



Anales de Química

La revista de la Real Sociedad Española de Química

segunda época

www.rseq.org/anales

volumen 113

número 1

enero-marzo 2017



© CAB/Ñito

La composición química de la atmósfera primitiva del planeta Tierra, J. Pla-García y C. Menor-Salván

Entrevista a Bibiana Campos Seijo, Editora en jefe de *Chemical and Engineering News (C&EN)*

Determinación de la constante de Avogadro mediante un experimento de electrólisis realizado con productos de bajo coste, A. Tomás-Serrano y R. García-Molina

Real Sociedad Española de Química
El Sitio de la Química en España

Entidades colaboradoras



Socios Corporativos

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

Anales de Química

Revista de la Real Sociedad Española de Química

Editor General

Miguel Ángel Sierra
Universidad Complutense de Madrid

Comité Editorial

Fernando P. Cossío
Universidad del País Vasco Ikerbasque

Juan José Lucena
Universidad Autónoma de Madrid

Sonsoles Martín Santamaría
Centro de Investigaciones Biológicas del CSIC

Inés Pellón González
ETS de Náutica y Máquinas Navales UPV/EHU

Mariona Sodupe i Roure
Universidad Autónoma de Barcelona

Carmen Redondo
Colegio Estudio

María C. de la Torre
Instituto de Química Orgánica General del CSIC

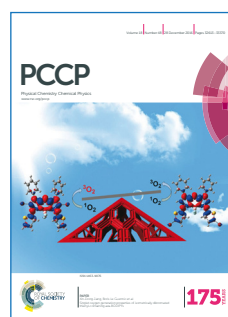
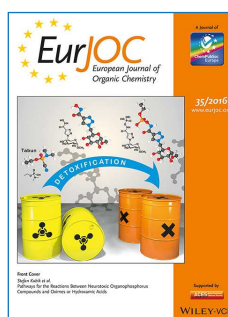
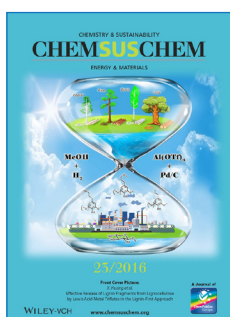
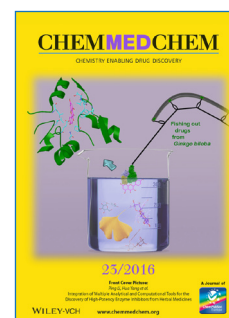
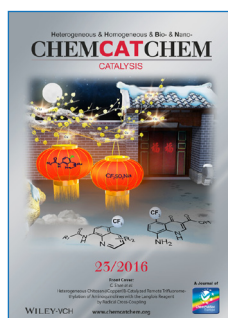
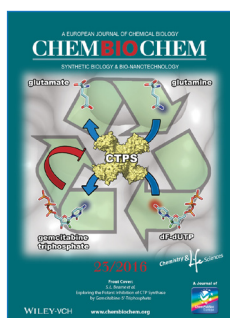
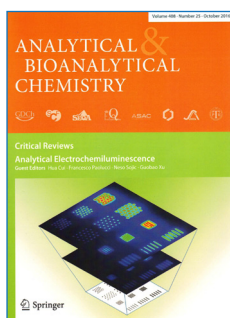
Secretaría Editorial

Patricia Yáñez-Sedeño
Real Sociedad Española de Química
www.rseq.org

Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense Ciudad Universitaria.
28040 Madrid
Tel (+34) 913 944 356. Fax (+34) 915 433 879



Revistas patrocinadas por la Real Sociedad Española de Química



Sumario



Composición y producción:

Moisés Fernández
 Edinova Taller Editorial

Editorial	4
<i>Fernando P. Cossío</i>	
Carta del Presidente	6
<i>Jesús Jiménez Barbero</i>	
Cartas al editor	7
<i>Manuela Martín Sánchez</i>	
Opinión	
Más allá de la frontera molecular: Un reto para la educación en la química española en el siglo XXI	8
<i>Miguel Ángel Sierra</i>	
Entrevista Bibiana Campos Seijo, Editora en jefe de <i>Chemical and Engineering News (C&EN)</i>	10
<i>Sonsoles Martín Santamaría y Miguel Ángel Sierra</i>	
Investigación Química	
La composición química de la atmósfera primitiva del planeta Tierra	16
<i>Jorge Pla-García y César Menor-Salván</i>	
Biocatálisis aplicada. Las enzimas como herramientas útiles en síntesis orgánica	27
<i>Vicente Gotor Fernández y María José Hernáiz Gómez-Dégano</i>	
Historia de la Química	
El camino de enlace cuarenta años después de su descubrimiento: una manifestación del enlace químico en el espacio real	36
<i>Chérif F. Matta</i>	
Josep Pascual Vila (1895-1979): una aproximación biográfica	40
<i>Joaquim Sales y Agustí Nieto-Galan</i>	
Enseñanza de la Química	
Determinación de la constante de Avogadro mediante un experimento de electrólisis realizado con productos de bajo coste	47
<i>Antonio Tomás-Serrano y Rafael García-Molina</i>	
Noticias de la RSEQ	54
Obituario	
Elena Soriano Santamaría (Logroño, 1973-2016)	60
George A. Olah	62
Reseñas de libros	
Q. Garrido Garrido: <i>CIENCIA, y además entiendo!!!</i> , 2016	64
<i>Manuela Martín Sánchez</i>	
Adiciones y correcciones	
Nombres y símbolos en español de los elementos aceptados por la IUPAC el 28 de noviembre de 2016 acordados por la RAC, la RAE, la RSEQ y la Fundéu	65
<i>Miguel Ángel Ciriano, José Elguero, Javier García-Martínez, Pilar Goya y Pascual Román Polo</i>	

Anales de Química está disponible en versión impresa. Para más información, por favor contactar con pyanezs@ucm.es

Fernando P. Cossío

Normalmente los Editoriales de esta revista reflejan una opinión del Editor sobre un tema de interés para la comunidad química. Sin embargo, en este texto quisiera compartir con nuestros amables lectores algunas dudas que me han surgido sobre un tema cada vez más importante para los químicos. Me refiero a las patentes.

Vaya por delante que, personalmente, he sido y soy partidario de las patentes como un medio de protección de la propiedad intelectual e industrial de los resultados de nuestra investigación. He escrito y licenciado unas cuantas patentes y sé de su importancia. Pero mis convicciones se pusieron a prueba cuando, en el curso de un viaje, compré en el aeropuerto el último ejemplar en aquel momento –8 de agosto de 2015– de la revista *The Economist*. El titular era llamativo: “*Time to fix patents*”. Pero el encabezamiento era directamente provocador: “*Ideas fuel the economy. Today’s patent systems are a rotten way of rewarding them*”. Un modo pésimo, podrido, de recompensar las ideas innovadoras. Nada menos. A grandes rasgos, se indicaba que las patentes no dejan de ser un monopolio controlado que, por su propia naturaleza, está en contra del liberalismo económico que la revista defiende. También ponían en duda que la protección mediante patentes hubiera fomentado la innovación. Antes al contrario, según ellos, la habían dificultado e incluso paralizado, al menos en ciertos ámbitos.

Posteriormente, en un programa de televisión (de esos canales temáticos que nos permiten huir de la telebasura imperante) vi un estupendo reportaje sobre la historia de la rivalidad entre los hermanos Wright y Glenn Curtiss, otro inventor extremadamente ingenioso y creativo, menos conocido que los primeros. En el programa se indicaba que, después de sus legendarios vuelos en Kitty Hawk, los Wright obtuvieron una patente increíblemente amplia que les daba derechos prácticamente ilimitados sobre cualquier cosa que volara y que pudiera maniobrar en el aire modificando la geometría de sus alas. Curtiss, un excelente fabricante de motores ligeros y de motocicletas (los hermanos Wright eran fabricantes de bicicletas) ofreció



a los famosos hermanos su colaboración, pero éstos se negaron en redondo. Curtiss no se detuvo y fabricó prototipos muy avanzados, con adelantos que perduran aun hoy, como los alerones, amén de motores más potentes y ligeros. Los hermanos Wright se pusieron furiosos porque pensaban que Curtiss había violado sus patentes y se enzarzaron en una interminable batalla legal que dejó a ambas partes agotadas psicológica y financieramente. Se puede decir que durante largos años pasaron más tiempo en los despachos y en los juzgados que en los talleres. De hecho, Orville Wright estaba convencido de que la muerte de su hermano Wilbur fue debida al agotamiento y la depresión que le generó esta batalla interminable. El resultado de esta guerra de patentes fue que en EE UU ninguna empresa quiso meterse en ese avispero y, al estallar la Primera Guerra Mundial, la aviación en Norteamérica estaba considerablemente menos avanzada que en Europa. Ello hizo que el gobierno estadounidense obligara a las partes a avenirse y a repartirse los derechos de propiedad industrial. De hecho, este acuerdo forzoso se tradujo al final en una empresa, la Curtiss-Wright, que hoy en día continúa

existiendo. Lo importante aquí es que el Estado tuvo que intervenir para corregir un perjuicio al bien común generado por un intento de monopolio soportado sobre unas patentes de reivindicaciones desmedidas. No está mal para los campeones del libre mercado...

Más recientemente, y aquí entramos en aguas químicas (valga la redundancia), estamos asistiendo a una historia similar a partir del último bombazo científico: las posibilidades de edición del genoma mediante la técnica CRISPR/Cas9. En el mundo académico se da casi por hecho que un premio Nobel va a recaer en breve sobre las investigadoras Emmanuelle Charpentier y Jennifer Doudna (y quizá sobre alguien más). Naturalmente, a raíz del descubrimiento principal y de sus ramificaciones, las instituciones concernidas se apresuraron a solicitar patentes y a crear empresas *spin off* para proteger y explotar los resultados de esta técnica, tan potente y con tantas posibilidades. Básicamente, Harvard y el MIT, a través del *Broad Institute*, consiguieron la primera patente basadas en CRISPR/Cas9, mientras que las Universidades de California en Berkeley y de Viena (instituciones a las que pertenecían Doudna y Charpentier, respectivamente) habían solicitado la patente con anterioridad. El conflicto está servido y los tribunales y la Oficina norteamericana de patentes y marcas (USPTO) tienen un complicado trabajo para determinar a quién corresponde la prioridad. No voy a entrar en detalles, pero baste decir que la patente Berkeley-Viena reclama la propiedad sobre células procariotas y eucariotas, mientras que la de Harvard/MIT (*Broad Institute*) la reclama sobre células eucariotas, con el argumento de que un científico del *Broad*, Feng Zhang, demostró por primera vez que la técnica se podía utilizar en eucariotas, algo que a juicio de sus abogados, no era obvio a partir de la pa-

tente más general, por lo que su hallazgo debe ser objeto de una patente independiente. Por supuesto, la otra parte (Berkeley-Viena) alega que, aunque la parte descriptiva de su patente era con procariotas, la intención obvia era la extensión a eucariotas, por lo que consideran legítimo que su patente cubra todas las posibilidades, ya que la extensión a eucariotas no supone actividad inventiva genuina. El problema es que, nuevamente, mientras se resuelve este complejo asunto, las compañías (grandes y pequeñas) están a la espera de la decisión de los tribunales. Independientemente del resultado, un problema adicional es que las *biotech* pequeñas podrían obtener licencias de la patente ganadora tan amplias que no las podrían desarrollar y, si no llegaran a acuerdos, nadie podría hacerlo. Aún peor, como es de esperar que la parte perdedora recurra, el asunto podría eternizarse en los tribunales en detrimento de los trabajos en los laboratorios. Así que los posibles desarrollos terapéuticos basados en CRISPR/Cas9 podrían sufrir un retraso considerable lo que, dada la importancia de la técnica, sería una tragedia.

De modo que ya ven, la historia, de alguna manera, se repite. A la espera del desenlace, caben varias preguntas: ¿Deberían ser las patentes más restrictivas en cuanto a sus reivindicaciones? ¿Tendrán que intervenir nuevamente los poderes públicos para preservar el interés general, que puede verse amenazado por unas patentes abusivas? Pienso que estas cuestiones son relevantes.

Como diría nuestro Editor:
Gracias por leer.

FERNANDO P. COSSÍO
Editor Asociado de *Anales de Química*

Jesús Jiménez Barbero

Queridos amigos y colegas,

El año 2017 es un año especial para mí. Probablemente, también para muchos de vosotros. En cuanto a la financiación pública de la investigación por parte del Estado, como sabéis, está siendo un año difícil. Los presupuestos del año siguen sin aprobarse. Aunque, en principio, no tendría que ver, cuando escribo estas líneas todavía no está resuelta la convocatoria de los contratos FPI asociados a los proyectos 2015. La incertidumbre respecto a la fecha de apertura de la convocatoria de los proyectos del Plan Estatal 2017 es alta. Desgraciadamente, parece que el esfuerzo realizado en los dos años anteriores para recuperar la fecha de apertura de las convocatorias ha sido infructoso. Es una mala noticia para los que nos dedicamos a la Investigación. Afortunadamente, también ha habido alguna buena noticia, como el nombramiento del Comité Científico de la Agencia Estatal de Investigación. Los científicos que lo integran son de primer nivel internacional, incluyendo nuestros queridos socios y amigos Avelino Corma y Luis Liz-Marzán, Medallas de Oro de nuestra RSEQ, entre otras distinciones nacionales e internacionales. Sirva esta carta para expresar mi felicitación y reconocimiento para ambos. Esperemos que el Comité Científico consiga hacerse oír y así ayudar a que nuestra Ciencia alcance el lugar que merece. Como bien sabemos, sin Ciencia, el Futuro será muy difícil para todos, muy especialmente para nuestros jóvenes.

Muy próximamente, el Jurado de los Premios RSEQ 2017 anunciará su decisión, que será anunciada en la Junta de Gobierno del próximo 6 de abril. No me cabe ninguna duda de que los nuevos galardonados seguirán representando a nuestra Ciencia, a nuestra Química y a nuestra



RSEQ al máximo nivel a escala internacional. Veremos a algunos de ellos, junto con los galardonados en ediciones anteriores, en nuestra próxima Reunión Bienal de Sitges. No olvidéis inscribiros. Es un evento importante, con una gran visibilidad y un plantel de conferenciantes excelente. No me cabe duda de que será un gran acontecimiento y que será empleado por muchos de nosotros, jóvenes y seniors, como fuente de inspiración y como medio de establecer nuevas relaciones. Espero veros allí a la mayoría de vosotros.

Hasta pronto,
Jesús

JESÚS JIMÉNEZ BARBERO
Presidente de la Real Sociedad Española de Química

Estimado editor:

Durante muchos años en varias de las revistas científicas se optó porque en las referencias sobre los artículos de las revistas se suprimiera el título del artículo, algo que nunca entendí, porque no veía ninguna ventaja en esta forma de actuar, ya que siempre el título puede dar una idea al lector del contenido del artículo. Últimamente estoy observando que en la mayoría de las revistas, al menos en las que yo leo, se ha vuelto a incluir el título del artículo. Me

gustaría que la revista *Anales de Química* se planteara esta posibilidad para un futuro próximo.

MANUELA MARTÍN SÁNCHEZ
Departamento de Didáctica de Ciencias Experimentales
Universidad Complutense
manuelamartinsanchez@gmail.com



Las cartas al editor no requieren invitación y deben enviarse directamente a Miguel Á. Sierra: sierraor@ucm.es

Más allá de la frontera molecular: Un reto para la educación en la Química española en el siglo XXI

Miguel Á. Sierra

En 2003 el comité del *National Research Council* de las *National Academies* de los Estados Unidos, nombrado *ad hoc* para estudiar los desafíos del siglo XXI para las Ciencias Químicas, publicó su informe *Beyond the Molecular Frontier* subtítulo *Challenges for Chemistry and Chemical Engineering*¹. Este informe, conocido como “Informe Breslow”, continúa con la tradición de informes previos (*Chemistry: Opportunities and Needs*, denominado como el “Informe Westheimer”, publicado en 1965; *Opportunities in Chemistry* o “Informe Pimentel”, publicado en 1985; y el “Informe Amundson” *Frontiers in Chemical Engineering: Research Needs and Opportunities*, publicado en 1988) y define los problemas fundamentales que debería abordar la Química en los próximos 40 años. El documento hace un especial hincapié en la necesidad de considerar la Química y la Ingeniería Química como un todo y, a su vez, avanzar para superar la “frontera molecular”. Este informe difiere sustancialmente de los objetivos del tan traído y llevado H2020 y, especialmente, en la estrategia para alcanzar dichos objetivos. Discutir sobre las discrepancias y semejanzas entre ambos programas requeriría unas cuan-

tas decenas de páginas, además de entrar en temas filosóficos y políticos, cosa que no deseo hacer.

Mi intención es tratar algo más fundamental: ¿Qué tiene que cambiar en la educación universitaria en Química para que España pueda saltar “la frontera molecular”? La respuesta a esta cuestión debe buscarse intentando contestar a otras dos preguntas. ¿Tiene sentido en el siglo XXI estructurar la Química en las subdisciplinas clásicas, reflejo de los correspondientes departamentos universitarios? o, por el contrario, ¿no estará esta división obsoleta en el siglo XXI impidiendo una educación y, por ende, una investigación verdaderamente multidisciplinar? Por supuesto, con multidisciplinar no quiero decir “adquirir competencias transversales” ni otros mantras à la page y políticamente correctos. Todos sabemos lo que significa multidisciplinar y no es necesario abundar en ello.

La base de una formación universitaria verdaderamente multidisciplinar en Química no hay que buscarla como se hace ahora en la formación exhaustiva en subdisciplinas. Por el contrario, hay que dotar a nuestros estudiantes de una base intelectual que les permita abordar la amplitud de la Química moderna (de nuevo esto no significa “adquirir competencias”, en el sentido en el que esta frase se usa en las memorias de acreditación de los grados que evalúa la ANECA con tanto afán y tan dudoso criterio). Para ello se requiere una base sólida en las disciplinas tradicionales (Química Física, Química Orgánica, Química Inorgánica, Química Analítica y Bioquímica), dejando aparte asignaturas como la “Química General”. Los fundamentos de la Química se adquieren mejor con libros especializados que con potpurris de ideas que continúan la tradición docente de la primera mitad del siglo XX.

Por supuesto, una sólida formación experimental es fundamental en una Ciencia que es eminentemente experimental. Esta formación, que debe estar al nivel de las asignaturas teóricas, no puede hacerse usando prácticas

¹ <https://www.nap.edu/catalog/10633/beyond-the-molecular-frontier-challenges-for-chemistry-and-chemical-engineering>



M. Á. Sierra

Dpto. de Química Orgánica I y Centro de Investigación en Química Avanzada ORFEO-CINQA
Facultad de Química
Universidad Complutense
C-e: sierraor@ucm.es

Recibido: 23/02/2017. Aceptado: 06/03/2017.

del siglo XIX. Nada más aterrador para un alumno que empieza sus estudios de química como enfrentarse a un puchero hirviendo, en el que un líquido se transforma en otro líquido, o a medir coeficientes varios usando técnicas que ya eran viejas cuando Liebig era estudiante. La Química del siglo XXI utiliza multitud de equipos que deben usarse para la enseñanza práctica de la Química desde el principio. ¿Qué diríamos si para conducir un coche debiéramos primero aprender a llevar un carro de bueyes? Las operaciones básicas de laboratorio requieren de técnicas del siglo XXI no del siglo XIX.

Estos fundamentos de Química deben ir más allá de la casuística y, por supuesto, deben abordar conceptos moleculares. Sin embargo, a estas alturas, estudiar fundamentos en Química únicamente a nivel molecular es claramente insuficiente. Los niveles macromoleculares, supramoleculares, la nanoescala, etc son tan fundamentales en Química como la reactividad de un grupo carbonilo, o la coordinación octaédrica de un metal.

