín

El **Profesor Nazario Martín** es Catedrático de la Universidad Complutense de Madrid y Director Adjunto del Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA). El proyecto presentado está dirigido a responder a la pregunta fundamental de cómo introducir quiralidad en una variedad de nanoestructuras de carbono y como ésta puede modificar las propiedades de las nuevas nanoformas de carbono en la búsqueda de nuevas aplicaciones en ciencia de materiales y nanotecnología. El proyecto describe por tanto un programa de investigación fundamental y tecnológico diseñado para una mejor comprensión del desarrollo de

nanoestructuras de carbono quirales mediante el uso de la química covalente y supramolecular y su posterior modificación química, que permita acceder a nuevas y sofisticadas nanoarquitecturas supramoleculares en 3D.

Este importante reto científico no ha sido abordado hasta ahora en Europa debido, en parte, a las dificultades inherentes de trabajar con estos materiales de carbono y, particularmente, debido a la falta de un protocolo químico eficaz para preparar nanoformas de carbono quirales. En este sentido la publicación pionera en este campo viene del grupo de Materiales Moleculares Orgánicos de la UCM dirigido por Nazario Martín que fue publicada en la prestigiosa revista *Nature Chemistry* en 2009 en la que se utiliza, por primera vez, la catálisis asimétrica en una síntesis de fullerenos. Este trabajo considerado como una “prueba de concepto” se ha visto potenciado con el uso de organocatálisis en la preparación de fullerenos quirales publicada por el mismo grupo en *Angewandte Chemie International Edition* en este año 2013.

El **Profesor Romà Tauler** es Profesor de Investigación del Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua del CISC y Presidente de la Sociedad Catalana de Química desde el año 2008. Su actividad investigadora está centrada en el campo de la quimiometría, siendo un especialista de ámbito internacional. De especial mención son sus aportaciones en el desarrollo de métodos de resolución multivariante y sus aplicaciones en el campo de la química analítica, química bioanalítica y química ambiental.

El proyecto integra el desarrollo de metodologías quimiométricas, analíticas y toxicológicas para la investigación de los efectos de los contaminantes ambientales y del cambio global en general sobre los genes y metabolismo de un grupo de organismos biológicos representativos. Se pretende por un lado desarrollar nuevas metodologías analíticas, especialmente LC-MS, GC-MS o NMR para metabolómica ambien-



Profesor Romà Tauler

tal (entendida como la identificación y descripción de los cambios ocurridos en los perfiles metabólicos de organismos representativos a causa de los cambios ambientales, de los contaminantes y del cambio global en general) o mediante micromatrices de DNA (DNA u-arrays) para genómica ambiental (lo mismo para perfiles y respuestas génicas de organismos representativos). Aunque este tipo de investigación está ya siendo utilizada en los campos de la salud y la alimentación fundamentalmente, la originalidad de la propuesta se centra en la evaluación de los efectos de la contaminación ambiental y del cambio global (cambio climático, limitación de recursos, cambios ambientales...).

### Premio de investigación “Alexander von Humboldt” al Nazario Martín

El Profesor Nazario Martín, Catedrático de la Universidad Complutense de Madrid y Director Adjunto del Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA), ha recibido el premio de investigación “Alexander von Humboldt” concedido por la Alexander von Humboldt Foundation, dedicada a la promoción de la cooperación académica entre científicos de excelencia y estudiantes de dentro y fuera de Alemania.

El Prof. Martín es un experto internacional en la construcción covalente y supramolecular de materiales ricos en carbón. Su investigación es conocida tanto por los logros desde el punto de vista sintético como por sus descubrimientos de nuevos materiales orgánicos con aplicaciones en ciencia fotovoltaica y nanociencia. En particular, el Prof. Martín ha realizado contribuciones seminales al estudio de nanoestructuras de carbón (concretamente fullerenos y nanotubos), sistemas  $\pi$ -conjugados empleados como alambres moleculares y moléculas electroactivas, tales como los tetratrafalvalenos en el contexto de procesos de transferencia de electrones fotoinducida. Durante su estancia en Alemania,



participará en un curso en “Nanocarbon Chemistry” dirigido a doctorandos. Además, reforzará los proyectos de investigación ya existentes en colaboración con grupos alemanes e iniciará nuevas colaboraciones.

### Alexandr Shafir seleccionado como conferenciante español en el Young Investigator Workshop 2013

Alexandr Shafir ha sido seleccionado como conferenciante español en el Young Investigator Workshop 2013, que se celebrará en Marsella del 4-6 de Julio de 2013, bajos los auspicios de la División de Química Orgánica de EuCheMs. Con esta distinción se pretende promover y reconocer la excelencia académica en Química Orgánica dentro y fuera de Europa, para lo cual se organiza un seminario anual para jóvenes investigadores (Young Investigators Workshop, YIW) en Química Orgánica. Este evento se asocia al European Chemical Congress (EuCheMs) o bien al European Symposium on Organic Chemistry (ESOC). El próximo YIW tendrá lugar en Marsella a continuación del congreso ESOC 2013 (<http://esoc2013.eu/>).

Alexandr Shafir nació en Ucrania y realizó sus estudios de Química en Estados Unidos, en el Hunter College de la City University de Nueva York. Realizó su doctorado en UC Berkeley, donde trabajó bajo la dirección del Prof. J. Arnold en la síntesis de complejos metálicos soportados en ligandos basados en ferroceno. Su interés por la catálisis le llevó a realizar una estancia postdoctoral con el Prof. S. L. Buchwald (Massachusetts Institute of Technology) desarrollando ligandos para reacciones de formación de enlaces C-N y C-O catalizadas por Cu. En 2007 consiguió un contrato Ramón y Cajal para trabajar en la Universidad Autónoma de Barcelona (UAB), y desde enero de 2013 es Group Leader en el Instituto de Cataluña de Investigación Química (ICIQ) dentro del programa Starting Career. Sus intereses científicos actuales



Alexandr Shafir

consisten en estudiar la habilidad de algunos catalizadores de Cr y Ti para catalizar desde la polimerización clásica de olefinas hasta la oligomerización selectiva. Ha sido concesionario de un proyecto EXPLORA (MICINN) y de un proyecto para jóvenes investigadores APOSTA (UAB).

### Firma del Convenio para la Conferencia Lilly 2013

Nuestro Presidente, Jesús Jiménez-Barbero, y nuestro Secretario General, Pedro J. Pérez, han visitado el Centro de Investigación de Lilly en Alcobendas (Madrid) para firmar el convenio por el que se constituye la Conferencia Lilly 2013, que se impartirá en la XXXIV Biental de la RSEQ en Santander (15-18 de Septiembre de 2013) a cargo de un joven investigador menor de 40 años. Se trata ya de una larga tradición por parte de Lilly para reconocer y alentar la investigación por parte de investigadores jóvenes en el ámbito de la química española.



Presidente (centro) y Secretario General (derecha) junto a Javier Mendiola (izquierda), Research Scientist de Lilly.

### Anuncio de la XXXIV Reunión Biental de la RSEQ en Santander

<b>B2</b> <b>Q0</b> <b>S1</b> <b>3</b> Biental Química Santander		<b>XXXIV</b>
	<i>"Química para un futuro común"</i>	<b>REUNIÓN BIENTAL</b>
		<b>Real Sociedad Española de Química</b>
	<small>Playa de Liencres (Cantabria)</small>	<b>Santander 15-18 septiembre 2013</b>

El domingo 15 de septiembre de 2013 comenzará en Santander la 34 Reunión Biental de la Real Sociedad Española de Química en el 30 aniversario de la primera reunión bienal específicamente de Química, puesto que las ediciones anteriores habían agrupado las contribuciones de la Física y de la Química. El Palacio de la Magdalena (UIMP) y la ETSIIyT (UC) serán el lugar de encuentro de la RSEQ en 2013, en una Biental presidida por el Profesor Luis Oro.

En la primera circular de la Biental 2013 (ver <http://rseq2013.unican.es>) se presenta al excelente grupo de conferenciantes plenarios e invitados. Entre los conferenciantes plenarios se puede destacar al Premio Nobel de Química 2005 Robert H. Grubbs, al Presidente de la IUPAC Kazuyuki Tatsumi y al Presidente de la Federación Europea de Ingeniería Química Richard Darton, los cuales, junto a los premiados Alois Fürstner, Nazario Martín y María Vallet-Regí darán una completa visión de los aspectos más actuales de la Química y de la Ingeniería Química.

El grupo de conferenciantes invitados, seleccionados por el Comité Científico, recoge una representación de los científicos españoles más activos en las áreas objeto de los Simposios, que abarcan desde la Adsorción hasta la Divulgación, incluyendo las temáticas más actuales como la Nanociencia, la Energía o las Biociencias en su relación con la Química y la Ingeniería Química.

Además de los aspectos habituales de interés general y los Simposios de interés específico, se han incluido eventos satélite que focalizan la atención en la contribución de los Centros Tecnológicos, Institutos de Investigación, Servicios Científico-Técnicos y Empresas a uno de los objetivos prioritarios de nuestros jóvenes investigadores, que es el empleo y la creación de valor a través de la innovación mediante el conocimiento.

El Comité Organizador Local ([rseq2013@unican.es](mailto:rseq2013@unican.es)) se encuentra a disposición de todos los miembros de la RSEQ o personas interesadas en el evento para facilitar la participación y recoger todas las iniciativas, comentarios o propuestas relacionadas con el desarrollo de la Reunión como ya se ha hecho con la incorporación del evento satélite Nuevos Retos de la Electroquímica y el apoyo al Grupo de Productos Naturales.

En resumen, a través de los siglos, las puertas de Santander (Portus Victoriae) han estado abiertas a todas las personas interesadas en el avance de la Sociedad a través del Conocimiento por lo que estamos convencidos que la 34 Reunión Biental de la RSEQ en Santander del 15 al 18 de septiembre próximos será una apuesta decidida por el futuro de la Química y de la Ingeniería Química a la que no puedes faltar. Te esperamos.

Firmado: **Angel Irbien**  
en nombre del Comité Organizador Local.

### 18ª Conferencia Félix Serratosa

Los días 21 y 22 de enero del presente año se celebró la 18ª Conferencia Félix Serratosa. Esta Conferencia, de periodicidad anual, viene celebrándose como homenaje al que fue un prestigioso químico, introductor en España de las modernas bases de la Síntesis Orgánica, y una persona entrañable por su cultura, inquietud y trato afable para con colegas y alumnos. La Conferencia se organiza desde sus inicios a partir de la labor de una Comisión de exdoctorandos del Profesor Serratosa y se desarrolla en centros donde él llevó a cabo su labor profesional: el Consejo Superior de Investigaciones Científicas, la Universidad de Barcelona y la Universidad Autónoma de Barcelona. En los últimos años el *Institut Català d'Investigació Química* se ha unido como nueva sede de la Conferencia. Es evidente que la pervivencia de la Conferencia se debe al apoyo que se recibe de aquellas instituciones y, sobretudo, del *Institut d'Estudis Catalans* (a través de su Sección de Ciencia y Tecnología y de la Sociedad Catalana de Química) y de la Real Sociedad Española de Química. Las generosas aportaciones de estas dos instituciones es lo que realmente hace posible la celebración de la Conferencia año tras año.

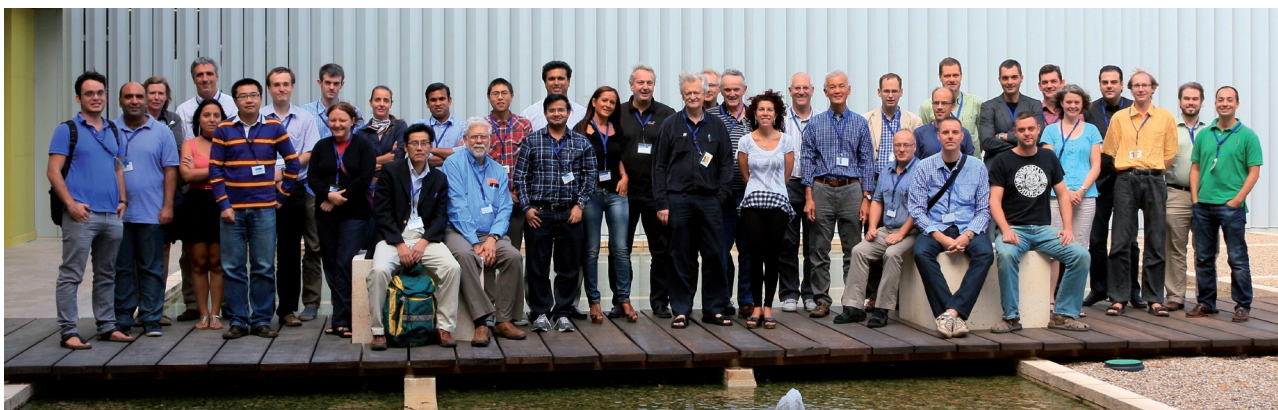
En cuanto a los participantes, cabe destacar que hasta el momento, tres de los que han intervenido en ediciones anteriores han recibido el Premio Nobel de Química. En esta ocasión, se ha contado con la participación de dos prestigiosos científicos: el Profesor Jesús Jiménez Barbero, del



De izquierda a derecha: Manuel Martín-Lomas, Angel Messeguer, Jesús Jiménez-Barbero, Josep Bonjoch, Rosa Ortuño, David R. Spring y Miquel Pericàs.

Centro de Investigaciones Biológicas del CSIC, y el Profesor David R. Spring, del Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Cambridge. Los actos de la Conferencia se llevaron a cabo en el Instituto de Química Avanzada de Cataluña (CSIC) y en el *Institut Català d'Investigació Química* de Tarragona, y ambos pueden calificarse de un éxito por la calidad de las presentaciones y el interés que suscitaron entre la nutrida asistencia a los mismos.

### CECAM/ESF Workshop sobre estados de espín en Zaragoza



Participantes del CECAM/ESF workshop en Zaragoza.

En Septiembre 2012 tuvo lugar en el centro Z-Cam en Zaragoza un workshop (<http://www.cecarn.org/workshop-671.html>) financiado por CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire) y ESF (European Science Foundation). El objetivo principal del workshop era la evaluación del papel de los estados de espín en sistemas bioquímicos e inorgánicos, donde las moléculas con distinto número de electrones desapareados (los diferentes estados de espín) tienen distintas estructuras, propiedades y reactividad. Uno de los objetivos era analizar el estado actual de las metodologías teóricas utilizadas para predecir los estados de spin de estos sistemas y compararlos con los estudios experimentales, por ejemplo por la reactividad de estos sistemas. Los principales

expertos en el campo, tanto experimental (p.e. Larry Que, Miquel Costas, Bob Scheidt, Kara Bren, Kallol Ray, Eckard Münck) como teórico (p.e. Jeremy Harvey, Per Siegbahn, Martin Kaupp, Ulf Ryde, Markus Reiher, Sam de Visser), fueron invitados y participaron en el workshop. Además de los expertos bien conocidos, asistieron al workshop muchos jóvenes investigadores en las primeras etapas de su carrera. La mezcla de investigadores con diferentes niveles de experiencia en el tema contribuyó a animar y dinamizar las discusiones durante el taller. En total hubo 36 presentaciones repartidas en seis sesiones. Recientemente, se ha publicado en la revista *Nature Chemistry* un artículo sobre este workshop (*Nature Chemistry* **2013**, 5,7–9).

## La investigación: una prioridad a prueba

El Círculo Cívico de Opinión organizó el debate sobre “La investigación: una prioridad a prueba” el pasado 6 de febrero en el Círculo de Bellas Artes de Madrid. En la mesa redonda participaron Carlos Andradás (Presidente de la COSCE), Fernando P. Cossío (Catedrático de la UPV/EHU, Ikerbaske, Fundación Vasca para la Ciencia), Javier López-Facal (Profesor de Investigación del CSIC) y Luis Oro (Catedrático de la UNIZAR), junto a Margarita Salas (Profesora ad honorem del CSIC) como moderadora.

Se muestra a continuación la nota publicada por los Profesores Cossío y Oro.

Una característica de los países más desarrollados es la realización de un notable esfuerzo en investigación científica y desarrollo tecnológico (I+D). En el caso de España, los datos de 2010 indican una inversión en I+D como porcentaje del PIB de un 1,39%, frente al 2,0% de la UE-27 y el 2,4% de la OCDE. Por tanto, a pesar de las importantes mejoras que se han producido en las últimas décadas, dicho esfuerzo se encuentra todavía demasiado alejado del de los países más desarrollados, que tienen una inversión en I+D superior al 2,8%, cifra que sobrepasan notoriamente Japón, Finlandia, Suecia, EE UU y Alemania.

Conviene recordar que el esfuerzo inversor en I+D, en definitiva, inversión en conocimiento, ha sido el gran protagonista del crecimiento del PIB y de la productividad en la práctica totalidad de las economías desarrolladas a lo largo de las últimas décadas, y que el PIB basado en el conocimiento resiste mejor los periodos de crisis. Los últimos datos del Instituto Nacional de Estadística disponibles son los correspondientes a 2011, y nos avisan de que nuestra inversión en I+D está en recesión, habiendo experimentado un descenso del 2,8% respecto a 2010, pasando del 1,39% al 1,33% del PIB.

Posiblemente, el referido descenso se acentuará en 2012 y en 2013, años en los que el Gobierno ha reducido sustancialmente las subvenciones de I+D.

En este restrictivo marco, el pasado 1 de febrero, el Gobierno ha aprobado la Estrategia Española de Ciencia y Tecnología y de Innovación 2013-2020, así como el Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2013-2016. Este plan estatal estima que el gasto en I+D en relación al PIB evolucionará desde un hipotético 1,33% en 2013 al 1,48% en 2016. Las previsiones se han calculado partiendo de las premisas establecidas en el Plan de Estabilidad de la economía española, lo que conlleva una congelación del gasto total de I+D en las Administraciones públicas, que se mantendrá en el 0,61% del PIB. Por ello, para alcanzar el objetivo mencionado del 1,48% del PIB, el gasto total de I+D del sector privado debería pasar del 0,62% en 2013 al 0,73% en 2016, una hipótesis demasiado optimista ya que la contribución del sector privado al gasto total en I+D está descendiendo en los últimos años.

Resulta evidente que, en España, la crisis está provocando una reducción del esfuerzo total en investigación, desarrollo e innovación que puede afectar, de modo difícilmente reversible, al deseable cambio hacia un modelo productivo basado en el conocimiento. La I+D en nuestro país es, actualmente, una prioridad a prueba. En cualquier caso, debiéramos de ser capaces de adaptarnos al escenario actual, y realizar cambios que permitan una mayor eficacia. La mencionada Estrategia Española de Ciencia y Tecnología y de Innovación presenta propuestas positivas, pero se consideran convenientes otras acciones comple-



Fernando P. Cossío



Luis Oro

mentarias, tales como una revisión de la estructura y gobernanza institucional, tanto en las universidades como en los organismos públicos de investigación (OPI), que haga posible una mejora de su eficiencia, así como una optimización de los recursos humanos dedicados a estas actividades, que no debiera seguir, únicamente, un esquema funcional.