Una vez puestas las bases, los conocimientos deben ampliarse de una forma proporcionada y racional. Esto se hace ahora de forma machacona y reiterativa. No es de extrañar que un estudiante se pregunte para qué tiene que aprenderse veintisiete reacciones de compuestos carbonílicos, o que se asombre de que le hayan explicado el efecto túnel cuatro veces en otros tantos cursos. La palabra que mejor define al sistema docente actual en Química es “desintegración”. En lugar de integrar conceptos nos dedicamos a desintegrar conocimientos. No se trata tanto de enseñar hechos como de enseñar a pensar y a predecir, en otras palabras, a tener criterio. Lo de menos a veces es qué se enseña, lo fundamental es qué se consigue con esa enseñanza. Vistos los resultados de nuestros grados (los reales, no los que se maquillan para pasar las acreditaciones), no creo que el sistema actual sea demasiado integrador, ni que nuestros estudiantes adquieran precisamente una formación multidisciplinar.

Un último aspecto que hay que considerar es la habilidad de nuestros estudiantes para trabajar con los medios de información que están a su disposición. La búsqueda de información científica, su interpretación y los métodos computacionales (esto debería considerarse como fundamental) para predecir estructuras y propiedades, son, en el siglo XXI, tan necesarios como lo es el que nuestros alumnos adquieran la capacidad de transferir sus opiniones y conocimientos. Obtener un puesto de trabajo requiere no solo saber si no saber comunicar. En esto la cultura anglosajona tiene una gran ventaja sobre la nuestra. Desgraciadamente, salvo excepciones, nuestros alumnos siguen siendo sordomudos en clase o papagayos cuando exponen un trabajo.

Estas opiniones son breves pinceladas sobre cómo saltar la Frontera Molecular en la educación, un tema mucho más complejo, pero que están en una buena parte de acuerdo con los criterios que, según la *American Chemical Society* debe cumplir una Facultad para poner el sello de calidad ACS en un Grado². Los criterios de la ACS derivan directamente de las ideas contenidas en el documento listado en la referencia 1. Ni que decir tiene que en Estados Unidos no todos los Grados tienen el sello ACS.

Por supuesto, los criterios de la ACS y los míos propios esbozados en este artículo son argumentables y es probable que haya otros mejores. Sin embargo, está claro que, independientemente de que éstas opiniones puedan atribuirse como se me dijo hace tiempo “a mi estúpida formación americana”, es un hecho que el sistema de enseñanza de la Química en España está muy compartimentalizado. Además, no forma graduados capaces de enfrentarse como profesionales a una formación superior ni al mundo laboral. Por último, una parte importante de nuestro tiempo, que podría dedicarse a mejorar nuestra docencia, se va en actividades “bolonizantes” con la idea de dar a nuestros Grados un toque de modernidad. No es solo que no estemos en educación más allá de la “frontera molecular”, es que ni siquiera la divisamos.

² <https://www.acs.org/content/acs/en/about/governance/committees/training.html>

Bibiana Campos Seijo, Editora en jefe de *Chemical and Engineering News (C&EN)*

Bibiana Campos Seijo (Bibi) es editora en jefe de *Chemical and Engineering News (C&EN)*, la revista semanal de la American Chemical Society (ACS) con una tirada de alrededor de 155.000 ejemplares. Nació en Sada (A Coruña). Se licenció en Ciencias Químicas en la Universidad de Santiago de Compostela, y se doctoró en la Manchester Metropolitan University. Después de un período como profesora y periodista independiente trabajó como editora técnica para el *European Respiratory Journal* y como editora de *Pharmaceutical Technology Europe*. En 2009 obtuvo el puesto de editora de *Chemistry World*, publicación mensual de la Royal Society of Chemistry y desde diciembre de 2014 es editora de *C&EN*.

Profesionalmente, las palabras de Madeleine Jacobs, que en 2014 era la directora ejecutiva y CEO de la ACS, definen perfectamente a nuestra entrevistada: “Doctora Campos Seijo has a passion and enthusiasm for and knowledge of the science and of the practice of chemistry and science communication that will not only serve *C&EN* magnificently, but will also make her ideally suited for the ambassadorial role within ACS that such a prominent position entails”.

Anales de Química entrevistó a Bibiana Campos Seijo el día 21 de febrero de 2017.

Querida Bibi, muchas gracias por haber aceptado hacer esta entrevista y dedicarnos un poquito de tu tiempo.



Bibiana Campos Seijo al inicio (2014) de su trabajo como editora de *C&EN*

“Una de mis aficiones es el levantamiento de peso”

—Siempre comenzamos estas entrevistas con el aspecto humano de la persona que entrevistamos, pidiendo a nuestro entrevistado que nos cuente algo personal, sobre sus aficiones, su historia personal. ¿Nos puedes decir algo sobre ti?

Llevo fuera de España desde 1997. Mi marido es inglés, así como nues-

tros dos hijos. Una de mis aficiones es el levantamiento de peso y tengo un récord del mundo. Quizá sea una afición un poco extraña pero siempre te ayuda para hacer amistades y romper un poco el hielo. Por lo demás, me gusta cocinar y viajar. Como sabéis estudié en la Facultad de Química de la



Pinchar aquí para reproducir el vídeo



Universidad de Santiago de Compostela. Me fui de Santiago porque me encontré con unos compañeros que estaban rellenando los formularios para solicitar la beca Erasmus y me animé a solicitarla yo misma. Al final yo conseguí la beca y ellos inicialmente no. Completé el año de Erasmus en Manchester y luego me quedé en Inglaterra para hacer el Doctorado.

Estuve luego trabajando como profesora a tiempo parcial dando clases y prácticas. Al final me cambié a la formación a distancia *on-line* (relacionado con el negocio de mi marido), diseñando cursos de idiomas e informática. Hace unos 12 años, pasé al terreno de las publicaciones, y finalmente llegué a la Royal Society of Chemistry (RSC). Tras trasladarme a los Estados Unidos, en este momento trabajo para la ACS.

¿Cómo elegiste estudiar Química? ¿Había tradición en la familia?

No fue tradición, mis padres de hecho no tenían formación universitaria. Mi hermana y uno de mis hermanos estudiaron Derecho y yo sin embargo escogí la Química. Curiosamente, en matemáticas, biología y física siempre sacaba buenas notas, y , química era la asignatura en la que obtenía peores resultados. Pero una vez que empecé la carrera de Químicas, todo se me dio bien. Creo que esto es un reflejo de qué tipo de profesores tienes en Educación Secundaria. En mi caso, mi profesor de química era una persona con mucho carisma. Sin

“**Tengo un equipo fantástico para hacer C&EN**”

embargo, estaba más interesado en la política que en la química y resultó que, cuando llegué a la universidad, tuve que aprender la mayoría de los conceptos básicos.

–Nos has comentado que la decisión de pasar al mundo editorial surgió a raíz del trabajo de tu marido. Eso te ha llevado después a manejar la revista científica de mayor tirada del mundo, C&EN. Esto debe ser un trabajo muy absorbente, ¿no?

Sí, pero también es un trabajo muy dinámico y divertido. La ACS es la sociedad científica más grande del mundo con más de 155.000 personas que se leen la revista de cabo a rabo cada semana. Si hay algo que no tie-

ne la calidad esperada, nos lo hacen saber. Desde ese punto de vista, el listón está muy alto. Además, no es una revista de ciencia general sino que es específica para químicos, por lo que tenemos muy poco espacio para errores. Pero tengo mucha suerte porque tengo un equipo fantástico con una mayor parte de licenciados y doctores en ciencias y muchos años de experiencia.

Una de las facetas más interesantes de mi trabajo es que la ACS se está expandiendo globalmente y desde, ese punto de vista, tenemos que diseñar y poner en acción estrategias que nos permitan alcanzar a químicos que están en Sudamérica, India o China, por ejemplo. El tipo de estrategias que apoyan esta expansión incluyen todo tipo de actividades, desde simposios a traducciones de una selección de nuestro contenido, presencia en redes sociales, colaboraciones con organizaciones locales, etc.

–Profesionalmente, ¿piensas que has llegado a lo más alto?

No. Estoy disfrutando de este trabajo porque tengo mucha libertad para tomar decisiones, establecer prioridades para mi equipo e influir en el futuro de la ACS. Además, me permite viajar y conocer a muchos químicos de todas partes del mundo (incluso conozco a algunos premios Nobel de Química por su primer nombre). Pero creo que hay mucho más que hacer: facilitar que la ACS se expanda globalmente es vital y C&EN tiene un papel muy importante que jugar; extender nuestras actividades a otras áreas que no son “core chemistry” como la Bioquímica y la Biología Molecular o la Ingeniería Química, con las que tenemos muchas posibilidades para interactuar, es también muy importante. Adicionalmente, para aquellos que trabajamos en co-

“**Hay muchos químicos que hacen química pero no se describen como químicos**”

“
Estamos trabajando para que C&EN, en formato digital, sea más atractiva y más fácil de usar”



Bibi en enero de 2017

municaciones científicas existe el área de la percepción de la química por el público y por los químicos. En este sentido, existe una tendencia hoy en día por la que muchos licenciados que hacen química no se describen como químicos sino como “material scientist”, por ejemplo. Creo que eso es una pena. Yo veo esto como una oportunidad para C&EN y para la ACS para redescubrir esas áreas y volver a considerarlas como química.

–*Sobre la evolución de C&EN, ¿qué porcentaje se sigue difundiendo en papel y cómo ha influido en la evolución de la revista el protagonismo de la edición digital y la propia página web?*

En este momento el 60% de nuestros miembros reciben la revista en papel y el 40% en formato digital. Es un balance muy bueno. Entre los que reciben la revista en papel, hay más posibilidades de que renueven su suscripción a la ACS. Este porcentaje es más bajo entre los que reciben la revista digital. Es algo de lo que tenemos que ser conscientes en cuanto a la evolución de C&EN pero seguimos invirtiendo en innovación en el campo digital. Ahora mismo estamos trabajando en tres proyectos bastante importantes, uno de los cuales es

una transición en la plataforma que soporta nuestra edición digital hacia un formato que sea más atractivo, interactivo y fácil de usar. Sabemos que el lector emplea unos 20-25 minutos en leer la revista y nuestro objetivo es que esa inversión de tiempo por parte del lector sea placentera.

En la web tenemos unos 3 millones y medio de visitantes al año: aquí hay una posibilidad enorme de promocionar, no sólo la revista, sino también la propia ACS. Tenemos que diseñar mecanismos para adquirir datos de esa gente, que nos permitan monitorizar qué tipo de contenidos les interesa, cuál es la trayectoria que siguen al llegar a la página web, etc. Ahora mismo no tenemos la tecnología necesaria, pero otro de los proyectos a los que me refería antes se ocupará de esto: estamos rediseñando la página web por completo y pensamos lanzarla a principios del 2018.

–*¿Sería para vosotros un objetivo que el formato impreso desapareciera en algún momento?*

No es un objetivo en sí mismo. El objetivo es seguir a los lectores a donde ellos vayan. En este momento vemos que hay una preferencia hacia el formato impreso. Una vez que esa

preferencia desaparezca y lleguemos a un equilibrio entre el volumen de lectores del formato impreso y la edición digital, empezaremos a pensar mecanismos para que nuestros lectores escojan la edición digital. Pero creo que debe ser una preferencia, no una imposición. A mí, por ejemplo, me encanta la edición impresa. Un aspecto a considerar es cómo diferenciar los productos. El formato impreso se presta más a hacer historias largas, de análisis, mientras que la página web se presta más a comunicar cosas inmediatas, últimas noticias, por ejemplo, y a la comunicación a través de redes sociales. Me gusta la idea de usar la revista impresa como un “lujo”, algo a lo que dedicas dos horas un sábado por la mañana, mientras que la web la usas todos los días y te conectas a diferentes horas para ver lo que está pasando y ha pasado a lo largo del día.

–*¿Cómo os planteáis la expansión de la revista y de la ACS?*

Traducir algunos contenidos a español responde a una preferencia personal, pero tiene mucho sentido hacerlo. Lo mismo ocurre con los contenidos en chino que ya incluimos en redes sociales, y es que hay más perso-

nas que hablan esos idiomas que el inglés. Desde ese punto de vista, estamos intentando llegar a esas lenguas que no son minoritarias precisamente. Esto permite que lectores en Latinoamérica o en China accedan a contenidos científicos de calidad muy alta.

Es también importante que hagamos esto no solamente para químicos y licenciados sino también para personas que estén considerando la química como una carrera, incluso a estudiantes de Química. La revista debería ser una aspiración para esos estudiantes que piensen: “cuando sea químico profesional quiero ver mi investigación publicada en *C&EN*”. Tenemos que facilitar que crezcan con este contenido y que sea parte de sus aspiraciones y ambiciones.

“Queremos que los estudiantes piensen «cuando sea químico profesional quiero ver mi investigación publicada en *C&EN*»”

—¿Qué papel podemos jugar en España en esta expansión al público latinoamericano?

Cuantas más publicaciones haya en español mejor. Conectar entre nosotros (conectar las actividades entre las sociedades en España con las de

Méjico, Cuba, Chile, por ejemplo y con los propios EE. UU., donde hay muchos investigadores españoles), puede ser de gran ayuda. Deberíamos utilizar todo tipo de redes para hacer cosas juntos.

—Hablando de *C&EN*, ¿Qué criterios de selección de temas y noticias seguís? Especialmente en lo que se refiere al protagonismo de las diferentes noticias.

En mi equipo editorial hay tres grupos: Ciencia, Tecnología y Educación; Negocios; y Asuntos Relacionados con la Política y el Gobierno. El contenido que produce el primero de ellos, Ciencia, Tecnología y Educación, es el que más lectores atrae ya que es un interés común para los miembros de nuestra audiencia, incluyendo los que trabajan en la industria.

Estos contenidos científicos tan fundamentales, incluyen las publicaciones en las revistas de la ACS, Nature, Science, Angewandte Chemie, etc. Por otra parte, están las visitas de nuestros redactores a distintos Departamentos universitarios, eventos científicos (congresos, reuniones, etc.) en los que se identifican tendencias. Luego están las exhibiciones de instrumentación, aplicaciones de nueva tecnología, en este caso desde un punto de vista más de negocios. También cubrimos actos políticos, homenajes, etc. Una parte importante son las relaciones personales. Hay científicos a los que seguimos de forma personal y cada día recibimos correos de investigadores de todas partes del mundo que describen en que están trabajando y nos indican áreas de interés actuales y futuras.

Tengo que decir que se observa en los últimos tiempos mucha coo-



Bibi con Mostafa El-Sayed (ganador de la medalla Priestley 2016)

peración entre diferentes grupos de investigación, de diferentes nacionalidades pero también de diferentes disciplinas, algo que en mi opinión es motivo de celebración. Por ello, pido a mi equipo que trabajen juntos, ya que hay muchas áreas en las que es difícil trabajar de forma aislada.

—En España estamos sufriendo una proliferación de actividades de divulgación por parte de científicos, “desatendiendo” sus deberes de investigación en aras de hacer la ciencia más atractiva a las nuevas generaciones y de llegar más al público general. ¿Es ésta una tarea del científico investigador o más bien de científicos que se especialicen en periodismo y divulgación o de periodistas que se especialicen en ciencia?

Esta es la pregunta del millón de dólares. En España esto pasa de forma espontánea. En otros países los gobiernos tienen que incentivar a los científicos para hacer este tipo de tareas. Por ejemplo, en el Reino Unido cuando se solicita financiación al Gobierno uno de los puntos de la solicitud es el impacto de los resultados obtenidos y su comunicación a la prensa. Entonces, no queda más remedio que hacer esta divulgación. Esto es un problema porque hay gente que lo hace muy bien y otros que no lo hacen tan bien. En mi opinión no es justo obligar a los investigadores a hacer estas labores desatendiendo su investigación. Debería ser una opción personal.

El dilema es parecido al que hay entre Docencia e Investigación en la Universidad. Muchos investigadores están obligados a ejercer como docentes y se les da muy mal. Otros, que serían profesores fantásticos, están obligados a investigar para conseguir dinero para la Universidad y justificar su puesto de trabajo. Esto es muy frecuente en el Reino Unido. Yo creo que el talento de las personas debe utilizarse en lo que saben hacer mejor. He tenido profesores en Inglaterra que eran investigadores fantásticos pero que, al entrar en una clase con 50-60 personas, eran incapaces de hacer algo tan básico como mantener contacto visual con los alumnos.



Bibi con Jennifer Doudna (una de las descubridoras de CRISPR-Clustered regularly interspaced short palindromic repeats)

¿Cuál es la situación de la política científica en EE. UU.?

Desde hace unos meses vivimos una preocupación generalizada en la comunidad científica en los EE. UU. Por ejemplo, tenemos científicos en la EPA (*Environmental Protection Agency*) a los que se les impusieron limitaciones para comunicarse usando redes sociales, hay retirada de páginas web con contenidos relacionados con el cambio climático y problemas relacionados. En general, hay mucho

nerviosismo. Lo habitual es que un cambio de una administración democrática a una republicana suponga un descenso en fondos de investigación, sobre todo aquellos destinados a estas agencias federales, pero en este caso hay mucha incertidumbre. El nuevo gobierno no fue demasiado claro sobre su política científica durante la campaña electoral. Todo apunta a restricciones sobre energías alternativas, el cambio climático y asuntos relacionados. En general,

“El hacer divulgación científica debe ser una opción personal”

“ Se espera que la política científica del gobierno Trump sea bastante negativa para la Ciencia en Estados Unidos ”

se espera que la política científica del nuevo gobierno sea bastante negativa para la Ciencia en Estados Unidos. Aunque todavía no tenemos demasiada información, las señales son bastante negativas.

—¿Sufrirá la Química con el Gobierno Trump?

Yo creo que sí. Por ejemplo, se va a invertir menos en energías renovables ya que hay intereses en mantener las compañías petroquímicas e industrias relacionadas.

—¿Qué opinas sobre el impacto que tendrá la nueva política de emigración en la Química y en la Ciencia en general?

No hay una razón real que justifique esta prohibición, pero será grave y afectará no solo a los químicos, sino a otros científicos. Esta situación lleva a una falta de estabilidad que será negativa para la ciencia. Además de los científicos a los que se les limite viajar, están los científicos que no vendrán a los Estados Unidos por razones ideológicas, porque se trata de un país que prohíbe a los colegas de ciertos países entrar para hacer su trabajo. Esto hará que el número de científicos afectados sea todavía mayor. Probablemente, Europa y China se beneficiarán de esta situación.

—¿Se posicionará la ACS y C&EN sobre el problema de las restricciones a la emigración?

La ACS ha firmado una carta junto a 150 organizaciones de todo el país en las que expresan su preocupación sobre estas medidas y el impacto que pueden tener a nivel federal y sobre la comunidad científica. Es una manera de expresar su preocupación, pero sin

politizar su posición u oponerse al gobierno directamente.

C&EN tiene independencia editorial y nuestro papel no es el posicionarnos sobre este tipo de temas sino el informar a nuestros lectores de manera equilibrada y rigurosa.

—¿Cómo ves, desde tu posición, el futuro de la Ciencia en Estados Unidos?

Aquí se hace muy buena Ciencia y tenemos una excelente cultura científica. Además, la movilidad de la academia a la industria y viceversa es mejor que en otros países. El prototipo del químico estadounidense es el de una persona que trabaja en un laboratorio de la universidad, pero, cuando tiene valor comercial no duda en lanzar una compañía que explota el descubrimiento. Esto es fantástico para el futuro de la ciencia y, además, tiene un gran apoyo por parte de capitalistas e inversores.

Por otra parte, la Ciencia no tiene fronteras y América sabe muy bien cómo atraer talento y establecer colaboraciones. Creo que la relación con Inglaterra, como consecuencia del Brexit, y con China se va a hacer cada vez más estrecha.