La investigación científica española ocupa un lugar razonable en el concierto internacional, lo que constituye una fortaleza si somos capaces de conectarla con el sector productivo. Existen experiencias tales como las llevadas a cabo en el País Vasco (Ikerbasque, centros tecnológicos y de investigación cooperativa, BERCS...) que muestran que un esfuerzo exigente y diversificado entre los diversos agentes científico-tecnológicos permite retornos tanto en los ámbitos tecnológicos como en la investigación básica, en este último caso a través de la atracción de fondos europeos competitivos. Es importante señalar que estos retornos pueden producirse en plazos relativamente cortos.

En general, la actividad de I+D+i vinculada al ámbito industrial y empresarial está por debajo de lo que corresponde a un país de nuestro desarrollo económico. Por ello sería deseable fomentar políticas que puedan conducir al aumento de tamaño de las empresas y a la cooperación de las empresas entre sí; mejorar la financiación de las empresas mediante instrumentos de préstamo, capital semilla y capital riesgo; incentivar la participación de las empresas españolas en programas nacionales e internacionales de I+D fomentando la colaboración con las universidades y OPI; incentivar la contratación de jóvenes investigadores por parte de las empresas, favoreciendo la movilidad entre la industria y la investigación académica; fomentar el mecenazgo y la financiación privada de la I+D mediante una política adecuada de incentivos fiscales, y muy especialmente fomentar la transferencia de resultados de investigación del sector público al sector productivo.

En definitiva, ante la coyuntura económica actual no podemos permitirnos el lujo de la pasividad ni del desánimo. El trabajo hecho a lo largo de estos años no puede desaprovecharse. Por el contrario, debemos hacer un esfuerzo en I+D anticíclico y, al mismo tiempo, flexibilizar y actualizar nuestros modelos de gestión de la I+D pública y privada. Solo así podremos afrontar los retos que se avecinan, como el Círculo Cívico de Opinión ha subrayado con fuerza.

Firmado: **Fernando Cossío y Luis Oro**  
<http://www.circulocivicodeopinion.es/>

## Carta al Presidente del Gobierno de los Presidentes de Sociedades Científicas Españolas



Los Presidentes de Sociedades Científicas Españolas agrupadas en la Confederación de Sociedades Científicas de España (COSCE), se han dirigido al Excmo. Presidente del

Gobierno Señor Don Mariano Rajoy Brey, como representantes de los más de treinta mil científicos afiliados a las mismas, para manifestarle la honda preocupación por el deterioro de la I+D+i en nuestro país y la ausencia de una política científica coherente que confiera la estabilidad y serenidad que la investigación científica necesita.

La carta completa puede obtenerse en la página web de la RSEQ: [www.rseq.org](http://www.rseq.org)

## Carlos Negro, reelegido Presidente del Foro Química y Sociedad

En su reunión ejecutiva del pasado 19 de febrero, el Consejo Director del Foro Química y Sociedad reeligió por unanimidad a Carlos Negro Álvarez como presidente de la entidad por un nuevo período de tres años. Carlos Negro agradeció la confianza en él depositada y manifestó su renovada ilusión por presidir una entidad como el Foro, dedicada a impulsar la divulgación de la química y su contribución al bienestar de la sociedad y promover la investigación, el desarrollo científico y la innovación tecnológica en el área de la química, y donde están presentes todos los estamentos del sector químico.

Carlos Negro Álvarez es Catedrático del Departamento de Ingeniería Química de la Universidad Complutense de Madrid (UCM). Ha sido Presidente de la Asociación Nacional de Químicos de España (ANQUE) en el período 2009-2012.

El Foro está integrado por las nueve principales organizaciones representantes de colectivos relacionados directamente con la química, siendo todos ellos miembros constituyentes:

- Asociación Nacional de Químicos de España (ANQUE).
- Conferencia Española de Decanos de Química.
- Consejo General de Colegios de Químicos de España.
- Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC).
- Federación Empresarial de la Industria Química Española (FEIQUE).
- Federación Estatal de Industrias Afines de UGT (FITAG-UGT).



Carlos Negro Álvarez

- Federación Textil-Piel, Químicas y Afines de CCOO (FITEQA-CCOO).
- Real Sociedad Española de Química (RSEQ).
- Salón Internacional de la Química – Expoquimia, de Fira de Barcelona.

El Consejo Director es el órgano decisorio único del Foro Química y Sociedad, y adopta de forma colegiada sus decisiones. Forman parte del Consejo nueve Consejeros designados por cada una de las entidades adheridas y otros nueve Consejeros asesores designados de igual modo, que asisten y asesoran al Consejo.



## Actividades de las Secciones Territoriales

### III Curso de divulgación “Los avances de la química y su impacto en la sociedad”

Entre el 10 de enero y el 21 de marzo de 2013 se ha celebrado la III edición del curso de divulgación “Los avances de la química y su impacto en la sociedad”. El curso ha consistido en 11 conferencias y 2 mesas redondas, contando con la participación de destacados investigadores y docentes. Las mesas redondas abordaron dos temas de interés para las comunidades científica, educativa y divulgativa. La primera trató sobre las relaciones entre la ciencia y los medios de comunicación, con la presencia de un periodista (Seara-Valero), un catedrático de periodismo (Eliás) y un profesor universitario (López-Guerrero), todos ellos con formación científica. La segunda mesa redonda fue sobre el tema de la enseñanza y divulgación de las ciencias, contando con profesores de diversos niveles educativos (Pinto, Palacios y Moreno-Martínez) y una persona responsable de divulgación científica en el CSIC (Ferrando).

Las 11 conferencias trataron de investigaciones reciente en química y áreas relacionadas y sus implicaciones sobre nuestras vidas. Las conferencias han girado, principalmente, alrededor de dos áreas amplias: ciencia de los materiales (Morán y Martín, que impartió la conferencia de clausura) y biomedicina (Vaquero y Mann), con una conferencia interdisciplinaria sobre biomateriales (Vallet-Regí, que abrió el curso, ver imagen). También se trataron aspectos como los alimentos (Pérez-Cortés), análisis sensorial (Mijares) e historia de la química (Herradón). Otros temas abordados en el curso han sido la propiedad industrial (Cueto), así como reflexiones sobre las dos caras de la química (Herradón) y el futuro de la química (Herradón).



El alumnado del curso ha sido numeroso y variado, con una asistencia media de 80 personas. Entre los alumnos ha habido desde estudiantes de ESO hasta investigadores y profesores universitarios, incluyendo personas sin relación con la ciencia (economistas, publicistas, periodistas). Hay que destacar la presencia de numerosos estudiantes de institutos de educación secundaria, especialmente del Parque Aluche.

El curso ha contado con la colaboración de la RSEQ-ST de Madrid y el CSIC. Toda la información del curso, incluyendo las copias de las conferencias y resúmenes de todas las sesiones, se pueden descargar en <http://bit.ly/RcmZEI>.

Remitido por: **Bernardo Herradón**,  
Director del curso.

## Centenario de la creación de los Estudios de Química en la Universidad de Granada



El pasado domingo 13 de Enero de 2013 se cumplieron cien años de la creación de los estudios de Química en la Universidad de Granada. En estos cien años varios miles de alumnos se han formado en las aulas y laboratorios de química de la Facultad de Ciencias de Granada; asimismo, las enseñanzas han ido evolucionando a lo largo del siglo al compás del espectacular desarrollo que ha tenido lugar en la Química, así como de las necesidades sociales. Muchas generaciones de hombres y mujeres formados como químicos en la universidad granadina han trabajado y trabajan en la enseñanza, en la investigación, en la industria química o agroalimentaria, o en cualquier otra labor, a veces muy alejada de la química –se habla de la versatilidad del químico–.

En este contexto hemos querido detenernos un momento aprovechando el número mágico de los 100 años para recordar a quienes lo hicieron y lo siguen haciendo posible, a los estudiantes que somos o fuimos, a los que vinieron a Granada y a los que se fueron de ella. Para conmemorar esta efeméride se van a llevar a cabo una serie de actividades a lo largo de

este año 2013 y en las que la Sección Territorial de la RSEQ en Granada pretende colaborar en lo que le sea posible.

Estas actividades cuentan con un ciclo de conferencias mensuales, inaugurado el pasado 14 de Enero por el Prof. Federico Mayor Zaragoza, en las que intervendrán científicos de prestigio especialistas en diferentes áreas. También se contará con una exposición en el Hospital Real, sede del Rectorado, que mostrará el ayer y el hoy de la química en Granada y se editará un libro conmemorativo que revele aspectos históricos de estos estudios, tales como las causas de su implantación, la sociedad granadina del momento, las primeras mujeres químicas, las consecuencias de la guerra civil, etc. Por último, hay que citar la “Ventana de la Ciencia” organizada en el Parque de las Ciencias junto con la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía y la Universidad de Granada. Esta actividad que pretende mostrar qué son los estudios de química hoy en Granada y en la cual, bajo el nombre de “Más Química para un Mayor Bienestar”, grupos de investigación en química de nuestra Universidad mostrarán sus principales líneas de trabajo y resultados obtenidos.

Más información en:

Blog: <http://q100ugr.blogspot.com.es/>; Facebook (la línea de tiempo en Facebook llega hasta 1913 y a ella se van incorporando periódicamente fotografías y documentos de diverso tipo): <http://www.facebook.com/q100ugr>; Twitter: @q100ugr.