—La RSEQ tiene 4000 socios y es pequeña comparada con la ACS. ¿Crees que

“ La Ciencia no tiene fronteras ”

sería posible una colaboración-interacción ACS-RSEQ?

La dimensión no importa. La ACS tiene relaciones con diferentes sociedades químicas de habla hispana como Cuba, Méjico, las comunidades hispanoparlantes de Estados Unidos y otros. Yo tengo un interés especial en establecer estas relaciones, a través de webinars, intercambio de contenidos, eventos y otras actividades.

El primer evento colaborativo de este tipo será el *Atlantic Basin Congress (ABC)* en Cancún, similar al *The Chemical Congress of the Pacific Basin Societies (PACIFICHEM)*. En este congreso participarán sociedades de Méjico, Brasil, distintos países de África y EuCheMS. Es una oportunidad única para establecer contactos y explorar posibilidades de colaboración. Lo importante es poner a los investigadores en contacto y esto es una forma de hacerlo.

Con esto terminamos la entrevista. Muchas gracias Bibi por tu tiempo, por compartir tus ideas y por ser un ejemplo de cómo se puede triunfar aún en tiempos difíciles.

SONSOLES MARTÍN SANTAMARÍA
MIGUEL Á. SIERRA

“ Europa y China se beneficiarán de la nueva política de emigración restrictiva de EE. UU. ”

La composición química de la atmósfera primitiva del planeta Tierra

Jorge Pla-García y César Menor-Salván

Resumen: La atmósfera que respiramos actualmente es el resultado de un proceso de cambios e interacciones en el que la geología, la entrada de objetos extraterrestres y el nacimiento y evolución de la vida han jugado un papel esencial. En este artículo resumimos el conocimiento sobre el origen y la evolución de la composición de la atmósfera del planeta durante el Precámbrico, desde la formación del planeta hasta la *explosión cámbrica*, con los principales puntos en discusión. Revisamos los eventos clave de forma cronológica y exponemos algunas preguntas aún no respondidas.

Palabras clave: Tierra primitiva, atmósfera planetaria, sopa primordial, química prebiótica, origen de la vida.

Abstract: The atmosphere we breathe is the result of changes and interactions where geology, incoming extraterrestrial objects and origin and evolution of life have a key role. This article summarizes the current scientific view of the origin and evolution of Earth's atmosphere during Precambrian and the major events of its evolution sorted chronologically, including a review about controversial points, their implications and a discussion on the open unsolved questions.

Keywords: Early Earth, planetary atmosphere, primordial soup, prebiotic chemistry, origin of life.

INTRODUCCIÓN

Un aspecto fundamental en el estudio de la historia de la atmósfera de la Tierra, y de cualquier otro planeta, así como sus procesos físico-químicos, es su estado de oxidación. Las atmósferas pueden encontrarse en un estado reducido (si sus condiciones atmosféricas impiden los procesos de oxidación debido a la eliminación completa o casi completa del oxígeno y otros oxidantes en la atmósfera o superficie), o un estado oxidado, si su composición es elevada en gases como el oxígeno, dióxido de carbono, el vapor de agua o el nitrógeno. La atmósfera de la Tierra ha pasado por estados reducidos y oxidados durante su evolución. La Tabla 1 muestra las especies dominantes en cada estado.

Es muy importante recalcar que las evoluciones de la litosfera y la hidrosfera están íntimamente ligados a la evolución de la atmósfera terrestre, debido al intercambio de materiales que se produce entre ellos a través de los denomi-

Tabla 1. Especies fundamentales que conforman una atmósfera oxidada y reducida

Atmósfera	H	C	N	O
Reducido	H ₂ /H ₂ O	CH ₄	NH ₃	CO
Oxidado	H ₂ O	CO ₂ /CO	N ₂	CO ₂ /O ₂

nados ciclos geoquímicos. Así, el conocimiento de la atmósfera primitiva de la Tierra y su evolución depende y emana del estudio de la litosfera y la hidrosfera de nuestro planeta.

REVISIÓN HISTÓRICA

Nuestro conocimiento actual acerca de la atmósfera de la Tierra ha sido el resultado de un gran número de trabajos científicos, a veces contradictorios, en los que se han desarrollado modelos teóricos y realizado experimentos para entender cómo la atmósfera ha evolucionado a la largo de la historia geológica del planeta, no pudiendo considerarse aún un tema cerrado, en especial en relación a la composición atmosférica de la Tierra primitiva. A continuación se exponen brevemente los trabajos que hemos considerado más significativos.

El modelo de Oparin

El bioquímico ruso Alexander Oparin propuso una atmósfera primitiva muy reducida, formada fundamentalmente por H₂, NH₃, CH₄ y otros hidrocarburos.^[1]

Esta propuesta es la base del escenario de la *sopa prebiótica*, propuesto independientemente por Oparin y Haldane. Según su propuesta de atmósfera altamente reducida, la elevada temperatura de la atmósfera en sus primeros estadios facilitó la reacción de dichos gases para formar una "sopa" de compuestos orgánicos de los que pudo haber emergido la vida.



J. Pla-García¹

C. Menor-Salván²

¹ Centro de Astrobiología (INTA-CSIC), Southwest Research Institute, Space Science Institute. Dirección postal: INTA-Ctra. Torrejón-Ajalvir km 4, 28850, Torrejón de Ardoz

C. e.: jpla@cab.inta-csic.es

² Georgia Institute of Technology

Recibido: 16/11/2016. Aceptado: 17/02/2017.

Hipótesis de Urey

El químico norteamericano Harold Urey estudió espectroscópicamente las atmósferas de Júpiter y Saturno,^[2] que contienen altas concentraciones de amoníaco y metano. Urey dedujo que estos planetas mantienen sus atmósferas primigenias procedentes de la nebulosa proto-solar, debido a que conservan la mayor parte del H₂ desde su formación. Este proceso se explica gracias a las enormes masas de estos gigantes gaseosos, que impiden el escape de los gases ligeros al espacio. Supuso, además, que los planetas terrestres, debido a su menor masa, irían perdiendo paulatinamente su H₂ atmosférico, haciendo que sus atmósferas fueran cada vez más oxidantes. Urey pensaba que la atmósfera de la Tierra primitiva (durante el Hadeano, entre hace 4.600 y 4.000 millones de años –en adelante Ma–) debería haber sido parecida en origen a la de Júpiter y Saturno. Por su baja masa, la Tierra habría perdido lentamente este H₂ y con él parte de su carácter reductor.

Los modelos de Rubey, Holland y Walker

De forma paralela a la hipótesis de Urey, el geoquímico William Rubey defendía la hipótesis de una atmósfera primitiva formada por gases oxidados procedentes de la desgasificación del planeta recientemente formado y la intensa actividad volcánica,^[3] suponiendo que su composición hubiera variado muy poco desde su origen hasta nuestros días, algo que todavía está por demostrar.^[4] Dicha atmósfera estaría formada por CO₂, H₂O y N₂, en lugar de sus contrapartidas reductoras, como el monóxido de carbono (CO), H₂ y amoníaco (NH₃) respectivamente. En este escenario, la atmósfera primitiva estaría en un estado de oxidación neutro, debido a la presencia de pequeñas cantidades de compuestos reductores como el metano (CH₄).

Apoyándose en las teorías de Rubey, Heinrich Holland desarrolló un modelo según el cual la atmósfera estuvo formada en una primera fase por gases reductores de origen volcánico; y en la segunda, a medida que se estructuraba el planeta y se formaba lentamente el núcleo terrestre, la desgasificación volcánica fue liberando gases cada vez más oxidantes.^[5] Hoy sabemos que el núcleo terrestre se formó muy rápidamente, por lo tanto la primera fase de Holland difícilmente se habría producido.

En estudios independientes, James Walker defendió la existencia de una atmósfera primitiva compuesta principalmente por CO₂ y N₂ procedentes de las emisiones volcánicas, tal como sugirió Rubey, con ausencia de O₂ (al menos en la superficie), y presencia de H₂ procedente del balance entre la desgasificación volcánica y el escape al espacio.^[6]

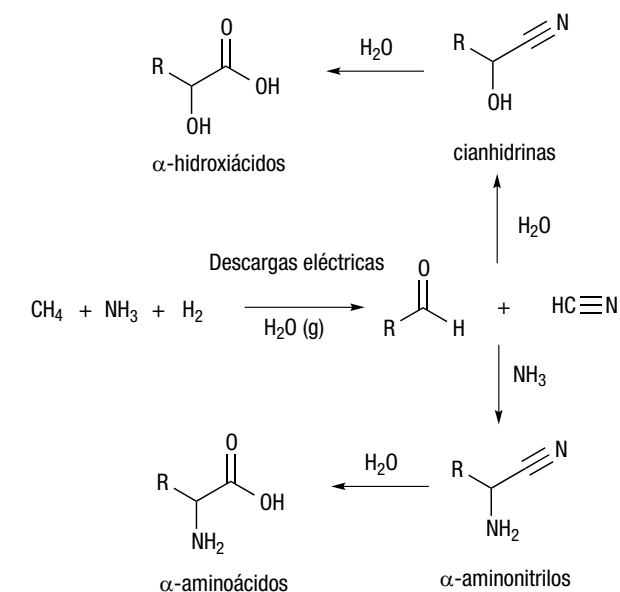
Modelos actuales

Posteriormente Carl Sagan y sus colaboradores postularon la presencia de grandes cantidades de NH₃ y, por lo tanto, el estado reducido de la atmósfera.^[7]

En la actualidad, la comunidad científica se inclina por la existencia de una atmósfera primitiva débilmente reductora,^[8] razonando que la teoría de Oparin de una atmósfera muy reducida, compuesta principalmente de CH₄ y NH₃ es muy poco probable debido, entre otros motivos, a que el NH₃ no pudo ser muy abundante ya que, aunque es posible que existiera una capa de hidrocarburos, ésta sería incapaz de bloquear la radiación ultravioleta que destruiría rápidamente el NH₃. Además se piensa que el H₂ debió escapar al espacio en grandes cantidades, dejando al N₂ como componente principal de la atmósfera.^[9] La pérdida de gases reductores, unida a la incorporación de nuevos gases oxidantes gracias a la desgasificación volcánica y la incorporación de volátiles en los cometesimales de los grandes bombardeos temprano y tardío, favorecieron, muy probablemente, un entorno débilmente reducido, en el que los gases N₂, CO₂, CO, H₂O y en menor medida, CH₄ e H₂ habrían dominado la atmósfera de la Tierra primitiva.

La composición de la atmósfera y el Origen de la Vida

Stanley Miller, estudiante de doctorado de Urey, realizó en 1953 un experimento seminal que constituyó el nacimiento formal de la Química Prebiótica. Simuló una atmósfera formada por una mezcla de metano, amoníaco, hidrógeno y vapor de agua, la atmósfera primitiva postulada por Urey. Simuló grandes tormentas eléctricas mediante descargas generadas por una bobina Tesla, dando como resultado la formación de una abundante cantidad de materia orgánica, de la que separó mediante cromatografía en papel una serie de aminoácidos, con alta concentración de glicina y alanina (Esquema 1). Este experimento abrió las ideas de la abiogénesis u origen químico de la vida al campo de la Ciencia experimental.



Esquema 1. Síntesis de Miller de aminoácidos e hidroxiaácidos a partir de una hipotética atmósfera primordial reducida

Una vez estudiado el experimento de Miller con métodos analíticos modernos, se vio que podían producirse una gran variedad de aminoácidos e hidroxiácidos. El paso fundamental es la formación de cianuro de hidrógeno (Esquema 1),^[10] que posibilita la formación de amino e hidroxiácidos mediante las síntesis de Strecker y de la cianhidrina respectivamente.^[11]

El impacto del experimento de Miller fue enorme, puesto que si asumimos que la atmósfera de la Tierra primitiva tenía la composición propuesta por Urey, la irradiación de ésta atmósfera (ya sea mediante tormentas eléctricas o radiaciones procedentes del Sol y rayos cósmicos) conduciría a un escenario en el que se acumularían grandes cantidades de los componentes básicos de las células vivas.

La propuesta de Rubey y los modelos posteriores constituyeron la primera gran crítica a las implicaciones del experimento de Miller-Urey en el Origen de la Vida, debido a que la eficiencia en la producción de materia orgánica de estas atmósferas oxidadas o débilmente reducidas era mínima. La composición de la atmósfera primitiva de la Tierra es una cuestión esencial para entender el Origen de la Vida sobre nuestro planeta: confirmar que una atmósfera con base de nitrógeno y un contenido significativo en metano daría soporte a los modelos experimentales que explican el origen de moléculas orgánicas fundamentales. El metano atmosférico, en presencia de una fuente de energía (radiación UV o descargas eléctricas) daría lugar a dos reacciones clave: formación de acetileno y formación de cianuro de hidrógeno (Figura 1). La fotoquímica del acetileno en presencia de vapor de agua produce precursores fundamentales, como el ácido glioxílico, y el cianuro de hidrógeno es un precursor de urea, formamida y formiato amónico, que a su vez son esenciales en la formación de bases^[12] e incluso en la Evolución Química hacia la formación del ARN, dado que la urea y el formiato promueven la incorporación de fosfato a moléculas orgánicas y precursores de ARN, como el monofosfato de adenosina.^[13]

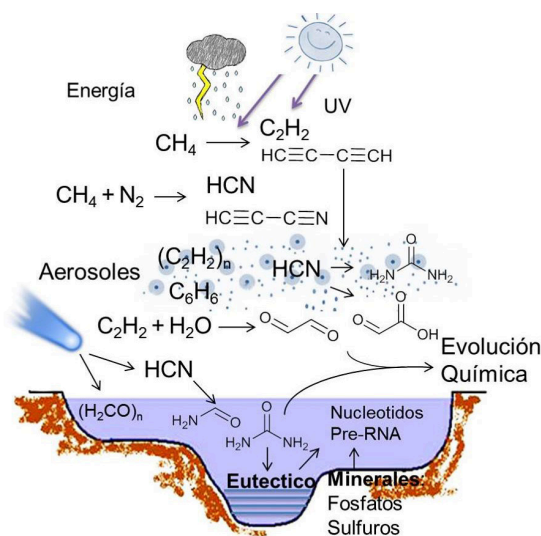


Figura 1. La composición atmosférica es esencial para entender el origen de los precursores de la vida. Las reacciones inducidas por radiación ultravioleta o descargas en una atmósfera de nitrógeno rica en metano pudieron ser los primeros pasos hacia la vida

Evolución de la atmósfera terrestre

La composición de los cuerpos del Sistema Solar y sus atmósferas depende de la zona donde comenzó su proceso de formación por acreción gravitatoria, de tal forma que la distancia cuerpo-estrella y su gradiente térmico juegan un papel fundamental.

Formación de la Tierra (~4.568 – 4.538 Ma)

En el caso de la Tierra, los planetesimales rocosos que formaron parte de la acreción eran ricos en minerales formados a altas temperaturas, empobrecidos en volátiles y conteniendo principalmente óxidos, metales y silicatos.^[14] A nuestro planeta recién formado lo conocemos como proto-Tierra, aquel en el que los procesos de diferenciación planetaria (los materiales más densos se hunden hacia el centro debido a la gravedad, mientras que los más ligeros flotan hacia la corteza) no se habían producido todavía.

Océano de magma (~4.538 – 4.490 Ma)

En los impactos de planetesimales, grandes cantidades de energía fueron liberadas en forma de calor. Este calor derretió la superficie, convirtiéndola en un océano de magma.^[15] La superficie estuvo fundida hasta que la Tierra comenzó a enfriarse debido a la pérdida de gases ligeros al espacio y al hecho de que la luminosidad solar en el rango visible fue significativamente menor que la actual (véase la *Paradoja del joven Sol tenue*).

Podemos identificar tres etapas bien diferenciadas en la historia de la atmósfera de la Tierra: *i*) atmósfera primigenia (reducida); *ii*) atmósfera secundaria (débilmente reductora) y *iii*) atmósfera biótica (Tabla 2).

1. Atmósfera primigenia (~4.490 – 4.400 Ma)

En la actualidad no existe consenso en la comunidad científica sobre la existencia de esta primera atmósfera, debido a la dificultad que tendría para mantener sus gases más ligeros.

El campo magnético planetario es el escudo protector de la atmósfera, el cual evita su erosión y pérdida de agua. Este campo magnético es producido por el efecto dinamo creado a raíz de los movimientos convectivos del núcleo externo terrestre (compuesto de hierro-níquel fundido) y el movimiento de rotación de dicho núcleo debido a la rotación de la Tierra (efecto Coriolis).

Si la Tierra no hubiera tenido un campo magnético estable en sus primeros estadios, los gases escaparían al espacio debido a dos procesos de erosión atmosférica característicos de las fases iniciales de una estrella como el Sol: el intenso viento solar primitivo; y la intensa radiación ultravioleta solar^[16] que dominó la química de la parte alta de la atmósfera. Además de estos dos procesos, los impactos de planetesimales gigantes, como el que pudo dar origen a la formación de la Luna, hace aproximadamente 4.518±10 Ma,^[17] habrían contribuido también a la erosión de la atmósfera primigenia. La existencia de este campo magnético terrestre es apoyada por la evidencia de isótopos de

© 2017 Real Sociedad Española de Química

Tabla 2. Fases de la atmósfera terrestre frente a las eras geológicas

SUPEREON	EON	ERA	ATMÓSFERA	MILLONES AÑOS ATRÁS	EVENTO
FANEROZOICO				~542 - Hoy	Vida animal
PRECAMBRICO	PROTEROZOICO	TARDIO	ATMÓSFERA BIÓTICA	~570	Evento Shuram: enorme impacto que redujo la oblicuidad terrestre
				~582	Glaciación Gaskiers
				~635-582	Periodo interglaciario
		MEDIO		~650-635	Glaciación Marinoan. Multicelularidad (~640 Ma)
				~700-655	Periodo interglaciario
				~730-705	Glaciación Sturtian
	ARCAICO	TEMPRANO		~1.700 - 1.000	Los estromatolitos alcanzan su mayor abundancia y diversidad (~1.200 Ma)
				~1.800	
				~1.900	Atmósfera y fondo oceánico aeróbicos
		TARDIO		~2.000	Fin de glaciación
				~2.400 - 2.100	El aumento de O ₂ consume CH ₄ (además de ser tóxico para los metanógenos), haciendo descender las temperaturas: Glaciación Huronian. Teoría Tierra Bola de Nieve
				~2.400	Gran Evento Oxidativo (GOE): el O ₂ comienza a acumularse en la atmósfera
	HADEANO	TEMPRANO		~2.500	Cianobacterias comienzan a acumular O ₂ en la atmósfera (fotosíntesis)
				~2.800 - 2.500	Condiciones reductoras en los fondos oceánicos (formaciones de hierro bandeado). Primeros estromatolitos contrastados (~2.600 Ma)
				~2.900	Glaciación Pongolian debida a los hidrocarburos acumulados en la atmósfera que apantallaban frente a UV. Teoría Tierra Bola de Nieve
		MEDIO		~3.000	Primeras cianobacterias productoras de O ₂ (fotosíntesis oxigénica). Formación de placas continentales
				~3.400 - 3.100	El metano se ha acumulado en la atmósfera, y la concentración de CO ₂ ha disminuido un orden de magnitud
				~3.500	Primeros fósiles (Strelley Pool, Australia)
HADEANO	TEMPRANO	~3.700 - 3.600	Los metanógenos comienzan a producir metano		
		~3.850	Posibles evidencias de actividad biológica (podrían ser incluso anteriores a 4.100 Ma) al identificarse isótopos de carbono en apatitas: metanógenos que consumirían CO ₂ (descenso de CO ₂ y aumento de CH ₄)		
		~4.100 - 3.900	Gran Bombardeo Tardío (LHB): aporte de grandes cantidades de H ₂ O y abundante vulcanismo (grandes cantidades de CO ₂ a la atmósfera).		
	HADEANO	~4.200	Clima Templado		
		~4.400	Formación de océano de agua líquida (datos isótopos en granos de circones), gracias a que el CO ₂ compensa el joven Sol tenue		
		~4.400	Gran Bombardeo Temprano (incorporación de H ₂ O y orgánicos procedentes de asteroides carbonáceos). El CO ₂ (volcanes), compensa la paradoja del joven Sol tenue: la Tierra se enfría pero más lentamente (agua líquida)		
		ATMÓSFERA SECUNDARIA (débilmente reductora)	~4.490	Tierra formada: núcleo y corteza (diferenciación planetaria). Primera atmósfera: H ₂ , CO ₂ y H ₂ O. Muy inestable por la pérdida de gases ligeros al espacio, lo que conlleva, sumado a una menor luminosidad solar en el visible, un enfriamiento de la Tierra	
		ATMÓSFERA PRIMARIA (reductora)	~4.518±10	Gran impacto que formó la Luna	
			~4.538	Proto-Tierra formada. Formación de océano de magma debido al elevado calor de las colisiones (que enterran CO ₂)	
			~4.568	Origen del Sistema Solar (elementos más antiguos, las CAIs). Comienza el proceso de formación de la Tierra agregando planetesimales	

nitrógeno en el suelo e implica una evolución atmosférica desde la formación del planeta.^[18] Estos circones proceden de la zona Jack Hills del terreno Narryer Gneis, al oeste de Australia.

Por tanto, de haber existido, la atmósfera primigenia habría tardado en constituirse alrededor de 50 Ma desde la formación de la proto-Tierra, tiempo necesario para la desgasificación de los gases enterrados en el proceso de formación del núcleo terrestre. Esta atmósfera estaría por tanto dominada por gases reductores procedentes de la nebulosa solar (principalmente H₂) y los emitidos por actividad volcánica (CO₂ y H₂O).

La pérdida de H₂ primigenio al espacio está aún bajo debate. Mientras que Tian y colaboradores defienden que la atmósfera primitiva era rica en este gas (con una presión parcial de aproximadamente 0.1 bar) debido a su supuesto lento escape hidrodinámico al espacio,^[19] Catling^[9] argumenta que su pérdida fue considerable, y no debería considerarse su contribución a la posterior evolución atmosférica.

2. Atmósfera secundaria (~4.400 – 3.400 Ma)

Entendemos como atmósfera secundaria aquella en la que, aun habiendo surgido la vida en la Tierra a lo largo de dicho período (hace aproximadamente ~4.000-3.800 Ma), su impacto sobre la atmósfera no fue apreciable.

Esta atmósfera secundaria se formó al añadirse paulatinamente gases procedentes del manto y los aportados en los impactos estocásticos de planetesimales rocosos, vaporizados en la colisión, concretamente en los Grandes Bombardeos Temprano y Tardío. Estos gases pudieron ser H₂O, CO, CO₂ e H₂.^[20] A medida que las plumas de impacto se enfriaron, se pudieron haber formado moléculas mayores como HCN, NH₃ y CH₄.

Bombardeo temprano (4.400 – 3.800 Ma)

La rápida formación del núcleo de la Tierra debió dejar el manto carente de elementos siderófilos (como el oro y el platino), sin embargo muestras estudiadas de la Luna y el manto de la Tierra revelan inesperadas concentraciones

de estos elementos casi idénticas a las identificadas en los meteoritos de tipo condriticos.^[21] Una explicación a estas elevadas concentraciones podría ser que, durante las últimas etapas de la acreción planetaria y después de que el núcleo terrestre y la Luna se hubieran formado, el manto hubiera recibido un aporte considerable de cuerpos ricos en material siderófilo, principalmente asteroides condriticos carbonáceos y cometas. Denominamos al proceso *el Bombardeo Temprano* (*Late Veneer*, Figura 2). En la Figura 2 se puede apreciar como hay zonas del manto actual que tienen un enriquecimiento de wolframio similar al del manto primitivo ($\epsilon_w = 0.15$). Estas zonas podrían haber “sobrevivido” al Bombardeo Temprano, es decir, que no habrían sido enriquecidas con agua y volátiles en la misma proporción que el resto.

El origen del Bombardeo Temprano pudo ser la migración planetaria de Júpiter, que fue atraído gravitacionalmente por los planetesimales del disco interior del Sistema Solar, atravesando el cinturón de asteroides y desplazando los asteroides de tipo cometario (condritas carbonáceas) desde la zona exterior del cinturón hacia el interior del Sistema Solar.^[22]

Estudios en zircones del Hadeano, sugieren que la primera corteza continental solidificada se formó entre 90 y 160 Ma^[23] después del impacto que originó la Luna, por lo que se deduce que el Bombardeo Temprano tuvo que iniciarse hace aproximadamente 4.400 Ma^[24] y duró unos 500 Ma finalizando de forma catastrófica con el Gran Bombardeo Tardío, hace 3.900-3.800 Ma.^[25]

Durante este período se añadieron a la atmósfera ingredientes volátiles esenciales para el origen de la vida^[26] como agua, CO, CO₂, y CH₄, además de NH₃, HCN y C₂H₂. Un indicio de ello es que estos compuestos se han encontrado en los cometas estudiados hoy en día, como es el caso

del cometa Churyumov-Gerasimenko.^[27] La presencia de acetileno, cianuro de hidrógeno y metano está en consonancia con nuestros modelos de Química Prebiótica. Los volátiles como el H₂O y el CO₂ se disolvieron en fluidos magmáticos, degasificándose posteriormente a través de los volcanes como demuestran las observaciones de helio primordial desgasificado en las dorsales oceánicas.^[28]

Océanos de agua líquida (~4.400 Ma)

El registro geológico de la época en la que pudo haber una atmósfera primigenia es prácticamente inexistente, aunque hay evidencias de algunos granos de zircón con 4.404 Ma de antigüedad,^[29] lo que sugiere que la corteza terrestre se podría haber constituido unos 140 Ma después de la formación del planeta. El estudio isotópico del oxígeno de estos granos de zircón indica un origen magmático evolucionado del mineral, confirmando su interacción con una hidrosfera líquida a baja temperatura durante su formación.^[30] Con estos datos podemos intuir el siguiente escenario hace unos 4.400 Ma: la existencia de una corteza continental con océanos de agua líquida, el consecuente enfriamiento del océano de magma y nubes de vapor de agua en las capas bajas de la atmósfera.

Estas condiciones relativamente favorables sugieren un planeta potencialmente habitable y aumentan las probabilidades de una biosfera en el Hadeano. La procedencia del agua terrestre sigue siendo un tema en discusión. Existen dos corrientes diferenciadas para tratar de explicarla, una mas tradicional que posiciona el origen del agua en cometas y asteroides agregados en los grandes Bombardeos Temprano y Tardío, y otra más reciente defendiendo que el agua ya se encontraba en los planetesimales que formaron la proto-Tierra.

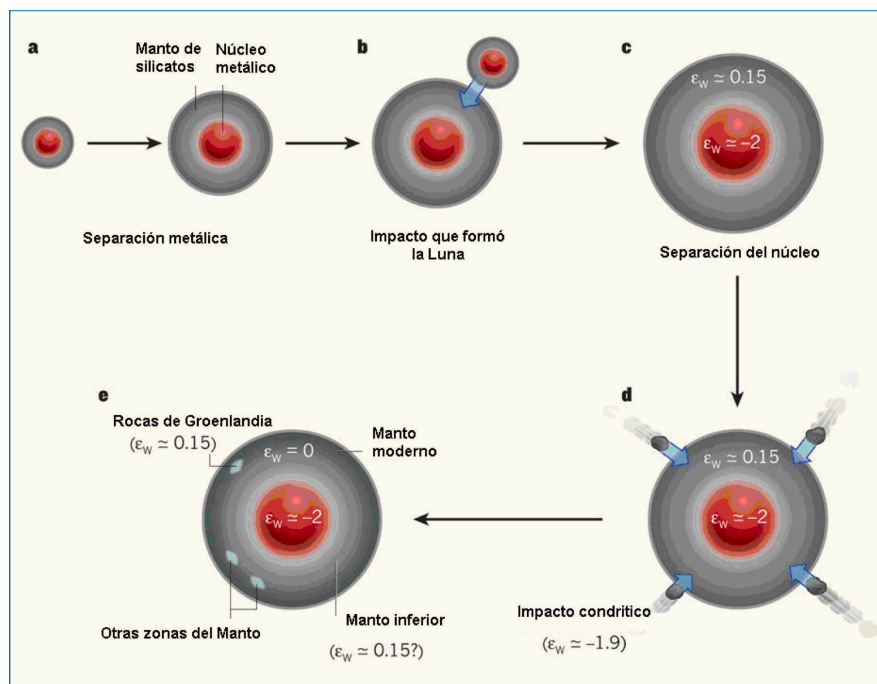


Figura 2. Bombardeo temprano.^[29] El enriquecimiento en wolframio (ϵ_w), como indicador del enriquecimiento en elementos siderófilos, es un dato clave explicado por el aporte de material en un intenso bombardeo meteorítico. Adaptado de Kleine *et al.* 2011^[25]

Gran Bombardeo Tardío (~4.100–3.900 Ma)

Se conoce como Gran Bombardeo Tardío (*Late Heavy Bombardment* o LHB) el evento puntual en el que los cuerpos interiores del Sistema Solar fueron bombardeados por planetesimales, especialmente cometesimales procedentes de las regiones externas, añadiendo más contenido de volátiles al ya aportado por el Bombardeo Temprano.^[31]

El modelo más aceptado para explicar el Gran Bombardeo Tardío es el modelo de Niza,^[32] según el cual este evento se produjo de forma puntual debido a que una resonancia entre las órbitas de Júpiter y Saturno originó una inestabilidad en los cuerpos de las regiones externas del Sistema Solar: Neptuno adelantó a Urano y ambos permutaron sus posiciones desplazando sus órbitas hacia las regiones exteriores perturbando a los objetos helados de esta zona, muchos de los cuales se precipitaron hacia el interior del Sistema Solar. Una consecuencia directa de este acontecimiento podría ser la gran similitud química de la Tierra y la luna de Saturno Titán, ya que ambos habrían recibido un aporte similar de volátiles de estos cuerpos helados migrados.^[33]

Recientes investigaciones en lechos con esférulas de impacto procedentes de asteroides del cinturón E sugieren que el LHB, en lugar de producirse de forma puntual, se extendió por todo el Arcaico y Proterozoico temprano, terminando aproximadamente hace 1.700 Ma. Se han encontrado al menos siete lechos de esférulas con una antigüedad de entre 3.470 y 3.230 Ma, cuatro entre 2.630 y 2.490 Ma y una entre 2.100 y 1.700 Ma.^[34]

Emisión de gases oxidados por vulcanismo

La rápida formación de la litosfera terrestre refuerza la teoría de una transición rápida de una atmósfera reducida débilmente reductora, debido al enterramiento de hierro, agua y carbonatos hacia el núcleo, desgasificados poco después en la litosfera a través de los volcanes. Los principales gases emitidos fueron N_2 , CO_2 y H_2O .

El CO_2 aportado por vulcanismo fue acumulándose en la atmósfera, debido a que su proceso de eliminación, la carbonatación (proceso en el que el CO_2 atmosférico es arrastrado por la lluvia y fijado en forma de carbonatos), era prácticamente inexistente por dos motivos:

- El área de los continentes era más reducida en aquella época, por tanto también lo fue el área de exposición de minerales a la carbonatación.
- La intensidad de las lluvias, que arrastra el CO_2 a la superficie era muy débil.

Primeros microorganismos (~4.100 Ma)

Hoy en día hay consenso en la comunidad científica en cuanto al período aproximado en el que apareció la vida en la Tierra. Este se suele acotar entre 4.500 y 3.850 Ma.^[35] De hecho los fósiles más antiguos conocidos hasta la fecha, descubiertos en la formación Strelley Pool de Australia,^[36] tienen una antigüedad de 3.400 Ma. Estos fósiles de complejos microorganismos sugieren que la vida debió surgir mucho antes debido al tiempo requerido para evolucionar hasta esa complejidad.

A partir de los estudios llevados a cabo en apatitos de la isla Akilia en Groenlandia,^[37] se sospecha que la vida en la Tierra podría haber aparecido hace más de 3.850 Ma, aunque algunos autores lo ponen en duda.^[38] El carbonato presente en éstos minerales muestra un enriquecimiento en carbono-12 que podría explicarse como la consecuencia de actividad biológica en este período, si bien los resultados no son concluyentes. En la misma línea, una reciente investigación sugiere que la vida podría haber estado presente hace 4.100 Ma, según los estudios de la composición isotópica de carbono en zircones que podría ser compatible con actividad biológica,^[39] aunque la comunidad científica se encuentra dividida al respecto.

Para evaluar el volumen habitable en superficie y subsuelo de una posible biosfera de microbios primordiales (como por ejemplo bacterias hipertermofílicas), se han desarrollado simulaciones numéricas del grado de metamorfismo térmico de la corteza terrestre durante el Gran Bombardeo Tardío.^[40] Los resultados muestran que no hay ningún escenario plausible en el que la Tierra fuera completamente esterilizada, al menos desde el final de la acreción primaria planetaria y el supuesto impacto que posiblemente formó la Luna. Por tanto la vida pudo haberse formado antes o durante los bombardeos. Aunque no existen registros fósiles de estas formas de vida primordiales, los microbiólogos tienen razones para pensar que los primeros seres vivos eran procariotas metanógenos anaerobios que utilizaban gases de origen volcánico (CO_2 e H_2) como aceptor y donador de electrones y produciendo como desecho grandes cantidades de CH_4 .^[41] En la atmósfera actual, el CH_4 tiene un tiempo de vida corto, de tan sólo 10 años debido a su fotólisis (destrucción) en presencia de oxígeno, pero en la atmósfera secundaria debido a la ausencia de O_2 , la fotólisis del metano es más lenta, con un tiempo de vida del CH_4 de unos 10.000 años. Por este motivo los organismos metanógenos pudieron mantener los niveles atmosféricos mil veces más altos que los actuales.^[8]

Estos organismos unicelulares debieron haber vivido en los océanos u otros ambientes protegidos de la letal radiación UV solar, ya que la superficie debió estar expuesta a esta radiación altamente energética por la ausencia de ozono atmosférico que hace el papel de escudo protector en la actualidad.

Existen registros geológicos que evidencian un descenso considerable del CO_2 atmosférico hace unos 3.500 Ma, que probablemente responda al citado aumento del CH_4 atmosférico.^[42] Este ascenso de CH_4 habría elevado la temperatura de la Tierra (ya que es un eficiente gas de efecto invernadero), intensificando las lluvias, las cuales favorecen la eliminación del CO_2 atmosférico por fijación en rocas carbonatadas.

Cabe destacar que en esta época también hubo otras fuentes de CH_4 de origen abiótico como los impactos de planetesimales y la interacción del agua marina rica en CO_2 con las rocas ultramáficas (rocas ígneas con poco sílice, ricas en olivino, silicato de hierro y magnesio), proceso denominado serpentización, que tiene lugar en los sistemas de circulación hidrotermal de las dorsales oceánicas.^[43]

Con el tiempo los niveles de CO_2 fueron decreciendo debido a un aumento de la tasa de CH_4 en la atmósfera y al crecimiento del área de los continentes que favorece su eliminación (se favorece la mencionada carbonatación).

Un estudio llevado a cabo en afloramientos de dacita en Sudáfrica muy bien preservados (3.500 Ma) revela que la pérdida de volátiles en la exosfera, bajo condiciones de un campo magnético entre un 50 y un 70% más débil que el actual, habría afectado a la composición atmosférica en torno a 3.450 – 3.400 Ma.^[44]

3. Atmósfera biótica (~3.300 Ma – hoy)

Unos 500-600 Ma después de su aparición, la presencia de vida modificó considerablemente las condiciones de la atmósfera. El desarrollo, evolución y crecimiento de la vida en la superficie terrestre ha ido incrementando la cantidad de O_2 en la atmósfera, desde un 1% hasta el 21% de la actualidad.

Fotosíntesis oxigénica (~3.000 - 2.500 Ma)

Este período, que habría coincidido con la era geológica del Arcaico Tardío, es de especial interés porque en él se piensa^[45] que evolucionaron los primeros organismos generadores de O_2 (cianobacterias) iniciándose la fotosíntesis oxigénica.^[46] Aunque este fue el primer período de la historia terrestre en el que el oxígeno comenzó a liberarse a la atmósfera, la cantidad total acumulada en ella era todavía muy baja.

El O_2 se acumula en la atmósfera (~2.400 Ma)

En la actualidad, la comunidad científica acepta que el momento de la historia terrestre donde el O_2 alcanzó niveles considerables en la atmósfera, denominado Gran Evento Oxidativo (Great Oxidation Event o GOE), fue hace aproximadamente 2.400 Ma, coincidiendo con el final del Arcaico Tardío y el comienzo del Proterozoico Temprano.^[5]

Aunque existen cianobacterias fotosintéticas generando oxígeno desde hace 3.000 Ma, no se desencadenó el GOE hasta que, 600 Ma después, tuvo lugar una intensa proliferación de bacterias y posiblemente el nacimiento de los primeros eucariotas.^[47] Se liberaron grandes cantidades de O_2 , que fueron modificando el carácter reductor de la superficie de los océanos y de la propia atmósfera hacia uno cada vez más oxidante. Una evidencia de la oxidación de la atmósfera es la interrupción de la formación de hierro bandeado (BIFs por sus siglas en inglés).^[48]

Este incremento de O_2 atmosférico consumió enormes cantidades de CH_4 por recombinación fotoquímica. Al ser el CH_4 un eficiente gas de efecto invernadero, su drástico descenso desencadenó una nueva glaciación hace aproximadamente 2.400 Ma, como puede comprobarse en el registro geológico del Supergrupo Huronian,^[49] con la presencia de óxido férrico (evidenciando alto contenido de O_2) sobre el material glaciario.

El aumento drástico de O_2 atmosférico implica el incremento de ozono, debido a la fotodisociación de la

molécula de oxígeno (O_2) por efecto de la luz, dando lugar a dos partículas de oxígeno atómico (O) las cuales se recombinan con el oxígeno molecular (O_2) para formar ozono (O_3), actuando este como escudo protector de la letal radiación UV solar, permitiendo la vida sobre la superficie terrestre en lugar de restringirla solo al fondo de los océanos.

Importancia del nitrógeno en la atmósfera primitiva.

El nitrógeno cumple un papel primordial para el desarrollo de la vida en la Tierra, formando parte de los ácidos nucleicos, aminoácidos y proteínas. En la atmósfera actual es un elemento tan común (78%) gracias a la inercia química del N_2 . El nitrógeno no puede ser asimilado directamente por la mayoría de los organismos, por eso se hace imprescindible su fijación en la biosfera. Entendemos por fijación de nitrógeno la combinación de nitrógeno molecular (N_2) con O_2 o H_2 para generar óxidos (como el NO) o amonio asimilables por los seres vivos. Dicha fijación puede realizarse de forma biótica o abiótica.