### Premio de la RSEQ, ST de Salamanca, al mejor expediente académico de Licenciatura en Química de la Universidad de Salamanca

La entrega de los premios correspondientes al curso Académico 2011-2012 ha tenido lugar durante los actos conmemorativos de la festividad de S. Alberto Magno, patrón de la Facultad de Ciencias Químicas, el lunes 19 de noviembre en el Salón de Actos de la Facultad. Se ha concedido el Primer Premio al mejor expediente de la Licenciatura en Química de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad de Salamanca, consistente en un Diploma y una dotación económica de 600 euros, así como una inscripción como Socio Joven de la RSEQ y suscripción a la Revista *Anales de Química* por un año. El primer premio ha sido concedido a Leire de Juan Fernández. El accésit para el segundo mejor expediente académico ha sido concedido a Alfredo Hernández Cabanillas, asimismo, con Diploma y una dotación económica de 300 euros junto con una inscripción como Socio Joven de la RSEQ y suscripción a la Revista *Anales de Química*, también por un año.



En la fotografía aparecen los premiados junto con la Sra Decana de la Facultad de Ciencias Químicas, y el presidente y el secretario de la Sección Territorial de Salamanca.

### El profesor Julio Casado investido Doctor *Honoris Causa* por la Universidad de Vigo

El pasado día 28 de enero, Julio Casado, catedrático emérito de la Universidad de Salamanca, ha sido investido Doctor *Honoris Causa* por la Universidad de Vigo. La propuesta fue presentada por el Departamento de Química Física y los departamentos de ciencias de la institución gallega.

Julio Casado se doctoró en la Universidad de Valladolid con la dirección del profesor Salvador Senent con quien también inició su carrera postdoctoral como becario de la Fundación Juan March para estudios postdoctorales, investigando la cinética de reacciones en disolución en España. Posteriormente, con una *Postdoctoral Research Grant* de la Fundación Juan March, realizó una estancia postdoctoral en Dinamarca, investigando en espectroscopia molecular en el grupo del profesor Bak. A su regreso, creó en la Universidad de Valladolid el primer laboratorio de espectroscopia de microondas en España. Catedrático de la Universidad de Santiago de Compostela desde 1972, dirigió el Departamento de Química Física y el Instituto Interdepartamental de Investigaciones Químicas (CSIC) y fue vicerrector. Desde 1983 es catedrático de la Universidad de Salamanca cuyo departamento de Química Física ha dirigido y donde actualmente lidera un grupo de investigación sobre reactividad de moléculas bioactivas. El Dr. Casado es autor de más de 150 publicaciones sobre la fisicoquímica de los nitrosocompuestos y sobre mecanismos de alquilación. Ha sido investigador principal de numerosos proyectos de investigación de ámbito europeo, nacional y autonómico, habiendo dirigido 33 tesis doctorales. En 1991 recibió la Medalla de Investigación de la RSEQ y el Premio Aldrich de Investigación Química. En 2008 recibió el Premio María de Maeztu a la Excelencia Científica.

Junto a su labor investigadora el Dr. Casado ha desarrollado una intensa actividad sobre la docencia de la química;



Profesor Julio Casado

dirigiendo el Instituto de Ciencias de la Educación, publicando numerosos artículos en revistas especializadas y dictando conferencias en diversos países. Ha sido representante de España en la *Division of Chemical Education* de la Federación Europea de Sociedades Químicas y Presidente del Grupo de Didáctica e Historia de la Física y la Química de las Reales Sociedades de Física y de Química del que actualmente es Presidente Honorífico.

Remitido por: **Manuel Martín Sánchez**,  
Universidad de Salamanca  
GE de Didáctica e Historia de la Física y la Química

## Actividades de Institutos de Enseñanza Secundaria

### V Encuentro de Ciencias Bezmiliana

Vemos necesario que la Ciencia tenga un papel más atractivo, más práctico y con ello, más motivador para nuestros alumnos en su proceso de aprendizaje. Los alumnos se ilusionan y trabajan cuando se les plantea una curiosidad científica que conlleva un estudio, una experimentación y la transmisión de unos resultados. El número de alumnos que forman parte del Club Científico y que participan en Encuentros, Congresos y Ferias de Ciencias realizando presentaciones, ha aumentado en cada curso. La organización de un Encuentro de Ciencias es uno de los retos de este Club Científico Bezmiliana.

No es frecuente encontrar un grupo de profesores dispuestos a trabajar de manera voluntaria para la organización de un Encuentro de Ciencias. Sin embargo en nuestro instituto, IES Bezmiliana, del Rincón del Victoria, Málaga, contamos con un grupo de 10 profesores dispuestos a ello. Aprovechando nuestra ilusión para dar a las Ciencias una visión más atractiva, más experimental y por ello, más motivadora para los alumnos y también para los profesores. Este año organizamos ya el *V Encuentro de Ciencias Bezmiliana*, que se celebrará los días 25 y 26 de abril del 2013 en nuestro centro.

En este V Encuentro está prevista la participación de 20 centros de enseñanza, donde los alumnos, supervisados por sus profesores, explicarán a todo el que se acerque, la investigación que han desarrollado, la reproducirán y explicarán su fundamento científico. Durante estos días, los alumnos se transforman en los monitores encargados de difundir sus experiencias y disfrutar contando lo que han trabajado. Además, de forma paralela se realizarán talleres de: paleoantropología (impartido por Cecilio Barroso Ruíz, prehistoriador y antiguo profesor del IES Bezmiliana), experimentos de biología (impartido por la Unidad de Cultura Científica de la Estación Experimental del Zaidín-CSIC, Granada), estación meteorológica (con el apoyo de la Agencia Estatal de Meteorología de Málaga), plantas modificadas genéticamente (impartido por el IHSM La Mayora CSIC-UMA, Algarrobo-Costa, Málaga), mariposas (impartido por el Mariposario de Benalmádena), ecología (impartido por el Departamento de Ecología de la UMA) y botánica (impartido por el Jardín Botánico-Histórico La Concepción, Málaga). También habrá exposiciones sobre los inventos de



Leonardo da Vinci y sobre trabajos realizados por el Club Científico Bezmiliana. Y están previstas las siguientes conferencias: “*Ciencia global*” (impartida por Sebastián Cardenete García, director del Centro Principia), “*La Química de la alimentación y la bebida*” (impartida por Bernardo Herradón García, investigador del CSIC), “*¿De dónde vienen las olas?*” (impartida por Juan José Alonso Pereda, profesor de la UMA) y “*La evolución del universo*” (impartida por Carlos Criado Cambón, profesor de la UMA).

Remitido por: **Profesores del Club Científico Bezmiliana** del IES Bezmiliana del Rincón de la Victoria, Málaga.

## In Memoriam



Evaristo Riande García

El pasado 15 de noviembre de 2012 falleció en México **Evaristo Riande García**, profesor de investigación del CSIC *ad honorem*, tras sufrir un ictus que le mantuvo en coma durante 40 días. Se encontraba en la Universidad Nacional Autónoma de México D.F. como Profesor Invitado.

El Profesor Riande inició su carrera científica en el Departamento de Plásticos del Patronato Juan de la Cierva (hoy ICTP-CSIC) en 1963, realizando investigaciones en su Tesis Doctoral sobre nuevos polielectrolitos iónicos basados en alil-celulosa. Investigador Científico del CSIC. Durante dos años fue *Visiting Fellow* en el Mellon Institute, en Pittsburg (EE.UU), donde estudió el comportamiento viscoelástico de macromoléculas en disolución y, a su vuelta a España, inició estudios teóricos y experimentales sobre la influencia de los disolventes y de la temperatura en la cinética de cristalización de poliolefinas, continuando con el análisis conformacional de macromoléculas. En el año 1984, ya como Profesor de Investigación del CSIC, sus investigaciones se extendieron al estudio de la dinámica de líquidos asociada con el desarrollo de la transición vítrea. A mediados de los noventa, el Prof. Riande inició estudios teóricos y experimen-

tales relacionados con el transporte de gases en membranas poliméricas. Recientemente había iniciado una nueva línea de investigación encaminada al desarrollo y estudio electroquímico de membranas de cambio iónico con uso potencial en baterías y pilas de combustible. Según él mismo comentaba, “con esta línea de investigación volvía a sus orígenes, el estudio del transporte en membranas de cambio iónico”, en lo que parecía ser el cierre del círculo de su labor investigadora.

Al Prof. Riande siempre le movió la búsqueda del máximo nivel científico en todas las líneas de investigación que abordó, como queda reflejado en los más de 350 artículos publicados en las revistas del más alto impacto, varios libros, numerosos trabajos de divulgación, y organización de diversos congresos, tanto nacionales como internacionales.

El conjunto de la carrera investigadora de Evaristo Riande pone de manifiesto algunas características fundamentales de un investigador que consideramos modelo: amor por el trabajo, desarrollo de líneas de investigación acordes con los medios existentes, cambio de proyecto cuando se presentan dificultades insalvables, derivación hacia nuevas investigaciones de gran relevancia científica y de interés práctico en diferentes aplicaciones, colaboración con grupos muy diversos de su mismo Instituto y de muchas Universidades españolas y extranjeras.

Los muchos doctorandos, discípulos, coautores de libros y de trabajos, todos amigos suyos, hemos aprendido mucho con el estudio de los trabajos de investigación y con las enseñanzas, consejos y ejemplo de Evaristo Riande. Deja un hondo recuerdo en todos nosotros por su bonhomía, su carácter afable y su encantadora forma de ser, poco común en un hombre tan inteligente y capaz. Nunca podremos olvidarlo y nos unimos al dolor de su viuda Pilar y de sus hijos Luis y Jorge.

Remitido por: **Antonio Bello, Julio Guzmán, M<sup>a</sup> Mar López y José M. Pereña**

## Sesión en memoria de Evaristo Riande

El pasado día 11 de Marzo se desarrolló una entrañable y cariñosa sesión en memoria del Prof. Evaristo Riande con motivo de su fallecimiento el día 15 de Noviembre de 2012. El Grupo de Polímeros de la Real Sociedad Española de Química y Real Sociedad Española de Física ha apoyado la organización de ese merecido acto, que consistió en unas breves pero acertadas exposiciones por parte de sus más allegados colaboradores de los últimos años desde su compañero de carrera en Santiago, Antonio Bello hasta su más reciente colaboradora María del Mar López, sus primeros becarios José Manuel Pereña y Miguel Domínguez Reboiras, y sus colaboradores habituales Julio Guzmán, Vicente Compañ, Pilar Tiemblo, Leoncio Garrido y Cati Salom como representante de las tres “chicas de Aeronáuticos”. Antxon Santamaría como presidente del Grupo de Reología y uno de los promotores del acto, intervino de forma destacada resaltando la figura de Evaristo como una de las referencias más sobresalientes en el mundo de la Reología, y su gran influencia en varias generaciones de excelentes investigadores que se han forjado en los últimos decenios en España, con reconocida proyección internacional.

Al acto acudieron más de un centenar de amigos y colaboradores así como su familia, poniéndose de manifiesto la profunda huella y proyección que su actividad, su personalidad y sus excelentes cualidades humanas ha dejado en toda la familia dedicada al estudio y desarrollo de polímeros no solo en España sino en todo el mundo académico internacional. El acto estuvo también respaldado por la dirección del Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros y por la propia Presidencia del CSIC, así como por ilustres investigadores de ámbito internacional como Roberto Williams, Enrique Valles, y otros muchos que por brevedad no mencionamos. Sin duda la figura de Evaristo Riande permanecerá muy viva en la memoria de todos los que hemos compartido con él tiempo dedicado al desarrollo de Ciencia y conocimientos en el campo de Polímeros, así como vivencias de un enorme y significado contenido humano. Gracias Evaristo porque has supuesto un ejemplo de esfuerzo, trabajo, dedicación y honestidad que trataremos de reflejar en nuestras actividades y relaciones.

Remitido por: **Julio San Román, ICTP-CSIC.**

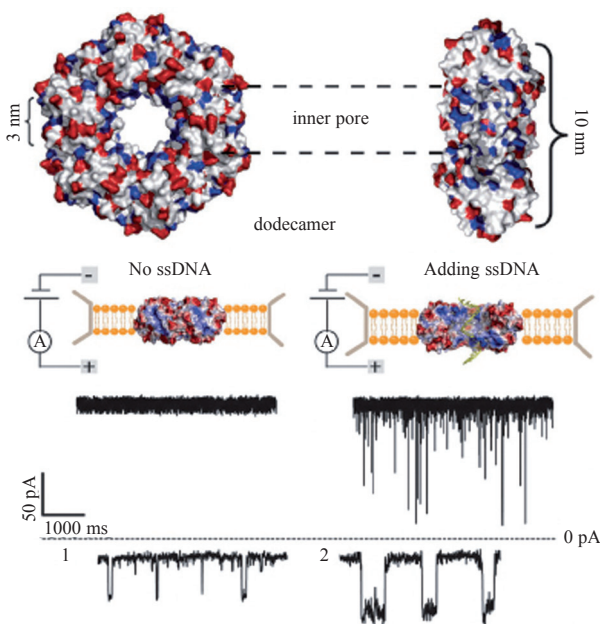
## Avanzando en la secuenciación rápida de la molécula de la vida

Una o varias moléculas de ácido desoxirribonucleico (ADN) constituyen el genoma de casi todos los organismos; el cual contiene la información necesaria para la reproducción, desarrollo y funcionamiento de dicho organismo. Como es bien sabido, el ADN es una estructura macromolecular constituida por unidades de nucleótidos unidos a través de enlaces fosfodiéster. Un nucleótido consta de tres fragmentos diferenciados: un carbohidrato, un resto fosfatado y una base nitrogenada (derivada de purina o de pirimidina). La información contenida en el ADN está codificada en la secuencia de bases nitrogenadas que forman la hebra de ADN. La secuenciación del ADN consiste en un conjunto de métodos y técnicas que nos permiten determinar el orden exacto de los nucleótidos (adenina, A; citosina, C; guanina, G; y timina, T) presentes en una hebra de ADN. Conocer la información contenida en la molécula de ADN tiene implicaciones en áreas tan diversas como las ciencias forenses, la antropología y, especialmente, en medicina. En los últimos años se han desarrollado métodos para secuenciar ADN que, tras la correspondiente automatización, han permitido la secuenciación del genoma de diversos organismos, incluyendo el ser humano (*Nature* **2001**, 409, 860–921; *Science* **2001**, 291, 1304–1351). La mayoría de las técnicas de secuenciación de ADN disponibles en la actualidad requieren la amplificación y modificación química de la hebra de ADN a secuenciar para poder llevar a cabo una lectura de las bases de las que está compuesta.

La secuenciación basada en el empleo de nanoporos es una alternativa muy prometedora que, en principio, permite abordar el análisis de una única molécula de ADN (de hebra sencilla) sin realizar ninguna modificación previa. Esto debe permitir acortar los tiempos de secuenciación, así como abaratar los precios del proceso. El principio en el que se basa esta técnica es el siguiente: una molécula cargada (como por ejemplo una cadena de ADN) se coloca en una celda conteniendo un electrolito y dividida por una membrana con una apertura de tamaño nanométrico (el nanoporo). Al aplicar un potencial eléctrico, la molécula de ADN comienza a atravesar el poro por electroforesis, observándose una variación de la intensidad de la corriente eléctrica. Cada vez que una base de la hebra entra en el nanoporo, bloquea parcialmente el flujo de iones a través del poro, lo que produce una variación medible de la corriente. Además, esta variación es diferente para cada una de las cuatro bases.

Investigadores de las universidades de Shanghai y Jerusalén, han descrito recientemente (*Chem. Commun.* **2013**, 49, 1741–1743) el empleo de la proteína SP1 como un nuevo miembro del limitado grupo de nanoporos biológicos que se emplean en la actualidad. Hasta el momento se habían descrito únicamente dos proteínas, la  $\alpha$ -HL y la MspA, capaces de formar nanoporos en una membrana con el tamaño adecuado para permitir el paso de ADN por su interior. La proteína SP1 es capaz de autoasociarse, dando lugar a un dodecamero con estructura de nanoporo. Una de las características más significativas de esta proteína es que el poro que contiene en su interior es, a diferencia que en  $\alpha$ -HL y la MspA, totalmente simétrico.

Los investigadores emplean cadenas de polinucleótidos de diferentes longitudes, observándose en todos los casos una



variación en la corriente eléctrica en el nanoporo cuando estas cadenas son añadidas al electrolito. Aunque las aplicaciones de esta proteína en el campo de la secuenciación de ADN mediante nanoporos son prometedoras, aún quedan importantes problemas que solventar, como por ejemplo la alta velocidad de traslocación de la hebra de ADN a través del poro así como la baja calidad de la señal obtenida.

## Canales de potasio por manipulación lumínica y térmica de estructuras supramoleculares

El autoensamblaje controlado mediante estímulos de estructuras supramoleculares organizadas es un área de investigación con potenciales aplicaciones en la preparación de nuevos dispositivos y materiales “inteligentes”. En un artículo reciente del grupo del profesor Lehn de la Universidad de Estrasburgo (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, 52, 3940–3943), se describe la preparación de estructuras supramoleculares generadas a partir de moléculas formadas mediante enlaces covalentes reversibles. Además, se observa que las estructuras obtenidas son sensibles a estímulos como luz o calor, lo que añade un carácter dinámico a los materiales preparados. Los autores se basan en resultados previos de su grupo que indican que una familia de compuestos, como las acil hidrazonas, son capaces de complejar diferentes cationes. Además, este tipo de moléculas presentan un par de características muy interesantes. Por un lado, son capaces de sufrir una fotoisomerización interna cuando son irradiadas con una luz adecuada. Por otro lado, la naturaleza reversible del enlace imínico presente en su estructura hace que estos compuestos sean constitucionalmente dinámicos, permitiendo la incorporación o intercambio de los fragmentos que las forman.

Cuando a una disolución de esta acil hidrazona en acetonitrilo se le añade tiocianato potásico, se observa la formación de estructuras supramoleculares con forma de fibras. Mediante estudios por difracción de rayos X, los autores observan que la



estructura de estos agregados se debe al apilamiento de complejos de las acil hidrazonas con el catión potasio. De esta manera, las supraestructuras resultantes forman largos canales de iones potasio. Por otro lado, cuando estas estructuras se irradian con luz ultravioleta, se observa la desaparición de los agregados acompañada de la liberación de cationes potasio. También se observa un comportamiento similar cuando estos agregados se calientan, lo que lleva a su completa desaparición. Sin embargo, el proceso es reversible, ya que simplemente enfriando la disolución se consigue de nuevo la formación de las nanofibras.