Al parecer, un cambio en las condiciones ambientales de la Tierra primitiva produjo el cambio de fijación abiótica a fijación biótica del nitrógeno:^[50] durante los primeros 1.000 Ma, la concentración de nitrógeno sería similar a la actual y la de O_2 despreciable, sin embargo se produciría NO gracias a la disociación fotoquímica del CO_2 y H_2O . Recordemos que en este período la concentración de CO_2 era considerablemente alta. El posterior descenso del CO_2 , en el período comprendido entre 3.800-3.500 Ma, produjo una disminución drástica en la tasa de formación de NO. Parece que durante éste período de descenso en la formación de óxidos de nitrógeno tuvo lugar la evolución de las rutas bioquímicas de fijación de nitrógeno.^[51]

Atmósfera y cambios climáticos: las glaciaciones del precámbrico

Glaciación Pongola (~3.000 – 2.800 Ma)

La aparición de esta glaciación pudo ser debida al aumento de metano atmosférico, que alcanzó una proporción $\text{CH}_4/\text{CO}_2 > 1$ formando fotoquímicamente hidrocarburos complejos.^[52] Estos hidrocarburos complejos habrían producido un apantallamiento de la atmósfera absorbiendo la radiación solar incidente y remitiéndola hacia el espacio, enfriando la Tierra e induciendo una era glacial. Este apantallamiento queda evidenciado en los estudios del MIF (Mass Independent Fractionation) de los isótopos de azufre en minerales. El MIF sólo sucede cuando la radiación ultravioleta rompe el SO_2 elevando los valores de fraccionamiento en los minerales sulfurados, lo que se conoce como un MIF elevado. Sólo un apantallamiento que proteja frente a esta radiación hace descender los valores de MIF drásticamente, evidenciando ausencia de fraccionamiento. Por lo tanto, se asocia un MIF bajo a un fuerte apantallamiento atmosférico frente a la radiación solar (por ejemplo en una glaciación) y un MIF elevado a la ausencia de apantallamiento.^[46]

Intervalo interglacial (~2.800 – 2.400 Ma)

En el intervalo entre ambas glaciaciones, el registro geológico nos muestra de nuevo un MIF elevado, debido muy probablemente a que muchos organismos metanógenos perecieron por las bajas temperaturas. Este descenso de metanógenos redundó en una disminución de hidrocarburos complejos que apantallan frente a la radiación solar, volviendo a calentar la Tierra. Además, al descender el nivel de CH₄, la proporción CO₂/CH₄ volvería a exceder la unidad haciendo de dicha combinación una eficiente retroalimentación positiva del efecto invernadero.

Glaciación Huroniana (~2.400 – 2.100 Ma)

Esta segunda glaciación esta mejor caracterizada geológicamente y pudo haberse producido por la mencionada destrucción de CH₄ atmosférico. La reducción significativa en la tasa de desgasificación de los volcanes hace entre 2.600 y 2.400 Ma^[52] combinada con la emergencia de nuevos continentes, pudo haber generado unos niveles más bajos de CO₂ que permitieron al O₂ atmosférico destruir grandes cantidades del CH₄ recientemente aparecido, lo que disminuyó el efecto invernadero de la Tierra además de incrementar el ozono atmosférico (O₃) el cual realiza un eficiente apantallamiento, produciendo como era de esperar que los valores de MIF se mantuvieran muy bajos desde entonces hasta la actualidad.

Glaciaciones del neoproterozoico

Durante esta era se producen las glaciaciones Sturtian (~730-705 Ma), Marinoan (~650-635 Ma) y Gaskiers (~582 Ma).

Glaciaciones posteriores

Aunque se excede del objetivo de este artículo, merece la pena mencionar que las glaciaciones posteriores se desarrollaron en latitudes altas manteniendo la totalidad de la superficie del planeta congelada en lugar de solo las zonas ecuatoriales (teoría “Tierra bola de nieve”). Este cambio en el sistema climático coincide con el mayor descenso de δ¹³C registrado, denominado evento *Shuram*, interpretado como el resultado de un impacto enorme que disminuyó la oblicuidad de la eclíptica terrestre haciendo que el sistema climático de la Tierra adoptara su configuración actual.^[52]

Algunas cuestiones abiertas

Paradoja del joven Sol tenue

La presencia de agua líquida hace 4.400 Ma, poco después de que la Tierra se formase, y las evidencias de vida primitiva durante el Arcaico plantean un serio problema: los estudios de evolución estelar concluyen que debido a una progresiva acumulación de helio en el núcleo de nuestra estrella, su luminosidad en el rango visible debió ser un 30% más débil durante el Hadeano y Arcaico que en la actualidad (a diferencia de la radiación EUV, la radiación visible del Sol se incrementa con la edad)^[54] y no habría proporcionado suficiente calor para mantener agua líquida en la superficie. Este dilema se conoce como paradoja del

joven Sol tenue (faint young Sun paradox), y ha motivado la publicación de numerosas hipótesis intentando resolverlo. Esta idea fue introducida por primera vez en 1972.^[7] Las consecuencias para el clima de la Tierra son claras: si la composición de su atmósfera no hubiera cambiado a lo largo de su historia, la temperatura media superficial habría estado por debajo del punto de congelación del agua los primeros 2.000 Ma.

Una de las hipótesis más aceptadas es que la Tierra se sobrecalentó debido a que fue víctima de un efecto invernadero descontrolado: el CO₂ (uno de los principales gases emitidos por los volcanes) junto con otros gases de efecto invernadero como el metano y, posiblemente el etano, pudieron compensar la bajada de temperaturas debido a la menor luminosidad solar.^[41]

Los cambios en el albedo terrestre también han sido propuestos como posible explicación a la paradoja del joven Sol tenue.^[55] Sin embargo, es poco probable que este cambio en el albedo hubiera sido capaz por sí solo de mantener la Tierra primitiva caliente.

El CO₂ y vapor de agua atmosféricos pudieron haber proporcionado suficiente calentamiento, sin embargo, estudios en paleosuelos (suelos fósiles) sugieren que las concentraciones de CO₂ fueron menores a los 0,1 bares o 300 veces el nivel atmosférico actual (PAL, present atmospheric level) necesarios para mantener el calentamiento. Además, la concentración de vapor de agua en la atmósfera esta limitada por su presión de saturación. La cantidad requerida de CO₂ atmosférico podría reducirse hasta los 0,02 bares si se añaden 1.000 ppm (partes por millón) de metano, lo que parece razonable si los metanógenos fueran una parte importante del ecosistema del Arcaico, como sugieren algunos estudios.^[28]

La presión parcial de CO₂ podría reducirse en un factor 2 si la presión parcial del N₂ hubiera sido considerablemente mayor, como sugiere otro estudio.^[56] Esto colocaría los valores de CO₂ en 30 PAL, encajando en los valores de entre 10 y 50 PAL estimados por los estudios geológicos en paleosuelos de 2.700 Ma.^[57]

¿Paradoja resuelta?

Otros estudios^[58] sugieren que, un clima Arcaico más templado con importantes casquetes polares pero dominado por océanos abiertos es plausible con modestas cantidades de gases de efecto invernadero (CO₂≈0,02 bares y CH₄≈0,001 bares), cantidades que están en concordancia con las estimaciones de CO₂ en paleosuelos y las cantidades de CH₄ estimadas debido a la formación de una capa de orgánicos ópticamente gruesa durante el Arcaico. Este clima más benévolo en la Tierra primitiva favorece la química prebiótica ya que la presencia de interfases hielo-agua en casquetes polares fomenta la formación de precursores orgánicos de la vida y los protegería de la degradación.^[12]

La incorporación de elementos en el sistema climático del Arcaico pueden proporcionar entre 10 y 20 °C de calentamiento adicional en la superficie si se incluyen en la atmósfera otros gases de efecto invernadero.^[7]

Se sospecha que en las etapas prebióticas, el N₂ atmosférico era alrededor de 2-3 PAL debido a la imposibilidad de

ser fijado (enterrado de la corteza al manto) biológicamente. En la misma línea, un estudio en fósiles de gotas de lluvia con una edad de 2.700 Ma sugiere que la densidad del aire de la atmósfera primitiva era casi el doble que la actual.^[59]

Todas estas posibles soluciones, junto con los estudios de temperatura de paleocéanos,^[60] podrían haber resuelto la paradoja del joven Sol tenue.

Concentración inicial de CO₂ menor a la esperada

Aunque a través de los volcanes se desgasificó gran cantidad de CO₂ procedente de los volátiles disueltos en silicatos tras los impactos, parece poco plausible que existiera una atmósfera primitiva de entre 60 y 80 bares de CO₂ como sugerían las estimaciones basadas en la masa de rocas carbonatadas^[61] por varias razones:

- La presencia de un océano de agua líquida hace 4.300 Ma, invita a pensar en una atmósfera previa más pobre en CO₂, ya que de lo contrario el efecto invernadero que hubiera producido habría impedido el rápido enfriamiento del océano de magma.^[62]
- Una atmósfera pobre en CO₂ y rica en CH₄ redundaría en una Química Prebiótica más rica. Es posible que esto favorecería la aparición de la vida.
- Según estimaciones del flujo de CO₂ entre la corteza oceánica y el manto estudiado en minerales del Arcaico, la corteza oceánica es capaz de recoger el equivalente a 10 bar de CO₂ atmosférico. Este estudio sugiere por tanto una concentración de CO₂ inferior a 10 PAL.^[63]
- Las conclusiones anteriores se han visto reforzadas gracias a las mismas conclusiones obtenidas al estudiar el intercambio de CO₂ entre el agua del océano y la corteza oceánica, evidenciando también una concentración de CO₂ < 10 PAL.^[64]
- Otros estudios en paleosuelos estiman una concentración de CO₂ entre 10-50 PAL.^[57]

Suponiendo que la concentración de CO₂ no fue tan elevada como se presumía en un primer momento (podríamos concluir que estaría entre 10 y 50 PAL), la temperatura podría haber sido lo suficientemente alta como para permitir la presencia de agua líquida y lo suficientemente baja para permitir temperaturas como las actuales, lo que sería consistente con la existencia de puntuales episodios glaciares durante el Arcaico y redundaría en un medio más favorable para la aparición de la vida.

Temperatura del Arcaico: ¿templada o muy caliente?

Según algunos investigadores, las altas temperaturas del Arcaico son confirmadas por las siguientes evidencias:

- La baja concentración de ¹⁸O en rocas sedimentarias y la viscosidad estudiada en paleocéanos son consistentes con un clima Arcaico muy caliente^[65] (> 70°C).
- El estudio mediante técnicas bioinformáticas en secuencias moleculares bien conservadas sugieren que los primeros organismos surgieron en un ambiente con temperaturas muy cálidas.^[66]

- El retraso en la aparición de grandes grupos de organismos podría explicarse por las altas temperaturas.
- Un Arcaico frío es difícil de explicar teniendo en cuenta las elevadas tasas de desgasificación de CO₂ y su menor tasa de eliminación por meteorización.
- No sabemos si la tectónica de placas funcionó en el Arcaico como lo hace hoy, por esta razón la teoría de una baja concentración de CO₂ atmosférico debido a una fuerte subducción es controvertida.

Sin embargo otros estudios parecen demostrar que la temperatura del Arcaico fue más bien templada:

- Estudios en clastos de cuarzo no muestran disgregación como se esperaría si hubieran estado sometidos a altas temperaturas (~70 °C).^[63]
- Un Arcaico caliente es difícil de reproducir con modelos climáticos de Tierra primitiva, incluso en escenarios extremos con 0,2 bares de CO₂ y 0,001 bares de CH₄.^[58]
- Evidencias geológicas de períodos glaciares hace 2.400 y 2.900 Ma parecen indicar que en esas épocas la temperatura fue relativamente baja, probablemente inferior a 20 °C (unos 15 °C de media, la misma que en la actualidad). Según Kasting, es poco probable que la temperatura superficial oscilara 50 grados varias veces, por lo que el clima debió ser templado.^[67]
- El estudio de muestras de sistemas hidrotermales de 3.500 Ma preservados en el yacimiento de Barberton, sugieren temperaturas templadas con zonas glaciares.^[68]
- Pavlov y Kasting realizaron simulaciones con diferentes proporciones de CO₂/CH₄ para diferentes temperaturas superficiales, concluyendo que una atmósfera secundaria muy caliente con 2-3 bares de CO₂ y un porcentaje atmosférico del 0,01% de CH₄ es poco plausible, ya que una elevada concentración de CO₂ hubiera producido un pH de 3,7 en el agua de lluvia, en contradicción con lo que indica el registro geológico.^[69]

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Oparin, A. I. (1938). *The origin of life*. Sergius Morgulis Trans.
- [2] Urey, H. C. (1952). *The planets, their origin and development*, Yale Univ. Press, New Haven.
- [3] Rubey, W. W. (1951). "Geologic history of sea water an attempt to state the problem". *Geological Society of America Bulletin*, 62 (9), 1111-1148.
- [4] Ohmoto, H., & Salvan, C. M. (2010). *Origin of Life in Fe-poor Oceans Under a CH₄-rich and SO₂-poor Atmosphere: I. Theoretical Approach*. LPI Contributions, 1538, 5473.
- [5] Holland, H. D. (1994). *Early Proterozoic atmospheric change. In Early life on Earth* (vol. 84, 237-244). Columbia University Press, New York.
- [6] Walker, J. C. (1977). *Evolution of the Atmosphere*. New York: Macmillan, and London: Collier Macmillan.

- [7] Sagan, C., & Mullen, G. (1972). "Earth and Mars: Evolution of atmospheres and surface temperatures". *Science*, 177 (4043), 52-56.
- [8] Kasting, J. F. (2008). *The primitive earth. Prebiotic Evolution and Astrobiology*, edited by J. Tze-Fei Wong and A. Lazcano, Landes Bioscience, Austin, TX, 1-8.
- [9] Catling, D. C. (2006). Comment on "A hydrogen-rich early Earth atmosphere". *Science*, 311(5757), 38a-38a.
- [10] a) Miller, S. L. (1953). "A production of amino acids under possible primitive earth conditions". *Science*, 117 (3046), 528-529.; b) Miller, S. L., & Urey, H. C. (1959). "Organic compound syntheses on the primitive earth". *Science*, 130 (3370), 245-251.
- [11] Menor-Salván, C. (2013, April). "La química del origen de la vida". *Anales de Química* (vol. 109, No. 2).
- [12] Menor-Salván, C., & Marín-Yaseli, M. R. (2013). "A new route for the prebiotic synthesis of nucleobases and hydantoin in water/ice solutions involving the photochemistry of acetylene". *Chemistry-A European Journal*, 19 (20), 6488-6497.
- [13] Burcar, B., Pasek, M., Gull, M., Cafferty, B. J., Velasco, F., Hud, N. V., & Menor-Salván, C. (2016). "Darwin's Warm Little Pond: A One-Pot Reaction for Prebiotic Phosphorylation and the Mobilization of Phosphate from Minerals in a Urea-Based Solvent". *Angewandte Chemie International Edition*, 55 (42), 13249-13253.
- [14] Anders, E., & Grevesse, N. (1989). "Abundances of the elements: Meteoritic and solar". *Geochimica et Cosmochimica acta*, 53 (1), 197-214.
- [15] Solomatov, V. S. (2000). "Fluid dynamics of a terrestrial magma ocean". *Origin of the Earth and Moon*, 1, 323-338.
- [16] a) Ribas, I., Guinan, E. F., Güdel, M., & Audard, M. (2005). "Evolution of the solar activity over time and effects on planetary atmospheres. I. High-energy irradiances (1-1700 Å)". *The Astrophysical Journal*, 622 (1), 680.; b) Ayres, T. R. (1997). "Evolution of the solar ionizing flux". *Journal of Geophysical Research: Planets*, 102 (E1), 1641-1651.
- [17] Canup R. M. (2012). "Forming a Moon with an Earth-like composition via a giant impact". *Science*, 338 (6110), 1052-1055.
- [18] Tarduno J. A., Cottrell R. D., Davis W. J., Nimmo F. & Bono R. K. (2015). "A Hadean to Paleoproterozoic geodynamo recorded by single zircon crystals". *Science*, 349 (6247), 521-524.
- [19] Tian F., Toon O. B., Pavlov A. A., & De Sterck H. (2005). "A hydrogen-rich early Earth atmosphere". *Science*, 308 (5724), 1014-1017.
- [20] Schaefer L., & B. Fegley B. (2007). "Outgassing of ordinary chondritic material and some of its implications for the chemistry of asteroids, planets, and satellites". *Icarus*, 186 (2), 462-483.
- [21] Brennan J. M. & McDonough W. F. (2009). "Core formation and metal-silicate fractionation of osmium and iridium from gold". *Nature Geoscience*, 2 (11), 798-801.
- [22] Walsh K. J., Morbidelli A., Raymond S. N., O'Brien D. P., & Mandell A. M. (2011). "A low mass for Mars from Jupiter's early gas-driven migration". *Nature*, 475 (7355), 206-209.
- [23] Harrison T. M. (2009). "The Hadean crust: evidence from > 4 Ga zircons. Annual Review of Earth and Planetary". *Sciences*, 37, 479-505.
- [24] Frank E. A., Maier W. D. & Mojzsis S. J. (2012). *The "late veneer" on Earth: Evidence from Eoarchean ultramafic schists (metakomatiites)*. In 43 rd Lunar and Planetary Science Conference (Vol. 2890).
- [25] Kleine K. (2011). "Geoscience: Earth's patchy late veneer". *Nature*, 477 (7363), 168-169.
- [26] Campins H. & Drake M. J. (2010). 15 Sources of Terrestrial and Martian Water. Water and Life: The Unique Properties of H₂O, 221.
- [27] a) Goesmann F. *et al.* (2015). "Organic compounds on comet 67P/Churyumov-Gerasimenko revealed by COSAC mass spectrometry". *Science*, 349 (6247), aab0689; b) Le Roy L. *et al.* (2015). Inventory of the volatiles on comet 67P/Churyumov-Gerasimenko from Rosetta/ROSINA. *Astronomy & Astrophysics*, 583, A1.
- [28] Kasting J. F. & Catling D. (2003). "Evolution of a habitable planet". *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 41 (1), 429-463.
- [29] a) Wilde S. A., Valley J. W., Peck W. H. & Graham C. M. (2001). "Evidence from detrital zircons for the existence of continental crust and oceans on the Earth 4.4 Gyr ago". *Nature*, 409 (6817), 175-178; b) Holden, P., Lanc, P., Ireland, T. R., Harrison, T. M., Foster, J. J., & Bruce, Z. (2009). "Mass-spectrometric mining of Hadean zircons by automated SHRIMP multicollector and single-collector U/Pb zircon age dating: the first 100,000 grains". *Journal of Mass Spectrometry*, 286 (2), 53-63.
- [30] Mojzsis S. J., Harrison T. M. & Pidgeon R. T. (2001). "Oxygen-isotope evidence from ancient zircons for liquid water at the Earth's surface 4,300 Myr ago". *Nature*, 409 (6817), 178-181.
- [31] Chyba, C., & Sagan, C. (1992). "Endogenous production, exogenous delivery and impact-shock synthesis of organic molecules: an inventory for the origins of life". *Nature*, 355 (6356), 125.
- [32] Gomes R., Levison H. F., Tsiganis K. & Morbidelli A. (2005). "Origin of the cataclysmic Late Heavy Bombardment period of the terrestrial planets". *Nature*, 435 (7041), 466-469.
- [33] Raulin F., Brasse C., Poch O. & Coll P. (2012). "Prebiotic-like chemistry on Titan". *Chemical Society Reviews*, 41 (16), 5380-5393.
- [34] Bottke, W. F., Vokrouhlický, D., Minton, D., Nesvorný, D., Morbidelli, A., Brasser, R. & Levison, H. F. (2012). "An Archaean heavy bombardment from a destabilized extension of the asteroid belt". *Nature*, 485 (7396), 78.
- [35] Bada J. L. (2004). "How life began on Earth: a status report". *Earth and Planetary Science Letters*, 226 (1), 1-15.
- [36] Wacey D., Kilburn M. R., Saunders M., Cliff J. & Brasier M. D. (2011). "Microfossils of sulphur-metabolizing cells in 3.4-billion-year-old rocks of Western Australia". *Nature Geoscience*, 4 (10), 698-702.
- [37] Mojzsis, S. J., Arrhenius, G., McKeegan, K. D., Harrison, T. M., Nutman, A. P., & Friend, C. R. L. (1996). "Evidence for life on Earth before 3,800 million years ago". *Nature*, 384 (6604), 55.
- [38] Lepland, A., van Zuilen, M. A., Arrhenius, G., Whitehouse, M. J., & Fedo, C. M. (2005). "Questioning the evidence for Earth's earliest life-Akilia revisited". *Geology*, 33 (1), 77-79.
- [39] Bell E. A., Boehnke P., Harrison T. M. & Mao W. L. (2015). "Potentially biogenic carbon preserved in a 4.1 billion-year-old zircon". *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 112 (47), 14518-14521.
- [40] Abramov O. & Mojzsis S. J. (2009). "Microbial habitability of the Hadean Earth during the late heavy bombardment". *Nature*, 459 (7245), 419-422.

- [441] Kasting J. F. (2004). "When methane made climate". *Scientific American*, 291 (1), 78-85.
- [442] Kasting J. F. (2004). "Palaeoclimatology: Archaean atmosphere and climate". *Nature*, 432 (7016).
- [443] Lilley M. D., Butterfield D. A., Olson E. J., Lupton J. E., Macko S. A. & McDuff R. E. (1993). "Anomalous CH₄ and NH₄⁺ concentrations at an unsedimented mid-ocean-ridge hydrothermal system". *Nature*, 364 (6432), 45-47.
- [444] Tarduno, J. A., Cottrell, R. D., Watkeys, M. K., Hofmann, A., Doubrovine, P. V., Mamajek, E. E. & Usui, Y. (2010). "Geodynamo, solar wind, and magnetopause 3.4 to 3.45 billion years ago". *Science*, 327 (5970), 1238-1240.
- [445] Wang, M., Jiang, Y. Y., Kim, K. M., Qu, G., Ji, H. F., Mittenthal, et al. (2011). "A universal molecular clock of protein folds and its power in tracing the early history of aerobic metabolism and planet oxygenation". *Molecular biology and evolution*, 28 (1), 567-582.
- [446] a) Kasting J. F. & Howard M. T. (2006). "Atmospheric composition and climate on the early Earth. Philosophical Transactions of the Royal Society of London B". *Biological Sciences*, 361 (1474), 1733-1742.; b) Kasting J. F. (2001). "The rise of atmospheric oxygen". *Science*, 293 (5531), 819-820.
- [447] Goldblatt C., Lenton T. M. & Watson A. J. (2006). "Bistability of atmospheric oxygen and the Great Oxidation". *Nature*, 443 (7112), 683-686.
- [448] Poulton S. W., Krom M. D. & Raiswell R. (2004). "A revised scheme for the reactivity of iron (oxyhydr) oxide minerals towards dissolved sulfide". *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 68 (18), 3703-3715.
- [449] Roscoe S. M. (1976). "Huronian rocks and uraniferous conglomerates in the Canadian Shield (No. GSCAN-P-68-40)". *Geological Survey of Canada*.
- [450] Catling D. & Kasting J. F. (2007). "Planetary Atmospheres and Life", Sullivan III, W. T., & Baross, J. (Eds.). *Planets and life: the emerging science of astrobiology*. Cambridge University Press., 91-116.
- [451] Navarro-González R., McKay C. P. & Mvondo D. N. (2001). "A possible nitrogen crisis for Archaean life due to reduced nitrogen fixation by lightning". *Nature*, 412 (6842), 61-64.
- [452] Pavlov A. A., Kasting J. F., Eigenbrode J. L. & Freeman K. H. (2001). "Organic haze in Earth's early atmosphere: Source of low-¹³C Late Archaean kerogens?" *Geology*, 29 (11), 1003-1006.
- [453] Condie K. C., O'Neill C. & Aster R. C. (2009). "Evidence and implications for a widespread magmatic shutdown for 250 My on Earth". *Earth and Planetary Science Letters*, 282 (1), 294-298.
- [454] Gough D. O. (1981). *Solar interior structure and luminosity variations. In Physics of Solar Variations*. Springer Netherlands. 21-34.
- [455] Rosing M. T., Bird D. K., Sleep N. H. & Bjerrum C. J. (2010). "No climate paradox under the faint early Sun". *Nature*, 464 (7289), 744-747.
- [56] Goldblatt C., Claire M. W., Lenton T. M., Matthews A. J., Watson A. J. & Zahnle K. J. (2009). "Nitrogen-enhanced greenhouse warming on early Earth". *Nature Geoscience*, 2 (12), 891-896.
- [57] Driese, S. G., Jirsa, M. A., Ren, M., Brantley, S. L., Sheldon, N. D., Parker, D., & Schmitz, M. (2011). "Neoproterozoic paleoweathering of tonalite and metabasalt: Implications for reconstructions of 2.69 Ga early terrestrial ecosystems and paleoatmospheric chemistry". *Precambrian Research*, 189 (1), 1-17.
- [58] Wolf E. T. & Toon O. B. (2013). "Hospitable Archean climates simulated by a general circulation model". *Astrobiology*, 13 (7), 656-673.
- [59] Som, S. M., Catling, D. C., Harnmeijer, J. P., Polivka, P. M., & Buick, R. (2012). "Air density 2.7 billion years ago limited to less than twice modern levels by fossil raindrop imprints". *Nature*, 484 (7394), 359-362.
- [60] a) Hren, M. T., Tice, M. M., & Chamberlain, C. P. (2009). "Oxygen and hydrogen isotope evidence for a temperate climate 3.42 billion years ago". *Nature*, 462 (7270), 205-208; b) Blake, R. E., Chang, S. J., & Lepland, A. (2010). "Phosphate oxygen isotopic evidence for a temperate and biologically active Archaean ocean". *Nature*, 464 (7291), 1029-1032.
- [61] Ronov A. B. & Yaroshevsky A. A. (1972). "Earth's crust geochemistry". *The Encyclopedia of Geochemistry and Environmental Sciences*, 4.
- [62] Valley, J. W., Peck, W. H., King, E. M., & Wilde, S. A. (2002). "A cool early Earth". *Geology*, 30 (4), 351-354.
- [63] Sleep N. H. & Zahnle K. (2001). "CO₂ cycling and implications for climate on ancient Earth". *Journal of Geophysical Research: Planets*, 106 (E1), 1373-1399.
- [64] Shibuya, T., Tahata, M., Kitajima, K., Ueno, Y., Komiya, T., Yamamoto, S. & Yoshida, N. (2012). "Depth variation of carbon and oxygen isotopes of calcites in Archaean altered upper oceanic crust: Implications for the CO₂ flux from ocean to oceanic crust in the Archaean". *Earth and Planetary Science Letters*, 321, 64-73.
- [65] Fralick P. & Carter J. E. (2011). "Neoproterozoic deep marine paleotemperature: Evidence from turbidite successions". *Precambrian Research*, 191 (1), 78-84.
- [66] Schwartzman D. (2002). *Life, temperature, and the Earth: the self-organizing biosphere*. Columbia Uni. Press.
- [67] Kasting J. F. & Ono S. (2006). "Palaeoclimates: the first two billion years. Philosophical Transactions of the Royal Society of London B". *Biological Sciences*, 361 (1470), 917-929.
- [68] De Wit M. J. & Furnes H. (2016). "3.5-Ga hydrothermal fields and diamictites in the Barberton Greenstone Belt-Paleoproterozoic crust in cold environments". *Science advances*, 2 (2), e1500368.
- [69] Pavlov, A. A., Kasting, J. F., Brown, L. L., Rages, K. A., & Freedman, R. (2000). "Greenhouse warming by CH₄ in the atmosphere of early Earth". *Journal of Geophysical Research*, 105 (11), 981-11.

Biocatálisis aplicada. Las enzimas como herramientas útiles en síntesis orgánica

Vicente Gotor Fernández y María José Hernáiz Gómez-Dégano

Resumen: La Biocatálisis juega hoy en día un papel relevante en el diseño de procesos sostenibles para la preparación de moléculas orgánicas. El descubrimiento de la actividad enzimática en disolventes orgánicos, así como la posibilidad de modificar los biocatalizadores a través de métodos de inmovilización en su superficie, o bien su secuencia de aminoácidos mediante métodos de biología molecular, ha permitido el diseño de catalizadores robustos y atractivos para el sector industrial. Así, distintos biocatalizadores pueden trabajar en condiciones similares de reacción, lo que ha dado lugar al desarrollo de procesos concurrentes acortando rutas químicas existentes. Esto se ha traducido en el diseño de estrategias sintéticas más directas que transcurren con excelentes rendimientos y selectividades. La implementación de las biotransformaciones en empresas químicas multinacionales, así como la aparición de compañías biotecnológicas desde inicios del siglo XXI presenta hoy en día a las enzimas como herramientas útiles en procesos sintéticos.

Palabras clave: Biocatálisis; Biotransformaciones Industriales; Enzimas; Química Sostenible; Síntesis Orgánica.

Abstract: Biocatalysis plays a fundamental role in the design of sustainable processes for the preparation of relevant organic molecules. The discovery of enzymatic activity in organic solvents together with the possibility of modifying their surface through immobilization techniques, or alternatively their amino acid sequence by using molecular biology techniques, provide access to robust and attractive catalysts for the industrial sector. The compatibility of different biocatalysts under similar reaction conditions has led to the development of concurrent processes, which allow the design of straightforward chemical routes with excellent yield and selectivity values. Nowadays enzymes are considered as versatile catalysts for synthetic transformations since the implementation of biotransformations has been possible in many chemical multinational enterprises, while the creation of biotechnological companies has suffered an exponential growth since the early XXI century until now.

Keywords: Biocatalysis; Enzymes; Industrial Biotransformations; Organic Synthesis; Sustainable Chemistry.

INTRODUCCIÓN

El empleo de biocatalizadores en el beneficio del ser humano data de varios milenios atrás cuando en el antiguo Egipto se empleaban enzimas para la fermentación de azúcares. Tiempo más tarde estos procesos se extendieron a la elaboración de productos de uso diario como el pan o el queso. En su génesis, la Biocatálisis se basaba en el

uso de células enteras donde las bacterias o levaduras eran usadas para llevar a cabo los procesos químicos. En 1858 Louis Pasteur alcanzó un hito histórico al realizar la resolución cinética del ácido tartárico en su forma racémica. Así, empleando un medio de cultivo donde estaba presente el hongo *Penicillium glaucum*, la fermentación cesaba tan pronto como el enantiómero (*R,R*) se había consumido, aislando inalterada su antípoda de configuración (*S,S*).^[1] Desde este momento el uso de los biocatalizadores comenzó a desarrollarse a través de modelos enzimáticos dejando las aproximaciones empíricas poco a poco a un lado.

A lo largo de los años el empleo de las enzimas en síntesis orgánica fue alcanzando su madurez, desarrollándose las primeras biotransformaciones industriales en la década de los 50 del siglo pasado. En estos casos el estudio de procesos redox fue mayoritario, dirigido especialmente hacia la hidroxilación selectiva de esteroides, los cuales son procesos difícilmente de desarrollar de un modo selectivo mediante métodos químicos convencionales.^[2]

Sin lugar a duda, el descubrimiento por parte de Zaks y Klibanov de que algunas enzimas,^[3] especialmente las hidrolasas, pueden llevar a cabo transformaciones en medios anhidros, ha marcado un antes y un después en el transcurrir de la Biocatálisis. Este hallazgo ha permitido el uso de biocatalizadores en medios orgánicos y neotéricos, los cuales han permitido el desarrollo de nuevas rutas químicas permitiendo la transformación de sustratos insolubles en agua, así como la posibilidad de desarrollar reacciones alternativas a los procesos hidrolíticos como son las síntesis



Vicente Gotor
Fernández¹



M. J. Hernáiz
Gómez-Dégano²

¹ Universidad de Oviedo.
Avenida Julián Clavería s/n. Oviedo 33006 (España)
C. e.: vicgotfer@uniovi.es

² Universidad Complutense de Madrid
Plaza Ramón y Cajal s/n. Madrid 28040 (España)
C. e.: mjhernai@ucm.es

Recibido: 12/02/2017. Aceptado: 13/03/2017.

sis de ésteres, amidas y otras familias de compuestos orgánicos, imposibles de ocurrir en agua.^[4] La selectividad de los procesos se ha visto también altamente influenciada, ya que en estas condiciones es posible evitar reacciones indeseadas de hidrólisis y/o racemización, pudiendo obtener un compuesto orgánico con excelentes rendimientos. Además la posibilidad de inmovilizar las enzimas ha permitido en algunos casos su recuperación y posterior reutilización durante varios ciclos dependiendo del tiempo y las condiciones de reacción.^[5]

Históricamente el éxito de una transformación química venía determinado por el rendimiento alcanzado en el producto obtenido. Sin embargo, el esfuerzo de las agencias mundiales para la protección del medioambiente ha sido el detonante para presentar a la Química como un medio de bienestar en lugar de un problema social. De esta manera, se ha concienciado a los científicos para el desarrollo de procesos sintéticos dentro de las pautas que marca la Química Sostenible y sus 12 principios,^[6] los cuales vienen recogidas intencionadamente bajo el término inglés *productively* (de manera productiva):^[7] Prevent wastes; Renewable materials; Omit derivatization steps; Degradable chemical products; Use safe chemical methods; Catalytic reagents; Temperature, Pressure ambient; In process monitoring; Very few auxiliary substances; E-factor, maximise feed in products; Low toxicity of chemicals products; Yes, it is safe.

La Biocatálisis no ha sido indiferente a esta tendencia, presentando soluciones químicas y económicamente viables. En un simple análisis medioambiental de los procesos enzimáticos podemos darnos cuenta que por norma general las biotransformaciones:

- a) Emplean biocatalizadores que son biodegradables, fácilmente accesibles a partir de nuestro entorno natural y que pueden ser reutilizados en muchos casos, especialmente cuando son usados en su forma inmovilizada.
- b) Transcurren con una elevada selectividad en condiciones suaves de reacción, lo que les conduce a evitar el desarrollo de estrategias sintéticas basadas en tediosos pasos de protección y desprotección de grupos funcionales, dando lugar a transformaciones más simples y seguras para el investigador y equipamiento empleado.
- c) Se desarrollan con una alta eficacia empleando cantidades catalíticas de biocatalizador, siendo en muchos casos procesos altamente competitivos en términos económicos, y pudiendo acoplar sistemas de regeneración del cofactor enzimático cuando este es necesario para el correcto funcionamiento del enzima.
- d) Presentan una excelente economía atómica minimizando la formación de productos secundarios, los cuales en caso de formarse para un correcto desplazamiento del equilibrio químico son fácilmente eliminables del medio de reacción. Este es el caso de la acetona formada a partir de acetato de isopropanilo, isopropanol o isopropilamina en procesos

catalizados por hidrolasas, oxidorreductasas o aminotransferasas respectivamente.

- e) Permiten desarrollar procesos químicos previniendo la formación de residuos, como en el caso del agente antiepiléptico Talampanol, donde el empleo de una estrategia quimioenzimática permite ahorrar 340.000 litros de disolventes y 3.000 kilogramos de cromo por cada tonelada de fármaco producida.

Todo ello conlleva que los procesos biocatalíticos desempeñen un creciente rol en síntesis orgánica, ofreciendo alternativas sostenibles a los procesos químicos convencionales. Esto se determina a través de herramientas sencillas para la medida del impacto ecológico de las biotransformaciones, pudiendo tener en cuenta los reactivos y disolventes empleados, así como todos los productos involucrados.^[8]

CLASES DE ENZIMAS

La Unión Internacional de Bioquímica y Biología Molecular ha diseñado una clasificación de los biocatalizadores en función de su actividad principal. Esto permite agruparlos en 6 grandes grupos como son las oxidorreductasas (EC 1), transferasas (EC 2), hidrolasas (EC 3), liasas (EC 4), isomerasas (EC 5) y ligasas (EC 6), donde el acrónimo EC representa las siglas de la Comisión Enzimática (*Enzyme Commission*).^[9] Sin lugar a duda, los 4 primeros grupos son las que presentan una mayor aplicabilidad en la síntesis de moléculas de interés.^[10]

Las oxidorreductasas (EC 1) son enzimas que catalizan reacciones redox. Han sido históricamente las más empleadas por su papel en procesos de fermentación. Su uso más habitual incluye tanto la reducción de dobles enlaces^[11] como el proceso reversible de oxidación tanto de alcoholes como de aminas, extendiéndose a muchos otros procesos selectivos de oxigenación de enlaces C-H no activados, compuestos aromáticos o heteroátomos entre otros. Todas ellas son transformaciones difíciles de desarrollar selectivamente mediante métodos químicos convencionales.^[12] La mayoría de estas enzimas requieren el uso de cofactores redox como el NAD(P), FMN o FAD o sus formas reducidas, los cuales donan los equivalentes químicos para el paso de oxidación u reducción estudiados. Si bien estos cofactores se comercializan con altos precios, la posibilidad de acoplar sistemas de reciclaje del cofactor eficientes ha sido desarrollada con éxito en años recientes.^[13]

Las transferasas (EC 2) como su propio nombre indica catalizan la transferencia de grupos funcionales como el metilo, cetonas, aldehídos, glicosílicos etc. Sin lugar a dudas han llegado a su pleno apogeo con el desarrollo de reacciones de transferencia de grupos amino. En este campo las aminotransferasas, y dentro de ellas las transaminasas han liderado una corriente científica que ha permitido la implementación de procesos biocatalíticos en numerosas empresas químicas y biotecnológicas al

convertir cetonas en aminas enantioméricamente puras con excelentes rendimientos.^[14]

Las hidrolasas (EC 3) son los biocatalizadores más empleados al permitir no solo la hidrólisis de numerosas clases de moléculas orgánicas (ésteres, carbonatos, epóxidos, nitrilos, amidas...), sino también los procesos reversibles de síntesis al sustituir el nucleófilo empleado, el agua, por otros como alcoholes, aminas, amoniaco, hidracinas, tioles o perácidos.^[15] Para su correcta actuación no necesitan la adición de cofactores, lo que simplifica el desarrollo de los procesos y rebaja su coste.

Las liasas (EC 4) son biocatalizadores altamente selectivos que catalizan entre otros la formación de enlaces carbono-carbono y carbono-heteroátomo.^[16] Su mecanismo difiere de aquellos de hidrólisis y oxidación, al ocurrir a través de una secuencia de adición-eliminación que permite en algunos casos la creación de varios centros estereogénicos en un solo paso de reacción como ocurre en ciertas reacciones catalizadas por aldolasas.^[17]

Tanto las isomerasas (EC 5) como las ligasas (EC 6) poseen una gran versatilidad y aplicabilidad. Por un lado las isomerasas catalizan reacciones de racemización, epimerización e isomerización, y han sido empleadas en transformaciones de azúcares. Por otro lado, las ligasas están involucradas en procesos de unión de dos moléculas con la concomitante hidrólisis del enlace de un grupo difosfato o trifosfato del ATP. Sin embargo, hasta la actualidad su aplicación en rutas sintéticas quimioenzimáticas no ha recibido niveles de atención tan altos como las clases anteriores de enzimas.

Actualmente, existe un creciente interés por el descubrimiento de nuevas actividades biocatalíticas, y que se ha dado a conocer con el término de promiscuidad biocatalítica. Así, el hecho de que enzimas hidrolíticos como las lipasas catalicen reacciones de formación de enlaces carbono-carbono o carbono-nitrógeno, ha despertado una inusitada curiosidad por estudiar los aspectos mecanísticos que hacen que las triadas catalíticas de estas hidrolasas favorezcan estos procesos no convencionales.^[18]

HERRAMIENTAS PARA LA PRODUCCIÓN DE BIOCATALIZADORES MEJORADOS

Desarrollar biocatalizadores con propiedades que se ajusten a las condiciones de trabajo en los procesos industriales es una necesidad importante dentro de la Biocatálisis. Como ya hemos indicado, la utilización de los biocatalizadores en la industria química presenta una serie de ventajas respecto a otros tipos de catalizadores. Sin embargo, el uso de enzimas en procesos industriales no ha alcanzado su completa madurez, ya que es común encontrar que las condiciones para la biotransformación en pequeña escala no son las más apropiadas para el proceso industrial. Así, las enzimas o células pueden ser inestables, presentar una baja especificidad por el sustrato, baja actividad y estabilidad o no actuar con la enantioselectividad requerida. Esto obliga a buscar o desarrollar nuevos biocatalizadores con las propiedades requeridas, es decir, hechas a la medida del proceso.