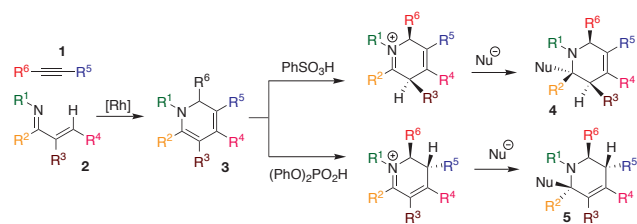
### Síntesis eficaces de heterociclos nitrogenados

La selectividad (quimio-, regio-, estereo-) en reacciones en cascada es uno de los principales objetivos en metodología sintética; cuya consecución está relacionada con la eficiencia sintética. Los procesos divergentes en los que se obtienen diferentes productos a partir de un mismo sustrato, usando diferentes condiciones de reacción, es una ventaja adicional. En un artículo reciente (*Science*, **2013**, 339, 678–682), investigadores de las universidades de Yale y Berkeley han descrito una metodología que permite la preparación de una amplia variedad de derivados de piperidina altamente sustituidos a partir de un mismo material de partida. Además, el proceso transcurre con regioselectividad y estereoselectividad totales.

Las piperidinas son heterociclos de seis miembros, total o parcialmente saturados, con un átomo de nitrógeno en su estructura. Estos anillos se encuentran presentes en numerosos productos naturales y fármacos con interesantes aplicaciones terapéuticas. Compuestos como la quinina, la morfina o el tadalafil (Cialis®), son ejemplos de moléculas con actividad biológica y que presentan un anillo de piperidina en su estructura. El desarrollo de metodologías que permiten la preparación eficiente de derivados de piperidina es un área de intensa actividad dentro de la síntesis orgánica.

Para conseguir los objetivos, los autores, en primer lugar, emplean una reacción en cascada catalizada por complejos de rodio que permite obtener 1,2-dihidropiridinas (**3**) a partir de un alquino (**1**) y una imina  $\alpha,\beta$ -insaturada (**2**). Estos intermedios (**3**) son relativamente inestables, pero se pueden transformar en productos más elaborados simplemente mediante tratamiento con un ácido y posterior reacción con un nucleófilo. Las tetrahidropiridinas altamente funcionalizadas obtenidas mediante este método, son intermedios muy valiosos para la preparación de moléculas con potenciales aplicaciones terapéuticas.

La principal aportación de esta nueva metodología, consiste en que los autores son capaces de controlar la regio y estereoselectividad de la reacción, simplemente modulando la naturaleza del ácido empleado. Así, cuando se emplean ácidos fuertes del

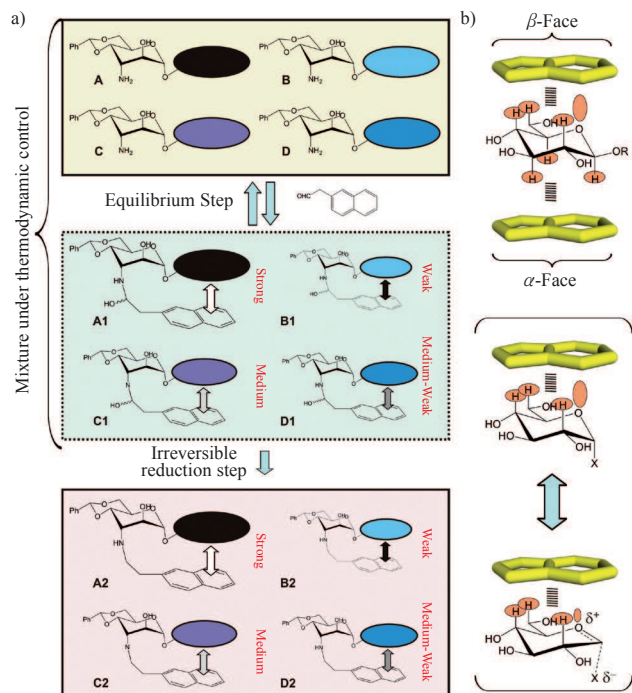


tipo arilsulfónico, la reacción transcurre bajo control cinético, dando lugar a tetrahidropiperidinas del tipo **4** (ver Figura). Por otro lado, cuando los autores emplean un ácido más débil, como el ácido difenilfosfórico, y tiempos de reacción más largos, se observa que el proceso transcurre con control termodinámico, permitiendo la obtención (después del ataque del correspondiente nucleófilo) de tetrahidropiperidinas del tipo **5**. Las reacciones transcurren con elevados rendimientos y selectividades. Además, en la mayoría de los casos la transformación se puede llevar a cabo en una única etapa (*one pot*), lo que facilita enormemente las tareas de purificación y aislamiento de los productos deseados. Finalmente, los autores demuestran que se pueden emplear como nucleófilos una gran variedad de reactivos organometálicos de distinta naturaleza, lo que permite acceder a una elevada diversidad molecular de una manera directa y sencilla.

### Analizando las interacciones areno-carbohidrato

La interacción de carbohidratos con biomacromoléculas (proteínas y ácidos nucleicos) juega un papel fundamental en numerosos procesos biológicos tales como la adhesión celular, la infección o la respuesta inmune, y se encuentran en el origen de la actividad de diversos antibióticos. El estudio de estos fenómenos es un área de creciente interés en química biológica y biomedicina; cuyo progreso permitirá avances considerables en la comprensión de procesos biológicos y en el diseño de fármacos eficaces para una variedad de enfermedades.

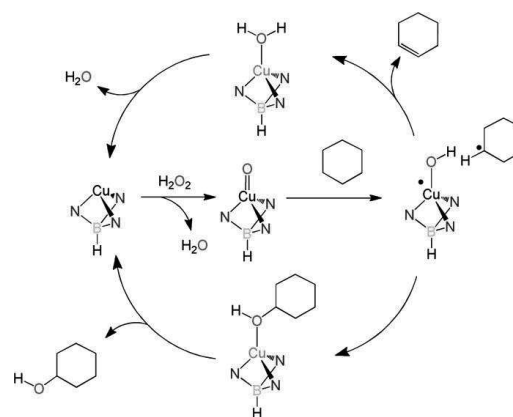
Es, por lo tanto, comprensible el tremendo interés que el estudio de las fuerzas que estabilizan los complejos carbohidrato/receptor ha suscitado entre los químicos orgánicos durante los últimos 20 años. La actividad investigadora en este campo ha subrayado el papel determinante que, a menudo, desempeñan las interacciones de apilamiento carbohidrato/aromático. Desafortunadamente, y a pesar los esfuerzos destinados a tal efecto, todavía no se comprenden en detalle las sutiles relaciones estructura/estabilidad que rigen la formación de dichos complejos. Con objeto de profundizar en el estudio de los mismos, investigadores del CSIC (IQOG, IQFR y CIB), de la Universidad de La Rioja y de la Universidad de California, liderados por Juan Luis Asensio, han desarrollado una estrategia general inspirada en conceptos de química combinatoria dinámica (*J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 3347–3350). Esta aproximación (representada esquemáticamente en la Figura) se basa en el diseño y síntesis de una librería de disacáridos, cuyo rasgo común es la presencia, en posición no reductora, de una unidad de altrosamina conformacionalmente restringida. El tratamiento de la librería con aldehídos aromáticos lleva a una mezcla de iminas/hemiaminales estabilizadas por apilamiento del anillo aromático con la unidad de piranosa situada en la posición reductora (representada por una elipse coloreada en la Figura). Dado que dichas especies se encuentran en equilibrio termodinámico, sus poblaciones relativas dependen exclusivamente de la mag-



nitudo de dicha interacción. En estas condiciones, la congelación del equilibrio por reducción con hidruro lleva a una mezcla estable de aminas secundarias, cuyas proporciones (fácilmente cuantificables mediante RMN u otros métodos) proporcionan una medida directa de las estabilidades relativas de los diferentes complejos. Como prueba de principio, esta estrategia ha sido empleada para analizar los diferentes factores que condicionan la preferencia de un anillo de naftilo por la cara  $\alpha$  o  $\beta$  de diversas unidades de piranosa (*selectividad facial*). De acuerdo con los resultados obtenidos, la aproximación combinatoria desarrollada destaca por su versatilidad y tremenda sensibilidad, revelando diferencias de estabilidad entre complejos difícilmente detectables por otros medios (0,1 kcal/mol).

### Diseño de catalizadores para la oxidación de alcanos

Una de las reacciones más perseguidas y difíciles de alcanzar en química es la oxidación controlada de alcanos. En hidrocarburos saturados, la sustitución de un enlace C—H por un enlace C—O es una reacción de funcionalización directa que convierte a una molécula inerte en otra reactiva, y permite comenzar una secuencia sintética a conveniencia. Por simplicidad y economía, es deseable que los oxidantes sean moléculas sencillas, como oxígeno o peróxido de hidrógeno, oxidantes baratos y que no dejan residuos indeseables. La inercia cinética del oxígeno para actuar como oxidante es de sobra conocida, así como lo incontrolable de las reacciones de oxidación cuando la activación se produce por vía térmica. Con el peróxido de hidrógeno la situación no es muy diferente; aunque su activación es más fácil, la reacción se inicia a menudo por vías radicalicas, dando lugar a reacciones poco selectivas y en las que es difícil detener la reacción en el producto mono-oxidado. Frente a este desalentador panorama se alza la ubicua utilización del oxígeno como oxidante por los seres vivos, mediante reacciones extremadamente selectivas que transcurren con la formación de superoxo y peroxoderivados en condiciones muy suaves, y que son cataliza-



das por metaloenzimas. La idea, inspirada en la naturaleza, se ha usado en los laboratorios, empleando complejos metálicos como catalizadores en reacciones de oxidación permitiendo avanzar en la comprensión de sistemas biológicos complejos y desarrollar reacciones de enorme importancia sintética e industrial.