En los últimos 40 años se ha experimentado un gran avance científico y tecnológico en la ingeniería de proteínas y en las estrategias dirigidas a generar el biocatalizador deseado para cada bioproceso.^[19] Así, son numerosas las estrategias que se han ensayado para obtener nuevos y mejores catalizadores, aunque se pueden agrupar fundamentalmente en tres categorías: 1. Búsqueda de nuevas enzimas naturales a través de screening de organismos y metagenómica; 2. Obtención de biocatalizadores mediante mutagénesis y evolución dirigida; 3. Diseño de novo, enzimas a la carta.^[19, 20]

Los métodos tradicionales para identificar nuevas enzimas están basados en el aislamiento de nuevos microorganismos a partir de muestras ambientales o de colecciones de cepas. Los microorganismos son una fuente muy versátil de enzimas, pudiéndose aislar nuevos microorganismos productores mediante cribado o “screening” a partir de distintas fuentes naturales y/o de colecciones tipo. Sin embargo, estos métodos de cultivo de microorganismos han limitado el análisis sólo a aquellos que pueden crecer en condiciones de laboratorio, y que representan a una muy pequeña parte de la gran diversidad microbiana, dejando una gran cantidad de microorganismos por explorar.^[20]

Dentro de las estrategias para el descubrimiento de biocatalizadores mejorados, las técnicas metagenómicas son consideradas hoy en día como potentes herramientas. Esta aproximación consiste en aislar directamente el ADN de muestras ambientales (ADN metagenómico), secuenciarlo y, mediante el análisis de las secuencias obtenidas, identificar genes y su posible función. Una vez que se identifica la actividad enzimática deseada, se aísla el gen respectivo y se clona para sobreexpresarlo, lo que permite producir la enzima en grandes cantidades.

La mutagénesis racional y la evolución dirigida de enzimas son también dos estrategias que permiten mejorar distintas propiedades de los biocatalizadores, tales como el aumento de la eficacia catalítica y/o estabilidad, modificación de las condiciones óptimas de reacción, mayor reconocimiento de sustratos o búsqueda de nuevas actividades (Figura 1). La primera de ellas se basa en la modificación justificada de residuos concretos de la estructura de la

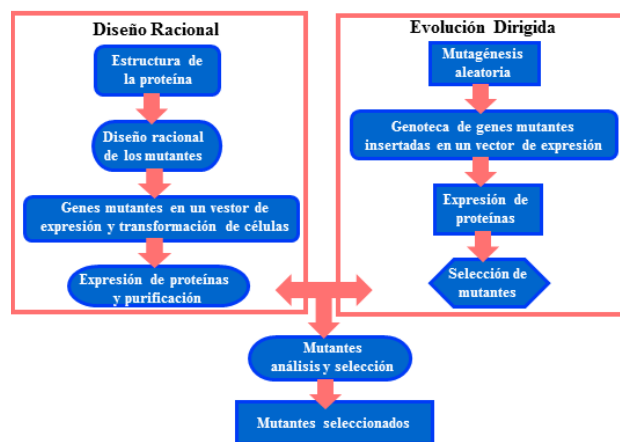


Figura 1. Diseño racional y evolución dirigida

enzima. Por otro lado, la evolución dirigida ha sido una herramienta alternativa poderosa para modificar la función enzimática y, específicamente, para ajustar las propiedades catalíticas a las condiciones deseadas. La evolución dirigida, “evolución *in vitro*” o “diseño no racional” de enzimas no difiere mucho de la hipótesis evolutiva sugerida por Darwin. En la evolución *in vitro* se aplican procesos mutagénicos aleatorios a un gen, generándose cierta diversidad representada en una genoteca de mutantes. Esta genoteca de variantes de la secuencia original es sometida a un proceso de selección, del cual se obtienen candidatos mejorados que serán nuevamente sometidos a procesos de mutación. Una combinación apropiada y repetida de los distintos métodos de generación de variabilidad acoplados a buenos métodos de selección puede producir enzimas con las propiedades catalíticas deseadas.^[21]

INMOVILIZACIÓN DE ENZIMAS

A pesar de las ventajas que las enzimas presentan frente a los catalizadores tradicionales, el empleo de estos biocatalizadores no se ha generalizado en la industria, debido a varias razones como son su limitada estabilidad, ya que son proteínas que se pueden desnaturalizar y perder totalmente su actividad, o bien la dificultad que entraña su separación de los sustratos y productos en el medio de reacción, lo que impide su reutilización.

La inmovilización de enzimas ha logrado superar estos inconvenientes, permitiendo que aumente la productividad del catalizador (medida como kg de producto obtenidos por kg de enzima) y que muchos procesos industriales sean rentables económicamente en la actualidad.^[22] Este proceso restringe o reduce en mayor o menor medida la movilidad conformacional de las enzimas por su unión a un soporte, para dar lugar a formas insolubles que retienen su actividad catalítica y que pueden ser reutilizadas.

En general, los métodos de inmovilización se suelen clasificar en dos grandes categorías: la retención física y la unión química. En los primeros no hay formación de enlaces covalentes mientras que esta sí ocurre en los segundos. La adsorción y el atrapamiento de enzimas en soportes porosos o confinamiento de enzimas en membranas semi-permeables son los principales métodos de inmovilización por retención física, mientras que la unión covalente de la enzima al soporte y el entrecruzamiento son los métodos por unión química más destacados (Figura 2).^[5, 23]

La unión covalente de una enzima a un soporte es quizá el método de inmovilización más interesante desde el punto de vista industrial. La unión covalente a soportes sucede tras el ataque nucleofílico de determinados aminoácidos expuestos hacia el exterior de la superficie de la enzima sobre grupos químicos reactivos de un soporte previamente funcionalizado.

Aunque se han desarrollado y aplicado muchas técnicas de inmovilización a numerosos enzimas, se reconoce que no existe un método universal válido. No obstante, gracias a toda la información disponible en la actualidad, se podría seleccionar la técnica más adecuada para

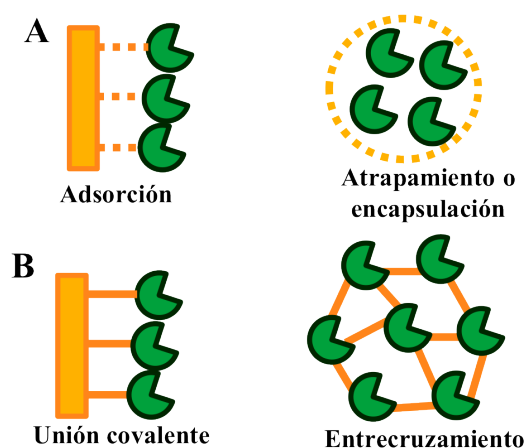


Figura 2. Métodos de inmovilización de enzimas: A) Retención física; B) Unión química

utilizar una enzima destinada a una aplicación concreta. Entre otros factores, la elección del método de inmovilización ha de tener en cuenta las condiciones de la reacción, el tipo de reactor que se vaya a utilizar y el tipo de sustrato que tenga que ser procesado.^[5, 23]

INGENIERÍA DEL MEDIO DE REACCIÓN

El uso de enzimas para lograr reacciones muy específicas en medios no acuosos es de gran utilidad en la industria química y farmacéutica. La mayoría de los bioprocesos se llevan a cabo en reactores bajo condiciones extremas de reacción, muy distintas de las que se dan en el ambiente natural de las enzimas. Por eso, la ingeniería del medio de reacción se define como el conjunto de herramientas que diseñan las condiciones adecuadas para que una enzima pueda catalizar en sus niveles de máxima actividad y estabilidad una reacción química en cualquier medio, ya sea el convencional (agua), o no convencional (disolventes orgánicos, neotéricos o bien sin disolvente).^[24]

Bajo la denominación de medios no convencionales se agrupan a los disolventes orgánicos miscibles o inmiscibles con el agua, lo cual dependerá de su valor de log P. Por ello dependiendo de la concentración de agua que exista en el medio y la naturaleza del disolvente orgánico, las reacciones enzimáticas pueden llevarse a cabo en tres sistemas diferentes:

1. Sistema monofásico, formado por agua y un cosolvente orgánico miscible con ella. Los disolventes más utilizados son los alcoholes de cadena corta (MeOH, EtOH o PrOH) o disolventes polares (DMSO, DMF, acetona, dioxano y THF entre otros). En general la mayor parte de los cosolventes se emplean hasta aproximadamente un 10% (v/v) sin observarse una pérdida de la actividad enzimática, pudiendo en algunos casos usarse proporciones ligeramente superiores al 50%. Si la proporción alcanza un cierto umbral, el agua esencial unida es eliminada conduciendo a la desnaturalización del

biocatalizador. Este hecho es debido a que estos disolventes polares son capaces de competir con los puentes de hidrógeno formado entre la proteína y la capa de agua fuertemente unida. Estos sistemas monofásicos formados por agua y un codisolvente polar son especialmente útiles cuando uno de los sustratos es muy polar y el otro apolar, siendo ambos sustratos solubles en la mezcla agua-disolvente polar elegida.^[25]

2. Bifásico o sistema de dos fases. El sistema está compuesto por una fase acuosa que contiene a la enzima disuelta y otra donde se encuentra el disolvente inmiscible con el agua. El sustrato y/o producto suelen presentar características hidrofóbicas por lo cual pueden localizarse en la fase orgánica, si solo el producto se localiza en la fase orgánica facilitará su extracción y separación. Entre la fase acuosa y la fase orgánica se forma una interfase donde se situará el enzima y habrá una concentración limitada de compuestos orgánicos (sustrato y producto) alrededor de la misma, por lo que se evita la inhibición enzimática. La biotransformación solo se produce en la fase acuosa y la presencia de las dos fases facilita la eliminación del producto de la superficie de la enzima y por ello que se complete la reacción con mayor rapidez. Sin duda es necesaria, una correcta transferencia de masa de sustrato(s), producto(s) y biocatalizador entre las dos fases, por lo que es crucial la agitación.^[26]
3. Disolvente orgánico puro. Las enzimas en su forma nativa son insolubles en disolventes orgánicos, por lo tanto, el enzima estará suspendido en la presencia del disolvente orgánico (enzima en polvo liofilizada o enzima inmovilizada). En estos sistemas la cantidad de agua es un parámetro muy importante para la actividad enzimática, ya que para mantener su actividad se necesita de una mínima cantidad de agua. Esta cantidad de agua suele ser una monocapa alrededor de las moléculas de enzima y el resto del medio puede ser el disolvente no convencional. El agua se distribuye entre las distintas fases presentes en el sistema. Parte de ella se une a la enzima, otra parte se disuelve en el disolvente y una tercera en el soporte, polímeros u otras sustancias. El grado de hidratación de la enzima es el parámetro clave (actividad de agua), debiendo ser este valor < 1.

ENZIMAS EN DISOLVENTES NEOTÉRICOS

Los disolventes constituyen el mayor porcentaje de residuos que se genera en la industria química y farmacéutica, teniendo un gran impacto en el aumento del factor E.^[27] Por ello muchas compañías se han centrado en minimizar el uso o sustituir los disolventes tóxicos tradicionales por disolventes neotéricos, desarrollando guías para ayudar a los químicos en la selección de disolventes más sostenibles.^[28] Entre dichos solventes los más utilizados en Biocatálisis son: fluidos supercríticos (FSCs),

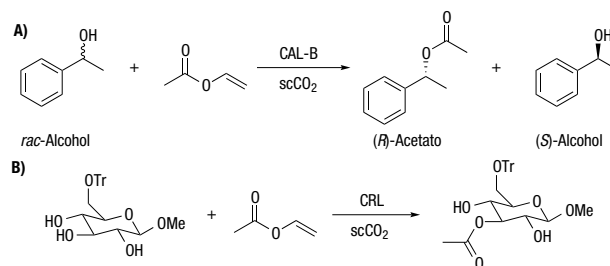
líquidos iónicos (LIs) y biodisolventes (disolventes que provienen de biomasa).^[29]

Fluidos supercríticos. El concepto de FSC hace referencia a un estado de la materia en el cual el compuesto se comporta como un fluido, mostrando propiedades al mismo tiempo de gas y líquido. Así, presentan unas propiedades muy interesantes para su aplicación en procesos de reacción y extracción, siendo reutilizables con la simple presurización del sistema para volver a las condiciones supercríticas. La elección de un FSC para realizar un proceso enzimático viene impuesta, en primer lugar, por las condiciones de presión y temperatura críticas del propio fluido, de manera que sean compatibles con la actividad de los catalizadores biológicos. Asimismo, es necesario que el fluido no inactive la enzima por reacción química con la misma. Desde el punto de vista industrial, la selección del fluido también viene determinada por criterios económicos y de seguridad, si bien el elevado coste de los equipos no ha permitido una aplicación más extendida de los FSCs en procesos enzimáticos industriales.

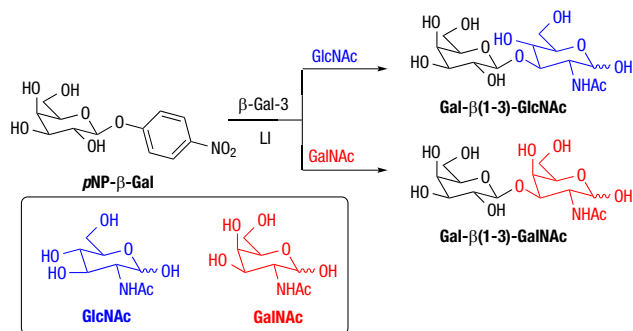
Existen numerosos ejemplos de reacciones enzimáticas en presencia de fluidos supercríticos.^[30] De entre todos los FSCs, el dióxido de carbono (CO₂) es el FSC más utilizado en reacciones enzimáticas, ya que puede acelerarlas en varios órdenes de magnitud, siendo además sencillamente eliminable al final del proceso. Así, diferentes hidrolasas han sido utilizadas en este medio, especialmente lipasas, proteasas y glicosidasas. Existen numerosos ejemplos donde se ha observado un mejor comportamiento de las enzimas en FSC que en disolventes orgánicos tradicionales, como han descrito Matsuda *et al.* para la resolución cinética del 1-feniletanol catalizada por la lipasa de *Candida antarctica* de tipo B (CAL-B) inmovilizada en un soporte cerámico y comercializada en su forma Novozyme 435.^[31] Así, es posible obtener el producto deseado con un 99% de *ee* y un 50% de rendimiento (Esquema 1A).

Por otro lado, Polacci *et al.*^[32] han descrito como el scCO₂ puede modular la acilación regioselectiva de azúcares usando la lipasa de *Candida rugosa* (CRL). Así, en el ejemplo mostrado en el Esquema 1B, se obtiene exclusivamente un derivado de la glucosa acilado en la posición 3 con un 91% de conversión.

Líquidos iónicos. Los LIs son sustancias líquidas a temperatura ambiente formadas exclusivamente por iones. Entre sus características destacan su baja presión de vapor, gran estabilidad tanto térmica como química, bajo punto de fusión, reciclabilidad y capacidad para disolver gran variedad



Esquema 1. Procesos catalizados por lipasas empleando scCO₂ como disolvente: **A)** Acilación enantioselectiva del 1-feniletanol; **B)** Acilación regioselectiva de un azúcar



Esquema 2. Reacciones de transglicosidación catalizadas por la β -gal-3 de *Bacillus circulans* empleando LIs o biodisolventes derivados del glicerol

de compuestos orgánicos, lo que facilita su empleo en Biocatálisis. La estructura del catión y anión modulan sus propiedades físico-químicas, e influyen a su vez notablemente en las reacciones enzimáticas mediante la alteración de la estructura, actividad, selectividad y estabilidad de las enzimas.

Durante los últimos años, el empleo de distintas clases de LIs en reacciones enzimáticas está teniendo un enorme auge, tanto industrial como a nivel de laboratorio, ya que se han postulado como sustitutos adecuados de los disolventes orgánicos volátiles, al no causar problemas de desactivación enzimática, aumentar la selectividad del biocatalizador y evitar los efectos medioambientales perjudiciales derivados de la alta volatilidad de estos últimos. Por ejemplo, se ha estudiado el efecto de LIs sobre la actividad de diferentes β -galactosidasas para la síntesis del disacáridos, destacando el caso de la β -Gal-3 de *Bacillus circulans* (Esquema 2), donde se observó que el uso de [Bmin][PF₆] conduce a un aumento importante del rendimiento de la reacción de transglicosilación, manteniendo la regioselectividad hacia la formación de enlaces β (1-3).^[33]

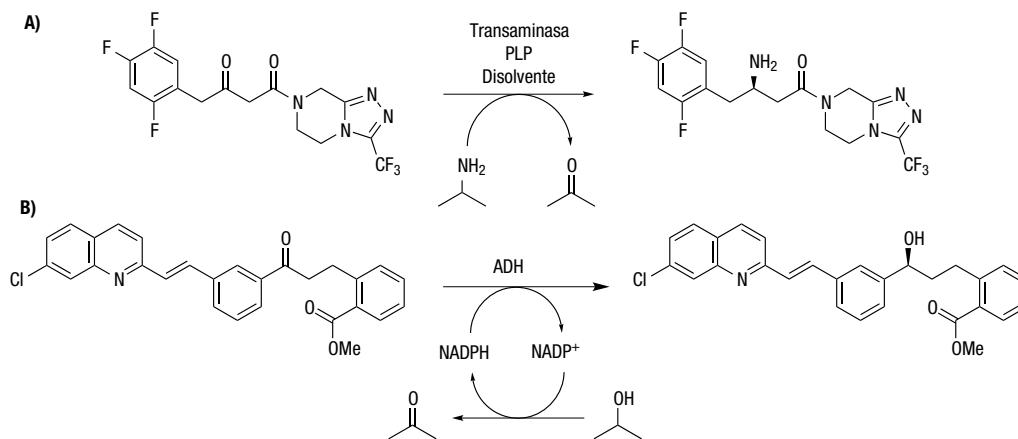
Biodisolventes. Proviene de fuentes renovables por lo que constituyen en sí mismos una forma de evitar residuos, convirtiendo lo que sería un potencial residuo en un nuevo disolvente. Los biodisolventes más conocidos y utilizados son el etanol y el metanol, aunque existen otros

comerciales como el ciclopentenil metil éter, el lactato de etilo, el 2-metil tetrahidrofurano o el glicerol.^[34] Este tipo de disolventes han sido ampliamente empleados, como por ejemplo en la síntesis regioselectiva de Gal- β (1 \rightarrow 3)GlcNAc y Gal- β (1 \rightarrow 3)GalNAc (Esquema 2), obteniéndose los disacáridos con rendimientos cuantitativos y completa regioselectividad.^[33, 34]