El uso de metales para catalizar reacciones de oxidación de compuestos funcionalizados tiene ya una larga historia (la epoxidación de Sharpless o la reacción de Wacker son ejemplos clásicos) pero la oxidación de hidrocarburos no funcionalizados sigue siendo un reto inalcanzado. Una de las dificultades reside en que los propios ligandos con que se forman los complejos metálicos deben ser resistentes a la oxidación, al menos cinéticamente, mientras que el metal debe ser capaz de sufrir reacciones tanto de oxidación como de reducción con facilidad, de tal forma que pueda cerrar un ciclo catalítico. En los últimos años se han descrito distintos sistemas en los que se produce la activación controlada de oxígeno o de peróxido de hidrógeno (*Acc. Chem. Res.* **2012**, *45*, 947–958) y otros que son capaces de producir la activación de enlaces C—H.

En un reciente artículo (*J. Am. Chem. Soc.* en prensa, doi.org/10.1021/ja310866k), una colaboración de las Universidades de Huelva, Autónoma de Barcelona y Oslo, se describe el uso de complejos de cobre con ligandos pirazolilborato como catalizadores de la oxidación de alcanos, cicloalcanos y compuestos aromáticos con  $H_2O_2$ . El sistema produce, además de alcoholes y cetonas, pequeñas cantidades del producto de deshidrogenación de alcanos y cicloalcanos, lo que es inusual en este tipo de reacciones. Los autores han realizado distintos experimentos que permiten obtener algunas evidencias acerca del mecanismo de la reacción. Por una parte, han logrado excluir la participación del mecanismo más común en reacciones de  $H_2O_2$  con metales: su ruptura para dar radicales  $HO\cdot$  que actúan como oxidantes (Reacción de Fenton). Por otro lado, han logrado capturar radicales alquilo que se forman durante la reacción. Todas estas evidencias experimentales se han tenido en cuenta para calcular computacionalmente un posible camino de reacción, que se muestra en la Figura; en el que hay que destacar que el cobre cambia entre los estados de oxidación Cu(I) y Cu(III); excluyéndose la participación de otros intermedios de cobre(II), como complejos de tipo superoxo o hidroperoxo.

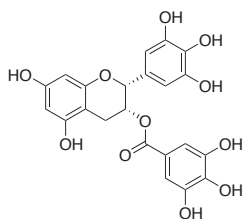
Los resultados permiten comprender las características que han de cumplir los complejos y de ligandos que forman parte de catalizadores para reacciones de oxidación, y proporciona, con fundamento experimental, hipótesis que permiten entender el funcionamiento de metaloenzimas.

## Contribuyendo a combatir la enfermedad de Alzheimer

El péptido  $\beta$ -amiloide ( $A\beta$ ) es el principal componente de los agregados proteínicos de las placas seniles observadas en los pacientes con la enfermedad de Alzheimer. Este péptido se produce de forma endógena a partir de la degradación enzimática de la proteína precursora amiloide (APP) y puede oligomerizar (cuando no se encuentra plegado de la forma adecuada), dando lugar a una red irregular de agregados fibrilares denominadas fibras amiloides, con una estructura de lámina  $\beta$  característica. Por otro lado, hay evidencias de que algunos iones de metales de transición como el Cu y el Zn son capaces de interactuar directamente con el péptido  $A\beta$ , dando lugar a especies asociadas del tipo metal- $A\beta$ . Aunque el papel que juegan estas estructuras metal- $A\beta$  en el desarrollo de la enfermedad de Alzheimer no ha sido todavía totalmente dilucidado, se cree que pueden estar implicadas en procesos de agregación y generación de especies oxigenadas reactivas neurotóxicas.

Investigadores de la Universidad de Michigan han descrito recientemente (*PNAS* **2013**, *110*, 3743–3748) que el galato de (-)-epigallocatequina (EGCG) es capaz de prevenir la formación de agregados de fibras amiloides a partir de especies del tipo metal- $A\beta$ . El EGCG es un flavonoide natural presente en altas concentraciones en extractos de té verde y que presenta interesantes actividades antioxidantes y antiinflamatorias. Los autores, mediante experimentos de RMN bidimensional, espectrometría de masas y métodos computacionales, son capaces de racionalizar el mecanismo de acción del EGCG a nivel molecular para poder explicar su actividad anti-amiloidogénica. Para ello, proponen la formación de un complejo ternario donde el EGCG es capaz de complejar el ión metálico ( $Zn^{2+}$  o  $Cu^{2+}$ ) presente en el péptido  $\beta$ -amiloide y a la vez influir en la estructura de dicho péptido, dando lugar a conformaciones más compactas que impiden parcialmente el proceso de agregación.

La información obtenida mediante el estudio de este tipo de relaciones estructura-interacción-reactividad, va a ser muy útil, tanto en el diseño racional como en otras estrategias basadas en relaciones estructura-actividad, dirigidas a identificar herramientas químicas que ayuden a elucidar la contribución de los múltiples factores implicados en la patogénesis de la enfermedad de Alzheimer.



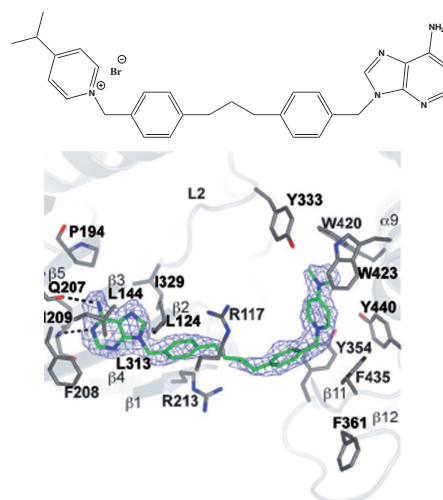
galato de (-)-epigallocatequina (EGCG)

## Mecanismo molecular de la cooperatividad alostérica negativa

El alosterismo es un proceso crucial en biología. El primer modelo descrito por Monod, Wyman y Changeux (modelo MWC) explicaba las propiedades cooperativas de enzimas oligoméricas y, aunque es un modelo antiguo, todavía es válido. La conservación de la simetría entre las subunidades

proteicas que forman el oligómero es una de las premisas de este modelo y muchos casos de cooperatividad positiva están de acuerdo con este principio de conservación de la simetría. A diferencia de la cooperatividad positiva, la *cooperatividad negativa* es menos frecuente y en muy pocos casos se ha dado una explicación de este tipo de fenómeno a nivel de cambios estructurales en las proteínas.

En un artículo en prensa en *Angew. Chem. Int. Ed.* (DOI: 10.1002/anie.201209660), investigadores de la Unidad Asociada del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI)-Universidad de Zaragoza-Instituto de Química Física Rocasolano (IQFR-CSIC), la Universidad de Granada, el CNIO y el *University College London*, liderados por Ramón Hurtado-Guerrero, caracterizan experimental y computacionalmente el modo de unión de un compuesto diseñado racionalmente (ver Figura) que se asocia con gran afinidad a la forma dimerica de colina quinasa  $\alpha 1$  (CHOK $\alpha 1$ ). La estructura cristalina de CHOK $\alpha 1$  en complejo con este compuesto revela que la simetría expuesta en el modelo MWC no es respetada (en la Figura se muestra el sitio activo de la enzima complejada con la molécula sintética). Básicamente los dos monómeros asumen conformaciones completamente diferentes, uno abierta y el otro cerrada. Sin embargo, cuando se lleva a cabo simulaciones de dinámica molecular, se observa que, en promedio, la simetría del modelo original MWC se conserva, debido al carácter dinámico de los dos monómeros que alternativamente asumen dos conformaciones diferentes. También mediante otros estudios computacionales, los autores proponen que los monómeros están conectados a través del *network*  $\alpha 2\beta 4\beta 5-\alpha 7-\alpha 9-L3$  presente en cada monómero y que, a su vez, es responsable de la regulación alostérica de CHOK $\alpha 1$ . Estos resultados, por lo tanto, explican el mecanismo molecular de la cooperatividad negativa, cómo los monómeros que forman el dímero están conectados y cómo la hipótesis del modelo MWC puede ser válida, incluso cuando esto no es aparente en la estructura cristalográfica estática.



Noticias redactadas por:

Juan A. Casares (Universidad de Valladolid),  
 Enrique Mann (IQOG-CSIC),  
 Sonsoles Martín-Santamaría (Universidad CEU San Pablo),  
 y Bernardo Herradón (IQOG-CSIC).



## Normas de publicación de la revista *Anales de Química de la RSEQ*

### Definición de la revista

La revista *Anales de Química* de la Real Sociedad Española de Química (incluida en LATINDEX, ICYT y DIALNET) publica trabajos científicos originales, especializados o de revisión, de divulgación en el campo de la química que sean de calidad, actualidad e interés para la mayoría de los profesionales de la docencia, investigación y de la industria química. Los trabajos científicos divulgativos en cualquiera de los campos de investigación de la Química serán bienvenidos, así como los trabajos sobre historia y enseñanza de nuestra disciplina, tanto teórica como práctica, en cualquiera de sus niveles educativos.

### Ética Profesional

Los autores, censores y editor de artículos en *Anales de Química* están sujetos a las guías éticas de publicación en revistas de la Asociación Europea para Ciencias Químicas y Moleculares (EuChemS) que se encuentran en: [www.euchems.org/Publications/index.asp](http://www.euchems.org/Publications/index.asp). Se recuerda a los autores que deben informar al editor sobre sus artículos de similar contenido al enviado que se encuentren en proceso de revisión o en prensa. El empleo de parte de otro artículo, sin referencia expresa, constituye un plagio; la reproducción total o parcial de trabajos previamente publicados por el propio autor, sin mención expresa de la fuente original, constituye un auto-plagio.

### Instrucciones a los autores

Se pueden descargar en <http://bit.ly/ZpJllk>.

La revista *Anales de Química* se edita trimestralmente. Los artículos se publican en español y, se recomienda, que tengan una extensión máxima de 8 páginas en la edición impresa de la revista. Las contribuciones a *Anales de Química* deben ser remitidas empleando el servicio de envío telemático disponible a través de la página web de nuestra sociedad (<http://www.rseq.org/anales/envio-de-manuscritos>). Tras la recepción del artículo, los editores enviarán el manuscrito a dos evaluadores externos a la revista, cuyas observaciones se trasladarán al autor así como las decisiones tomadas sobre la publicación del artículo.

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

Para la preparación de los manuscritos se recomienda el empleo de la plantilla de MSWord disponible en la web (<http://www.rseq.org/anales/envio-de-manuscritos>), donde también se encuentra a disposición de los autores un artículo que puede ser empleado como modelo para la preparación de los manuscritos.

En el proceso de envío telemático de los manuscritos es conveniente adjuntar una carta al editor (en formato doc, rtf o pdf) en la que se incluya la información de contacto del autor principal y el tipo de contribución a *Anales* (Investigación Química, Química y Medio Ambiente, Historia de la Química,

Enseñanza de la Química, Divulgación de la Química, Química y Sociedad, Política Científica). Adicionalmente, se pueden sugerir los nombres de cuatro evaluadores competentes en la materia. Es responsabilidad del autor principal el informar al resto de los autores del estado de recepción, revisión o publicación del manuscrito. El autor principal de un artículo recibirá tres copias de la edición impresa del número de la revista donde aparece su artículo y la versión electrónica final del mismo en formato pdf. Se recomienda encarecidamente a los autores que envíen propuestas atractivas para la portada de la revista (con una calidad mínima de 600 dpi y formato original o EPS).

Tras el proceso de revisión, se requerirá a los autores que remitan la versión definitiva del texto, tablas y leyendas de esquemas y figuras en formato doc o rtf para la confección final del artículo. Las figuras, tablas, esquemas, gráficos y fotografía/s del/de los autor/es deberán remitirse en el formato original, de forma que permita su manipulación en caso de que sean necesarias modificaciones para mejorar su presentación, y cada una como un archivo independiente dentro de una carpeta tipo zip. El empleo del servicio telemático agiliza considerablemente el proceso de publicación en *Anales de Química*, pero si por algún motivo no se pudiera utilizar, los manuscritos también pueden enviarse vía correo electrónico ([patricia.yanez@quim.ucm.es](mailto:patricia.yanez@quim.ucm.es)) o a la dirección postal de la Real Sociedad Española de Química.

La revista *Anales de Química* se publica trimestralmente en formato papel y en la web de la RSEQ (<http://www.rseq.org/>). Con el envío de manuscritos, los autores ceden los derechos de publicación por estas vías a la RSEQ.

### Preparación del manuscrito

Se recomienda la preparación de manuscritos empleando la correspondiente plantilla. Los manuscritos deben respetar las siguientes secciones: título, filiación de los autores, fotografía de los autores, resumen (español e inglés), palabras clave (español e inglés), introducción, exposición del trabajo, conclusiones, agradecimientos y bibliografía.

**Primera Página.** En esta página debe aparecer el título del manuscrito, los nombres de los autores, sus fotografías, filiación, dirección postal completa, y dirección de correo electrónico del autor principal o de contacto, que se puede identificar mediante un asterisco. También se incluirán en esta primera página cinco palabras clave y un resumen de un máximo de 100 palabras, ambos en español e inglés.

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

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

# Normas de Publicación

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

**Bibliografía.** En el texto, los números deben aparecer como superíndices (por ejemplo, Wittig<sup>1</sup>) y si procede, después de las marcas de puntuación (por ejemplo, Gándara.<sup>2</sup>). Los nombres de las revistas deben abreviarse de acuerdo al Chemical Abstracts Service Source Index (CASSI) [en caso de duda, consúltese la página web <http://bit.ly/wdAXn> y seguir el estilo general de las revistas patrocinadas por la Real Sociedad Española de Química. Las referencias en y a la revista *Anales de Química* se escriben como se muestra en los siguientes ejemplos:

## Artículos de revistas

1. a) B. M. Trost, *Chem. Eur. J.* **1998**, *4*, 2405–2412.  
b) S. Grimme, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2006**, *45*, 4460–4464.
2. F. Gándara, *Anales Quím.* **2012**, *108*, 190–196.

## Libros

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

Para aspectos más específicos relacionados con la presentación de parámetros físicos o ecuaciones, nomenclatura, análisis de estructuras cristalinas, o cálculos teóricos, se recomienda a los autores seguir las normas generales de publicación de la revista *Chemistry—A European Journal* (<http://tinyurl.com/2w9t8n>).



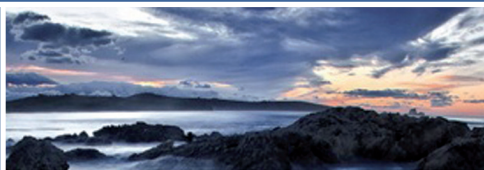
# NO OLVIDES VISITAR NUESTRA WEB

## [www.rseq.org](http://www.rseq.org)



# B2 Q0 S1 3

Bienal  
Química  
Santander



"Química para un futuro común"



Playa de Liencres (Cantabria)

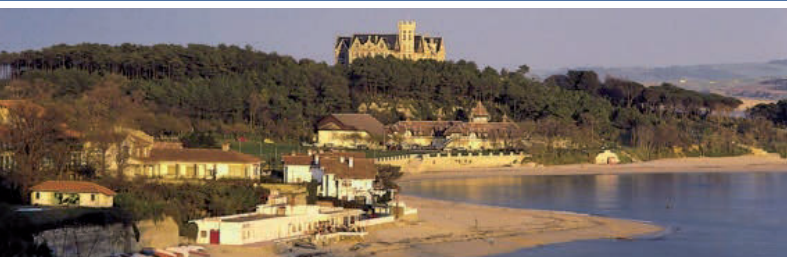
# XXXIV

## REUNIÓN BIENAL

## Real Sociedad Española de Química

Santander 15-18 septiembre 2013

Web: [rseq2013.unican.es](http://rseq2013.unican.es)



### SIMPOSIA

Adsorción y Catálisis Heterogénea (ADS)  
Educación, Historia y Divulgación de la Ciencia (EHD)  
Estructura y Reactividad: de la Teoría al Experimento (ESTR)  
Ingeniería Química (IQ)  
Medio Ambiente y Energía (MAMB)  
Nanociencia y Nanotecnología (NANO)  
Química Analítica, Aplicaciones en Alimentos y Química Agrícola, Sensores (QA)  
Química en la Frontera con la Biología (QBIO)  
Química Inorgánica, Química de Estado Sólido y Cristalografía (INOR)  
Química Organometálica y Catálisis Homogénea (ORGM)  
Síntesis (SIN)

### EVENTOS SATÉLITE

Institutos de Investigación  
Centros Tecnológicos  
Servicios Científico-Técnicos/Grandes Instalaciones/Instrumentación  
Innovación y Empleo para Jóvenes Investigadores

### CALENDARIO

Diciembre 2012: apertura de registro  
1 abril 2013: fin reserva de alojamiento económico  
15 abril 2013: fin envío de resúmenes  
30 abril 2013: comunicación aceptación de resúmenes  
15 mayo 2013: fin inscripción temprana

### CONFERENCIAS PLENARIAS

**Prof. Dr. Richard Darton**  
Presidente de la European Federation of Chemical Engineering (EFCE)  
University of Oxford, Reino Unido

**Prof. Dr. Alois Fürstner**  
Max-Planck-Institut, Alemania

**Prof. Dr. Robert H. Grubbs**  
PREMIO NOBEL QUÍMICA 2005  
California Institute of Technology (Caltech), EEUU

**Prof. Dr. Kazuyuki Tatsumi**  
PRESIDENTE IUPAC  
Research Center for Materials Science, Nagoya University, Japón

**Prof. Dr. Nazario Martín León**  
Universidad Complutense de Madrid, España

**Prof.ª Dr.ª María Vallet-Regí**  
Universidad Complutense de Madrid, España

### INSCRIPCIÓN

Categoría	Temprana (€)	Ordinaria (€)	En sede (€)
Socios RSEQ/SPQ	300	350	400
No socios RSEQ/SPQ	370	420	470
Estudiantes Socios RSEQ/SPQ	150	200	250
Estudiantes No Socios RSEQ/SPQ	200	250	300

\*Inscripción: registro y documentación del congreso. Límite: 2 comunicaciones/inscripción.

Alojamiento a precio reducido en La Magdalena: 30 € por persona y noche

Organizan:



Colaboran:



Patrocinan:



# The New Aldrich Sure/Seal™ System



The Ideal Solution for Anhydrous  
Solvents and Air-Sensitive Reagents

For more information on the new Aldrich Sure/Seal System and related products, visit

[aldrich.com/sureseal](http://aldrich.com/sureseal).