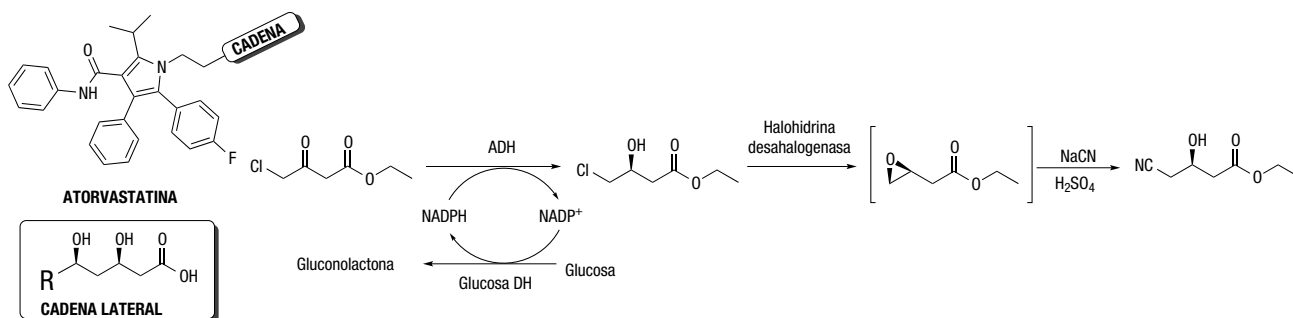
BIOTRANSFORMACIONES INDUSTRIALES

Las principales clases de enzimas que permiten el pleno desarrollo de la Biocatálisis en síntesis orgánica son las oxidorreductasas,^[35] transaminasas^[36] e hidrolasas.^[37] Sin duda alguna, la modificación de la secuencia de aminoácidos de una proteína ha permitido la implementación de procesos enzimáticos industriales más eficaces, destacando en esta década la colaboración entre Merck & Co. y Codexis en la producción de (*R*)-sitagliptina, el principal ingrediente activo de Januvia, medicamento empleado en el tratamiento de la diabetes de tipo II. Así, fue posible evolucionar una transaminasa con escasa pero medible actividad hacia pro-sitagliptina permitiendo una síntesis eficiente de la (*R*)-sitagliptina tras 27 mutaciones de la enzima nativa (Esquema 3A).^[38] En el proceso optimizado a 40°C es posible obtener el producto final en forma enantiopura con un rendimiento aislado del 92%, tolerando una concentración de sustrato de 200 g/L al emplear DMSO como cosolvente. Sin duda alguna, la ruta quimioenzimática propuesta supera las limitaciones de los métodos químicos descritos como el empleo de la reacción de inversión de Mitsunobu o hidrogenaciones selectivas con catalizadores de rodio.^[39]

La empresa Codexis ha desarrollado un proceso de biorreducción eficaz para la producción del antiasmático Montelukast, el cual se conoce en el mercado con distintos nombres como Singulair, Everest o Senovital entre otros. La evolución de una alcohol deshidrogenasa (ADH) ha conseguido aumentar 3000 veces la actividad de la enzima nativa, obteniéndose el alcohol en forma enantiopura y cuantitativa (Esquema 3B). Este proceso



Esquema 3. Reacción de interés en la preparación de fármacos: **A)** Biotransaminación en la síntesis del antidiabético Januvia; **B)** Biorreducción en la síntesis del antiasmático Montelukast



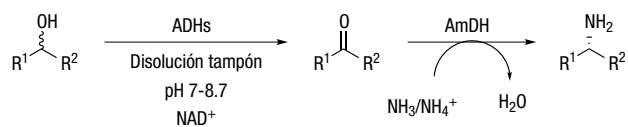
Esquema 4. Estructura de diversas estatinas y aplicación de una síntesis quimioenzimática que emplea una alcohol deshidrogenasa y una halohidrina deshalogenasa en la preparación de un fragmento de su cadena lateral

se lleva a cabo a 45°C, con una concentración inicial de sustrato de 100 g/L en una mezcla de isopropanol (que cumple también el papel de sustrato auxiliar para la regeneración del cofactor), agua y tolueno, lo que favorece la solubilidad de tanto de la cetona de partida como del alcohol, que finalmente se purifica por una simple filtración.^[40]

Otro ejemplo ilustrativo lo encontramos en la producción del sintón quiral de la cadena lateral de estatinas como la Atorvastatina (Esquema 4), empleada para disminuir los niveles de colesterol en sangre y así evitar dolencias cardiovasculares.^[41] La estructura común de las estatinas está formada por un núcleo central heterocíclico nitrogenado, y una cadena lateral derivada del ácido (3*R*,5*R*)-3,5-dihidroxiheptanoico. Codexis ha desarrollado un proceso enzimático para la síntesis de la cadena lateral que permite su producción a gran escala en un proceso de dos pasos enzimáticos. En el primero se utiliza una ADH para reducir el 4-cloro-3-oxobutanoato de etilo, obteniendo en forma enantiopura el (*S*)-4-cloro-3-hidroxi-butanoato de etilo con un 96% de rendimiento. En un segundo paso se utiliza una halohidrina deshalogenasa para llevar a cabo la sustitución nucleofílica del cloro por un grupo ciano a temperatura ambiente y pH neutro. Inicialmente en ambas reacciones la actividad de la enzima nativa era muy baja y mediante su modificación evolutiva se consiguió aumentar la actividad en ambos casos, resultando un excelente ejemplo de diseño de un proceso biocatalítico benigno.^[28b, c]

REACCIONES CONCURRENTES

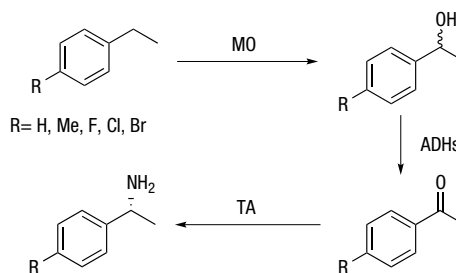
El diseño de procesos catalíticos y asimétricos se basa principalmente en el uso de tres tipos de catálisis, la metálica, la organocatálisis y la Biocatálisis.^[42] La compatibilidad de las enzimas con distintos tipos de catalizadores ha sido demostrada largamente a lo largo de los años, principalmente en



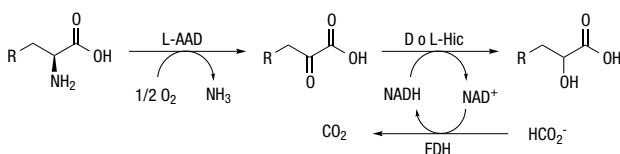
Esquema 5. Diseño de un proceso en cascada y *one-pot* para la transformación de alcoholes racémicos en aminas ópticamente activas

el diseño de procesos de resolución cinética dinámica de alcoholes y aminas.^[43] En estos procesos, la combinación de un paso de acilación catalizado por una lipasa con la racemización *in situ* del enantiómero que reacción más lentamente, permite obtener ésteres y amidas con excelentes excesos enantioméricos y rendimientos aislados. Sin embargo, en los últimos años es creciente el empleo de enzimas en procesos que ocurren de manera concurrente, permitiendo obtener moléculas de alto valor y complejidad tras una biotransformación que se desarrolla en varios pasos.^[44]

Existen muy diversas maneras para llevar a cabo estos procesos concurrentes, ya sea utilizando varias enzimas en forma aislada o bien co-inmovilizadas, empleando un microorganismo que contenga diversas actividades enzimáticas, o bien co-expresando diversos genes en un solo plásmido. Así, recientemente, Turner y colaboradores han descrito la transformación de alcoholes racémicos en aminas ópticamente activas a través de un proceso en cascada donde ambos enantiómeros del alcohol son inicialmente oxidados hacia el intermedio cetona empleando dos alcohol deshidrogenasas (ADHs) de opuesta selectividad (Esquema 5).^[45] El grupo carbonilo resultante experimenta una posterior reacción de aminación reductiva desarrollada en el mismo recipiente (*one-pot*), que es catalizada por una amino deshidrogenasa (AmDH), empleando el amoníaco como donador del grupo amino. Destaca el hecho de que el agua es obtenida como inocuo producto secundario global de la reacción, siendo una cascada redox autosuficiente ya que los cofactores para ambos procesos enzimáticos simples se van regenerando en *one-pot*. De esta manera se han obtenido una se-



Esquema 6. Co-expresión de una monooxigenasa, dos alcohol deshidrogenasas de selectividad opuesta y una transaminasa para la transformación de etilbencenos en (*R*)-1-feniletanaminas



Esquema 7. Cascada redox para la preparación de (*R*)- y (*S*)-hidroxiácidos a partir de L-aminoácidos

rie de aminas de configuración *R* con alta pureza óptica en reacciones a 30°C y tras 48 horas de reacción, abriéndose la posibilidad de diseñar procesos alternativos para la obtención de aminas de configuración opuesta.^[46]

La síntesis de aminas ópticamente activas es un reto de gran interés para el químico orgánico hoy en día, y otras rutas están siendo exploradas. Por ejemplo, el propio grupo de investigación de Turner, ha descrito recientemente un proceso de C-H aminación empleando un sistema de células enteras donde actúan una monooxigenasa (MO), dos alcohol deshidrogenasas de selectividad opuesta (ADHs) y una transaminasa (TA) para obtener una serie de (*R*)-1-feniletanaminas ópticamente activas a partir de etilbencenos (Esquema 6).^[47] Este es un proceso elegante que se basa en la co-expresión de cuatro genes distintos en un solo catalizador.

La co-expresión de varios catalizadores en un solo plásmido ha sido también aplicada por Kroutil y colaboradores permitiendo la transformación cuantitativa de L-aminoácidos tanto en (*R*)- como en (*S*)-hidroxiácidos a una concentración de 200 mM.^[48] Esta biotransformación implica la preparación de un triple biocatalizador que contiene las actividades de una L-aminoácido desaminasa (L-AAD) responsable de la conversión de los aminoácidos en cetoácidos, los cuales son posteriormente reducidos por una 2-hidroxiisocaproato deshidrogenasa (Hic) requiriendo de una formiato deshidrogenasa (FDH) para la regeneración del cofactor NADH. La preparación de este tipo de construcciones enzimáticas simplifica su uso individual y la optimización de las etapas sucesivas (Esquema 7).^[49]

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

El diseño de nuevas moléculas orgánicas más efectivas en el tratamiento de diversas enfermedades o la preparación de materiales químicos con una mayor aplicabilidad son sencillamente algunas de las tareas que el químico orgánico debe afrontar. Para estos y otros fines, el vertiginoso avance de muchas áreas científicas ha permitido que actualmente se dispongan de numerosas herramientas sintéticas. Entre todas ellas, la Biocatálisis se presenta como una alternativa a tener en cuenta para el desarrollo y la mejora de procesos químicos muy diversos.

Los avances alcanzados gracias a la modificación del biocatalizador, presentan a las enzimas como aceleradores útiles de un gran número de reacciones químicas. Así, por

un lado, el empleo de técnicas de inmovilización ha conducido a enzimas más estables y resistentes a medios orgánicos mientras que, por otro, su diseño racional, basado en técnicas de modelización molecular y de evolución dirigida, ha permitido una mejora de las actividades enzimáticas. Su compatibilidad con otros biocatalizadores y catalizadores no enzimáticos ha permitido a su vez el diseño de procesos altamente complejos pero que transcurren con una excelente selectividad y alta eficacia tanto energética como atómica.

Sin lugar a dudas, la Biocatálisis tiene un largo camino que recorrer debido a la complejidad de la estructura proteica de los enzimas,^[50] pero que sin embargo es modulable debido a la sencillez para modificar hoy en día esas cadenas aminoácidas y a la posibilidad de llevar a cabo un diseño racional de las mismas a través de cálculos computacionales.^[51] Todo ello se traduce en la generación de catalizadores más eficaces y selectivos, que además pueden ser compatibles con el uso de otras metodologías. A lo largo de años recientes, han ido apareciendo sus primeras aplicaciones en la química de flujo^[52] o el empleo de irradiación por microondas,^[53] todo ello hace que la Biocatálisis se presenta ante el químico orgánico como una herramienta útil de síntesis y con una aplicación evidente en el sector industrial.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen la financiación concedida por el Ministerio de Economía y Competitividad (CTQ2016-75752-R y CTQ2015-66206-C2-1-R).

BIBLIOGRAFÍA

- [1] L. Pasteur, *Ann. Chim. Phys.*, **1848**, *24*, 442-459.
- [2] K Drauz, H. Groeger, O. May O, *Enzyme Catalysis in Organic Synthesis*, Wiley-VCH, Weinheim, 2012.
- [3] a) G. Kirchner, M. P. Scollar, A. M. Klivanov, *J. Am. Chem. Soc.* **1985**, *107*, 7072; b) A. Zaks, A. M. Klivanov, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **1985**, *82*, 3192.
- [4] G. Carrea, S. Riva, *Organic Synthesis with Enzymes in non-Aqueous Media*, Wiley-VCH, Weinheim, **2008**.
- [5] R. A. Sheldon, S. van Pelt, *Chem. Soc. Rev.* **2013**, *42*, 6223-6235.
- [6] P. T. Anastas, L. G. Heine, T. C. Williamson, *Green Chemical Synthesis and Processes*. American Chemical Society, Washington D. C. (USA), **1994**.
- [7] S. L. Y. Tang, R. L. Smith, M. Poliakov, *Green Chem.*, **2005**, *7*, 761-762.
- [8] Y. Ni, D. Holtmann, F. Hollmann, *ChemCatChem*, **2014**, *6*, 930-943.
- [9] <http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/>
- [10] K. Faber, *Biotransformations in Organic Chemistry: A Textbook*. 6ª Ed.; Springer, Berlín (Alemania), 2011.

- [111] J. Magano, J. R. Dunetz, *Org. Process Res. Dev.*, **2012**, *16*, 1156-1184.
- [112] S. Schulz, M. Girhard, V. B. Urlacher, *ChemCatChem.*, **2012**, *4*, 1889-1895.
- [113] a) C. E. Paul, I. W. C. E. Arends, F. Hollmann, *ACS Catal.*, **2014**, *4*, 788-797; b) W. Hummel, H. Gröger, *J. Biotechnol.*, **2014**, *191*, 22-31.
- [114] a) W. Kroutil, E.-M. Fischereider, C. S. Fuchs, H. Lechner, F. G. Mutti, D. Pressnitz, A. Rajagopalan, J. H. Sattler, R. C. Simon, E. Siirola, *Org. Process Res. Dev.* **2013**, *17*, 751-759; b) R. C. Simon, N. Richter, E. Busto, W. Kroutil, *ACS Catal.*, **2014**, *4*, 129-143.
- [115] A. Ghanem, *Tetrahedron*, **2007**, *63*, 1721-1754.
- [116] a) M. Müller, *Adv. Synth. Catal.*, **2012**, *354*, 3161-3174; b) K. Fesko, M. Gruber-Khadjawi, *ChemCatChem.*, **2013**, *5*, 1248-1272.
- [117] C. L. Windle, M. Müller, A. Nelson, A. Berry, *Curr. Opin. Chem. Biol.*, **2014**, *19*, 25-33.
- [118] a) E. Busto, V. Gotor-Fernández, V. Gotor, *Chem. Soc. Rev.* **2010**, *39*, 4504-4523; b) M. López-Iglesias, V. Gotor-Fernández, *Chem. Rev.*, **2015**, *15*, 743-759.
- [119] T. Davids, M. Schmidt, D. Bottcher, U. T. Bornscheuer, *Curr. Opin. Chem. Biol.*, **2013**, *17*, 215-220.
- [120] G. A. Behrens, A. Hummel, S. K. Padhi, S. Schatzle, U. T. Bornscheuer, *Adv. Synth. Catal.*, **2011**, *353*, 2191-2215.
- [121] a) J. L. Porter, R. A. Rusli, D. L. Ollis, *ChemBioChem.*, **2016**, *17*, 197-203; b) H. Renata, Z. J. Wang, F. H. Arnold, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2015**, *54*, 3351-3367.
- [122] R. DiCosimo, J. McAuliffe, A. J. Poulouse, G. Bohlmann, *Chem. Soc. Rev.*, **2013**, *42*, 6437-6474.
- [123] a) I. Es, J. D. G. Vieira, A. C. Amaral, *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, **2015**, *99*, 2065-2082; b) S. Cantone, V. Ferrario, L. Corici, C. Ebert, D. Fattor, P. Spizzola, L. Gardossi, *Chem. Soc. Rev.*, **2013**, *42*, 6262-6276; c) U. Hanefeld, L. Gardossi, E. Magner, *Chem. Soc. Rev.*, **2009**, *38*, 453-468.
- [124] a) P. Adlercreutz, P. *Biocatalysis in non-conventional media. Second Edition of Applied Biocatalysis*, Australia: Harwood Academic Publishers, **2000**; b) N. Doukyu, H. Ogino, *Biochem. Eng. J.*, **2010**, *48*, 270-282.
- [125] A. Bertrand, S. Morel, F. Lefoulon, Y. Rolland, P. Monsan, M. Remaud-Simeon, *Carbohydr. Res.*, **2006**, *341*, 855-863; b) P. Torres, A. Poveda, J. Jiménez-Barbero, J. L. Parra, F. Comelles, A. O. Ballesteros, F. J. Plou, *Adv. Synth. Catal.*, **2011**, *353*, 1077-1086.
- [126] a) J. L. Lopez, S. A. Wald, S. L. Matson, J. A. Quinn, *Ann. N. Y. Acad. Sci.* **1990**, *613*, 155-166; b) T. Shibatani, K. Omori, H. Akatsuka, E. Kawai, H. Matsumae, *J. Mol. Catal. B: Enzym.*, **2000**, *10*, 141-149.
- [127] a) R. A. Sheldon, *Green Chem.*, **2007**, *9*, 1273-283; b) R. A. Sheldon, *Green Chem.* **2017**, *19*, 18-43.
- [128] a) W. J. W. Watson, *Green Chem.*, **2012**, *14*, 251-259; b) R. A. Sheldon, *Chem. Soc. Rev.*, **2012**, *41*, 1437-1451; c) C. Jimenez-Gonzalez, D.J.C. Constable, C. S. Ponder, *Chem. Soc. Rev.*, **2012**, *41*, 1485-1498.
- [129] M. J. Hernáiz, A. R. Alcántara, J. I. García, J. V. Sinisterra, *Chem. Eur. J.*, **2010**, *16*, 9422-9437.
- [130] a) A. J. Mesiano, E. J. Beckman, A. J. Russell, *Chem. Rev.*, **1999**, *99*, 623-634; b) T. Matsuda, *J. Biosci. Bioeng.*, **2013**, *115*, 233-241.
- [131] T. Matsuda, K. Watanabe, T. Harada, K. Nakamura, Y. Arita, Y. Misumi, S. Ichikawa, T. Ikariya, T. *Chem. Commun.*, **2004**, 2286-2287.
- [132] C. Palocci, M. Falconi, L. Chronopoulou, E. Cernia, E. J. *Super-crit. Fluids*, **2008**, *45*, 88-93.
- [133] C. Bayón, A. Cortés, J. Berenguer, M. J. Hernáiz, *Tetrahedron*, **2013**, *69*, 4973-4978.
- [134] A. Farran, C. Cai, M. Sandoval, Y. M. Xu, J. Liu, M. J. Hernáiz, R. J. Linhardt, *Chem. Rev.*, **2015**, *115*, 6811-6853.
- [135] a) J. Magano, J. R. Dunetz, *Org. Process Res. Dev.*, **2012**, *16*, 1156-1184; b) K. Robins, A. Osorio-Lozada, *Catal. Sci. Technol.*, **2012**, *2*, 1524-1530.
- [136] M. Fuchs, Judith E. Farnberger, W. Kroutil, *Eur. J. Org. Chem.*, **2015**, 6965-6982.
- [137] M. B. Ansorge-Schumacher, O. Thum, *Chem. Soc. Rev.*, **2013**, *42*, 6475-6490.
- [138] C. K. Savile, J. M. Janey, E. C. Mundorff, J. C. Moore, S. Tam, W. R. Jarvis, J. C. Colbeck, A. Krebber, F. J. Fleitz, J. Brands, P. N. Devine, G. W. Huisman, G. J. Hughes, *Science*, **2010**, *329*, 305.
- [139] A. A. Desai, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2011**, *50*, 1974-1976.
- [140] J. Liang, J. Lalonde, B. Borup, V. Mitchell, E. Mundorff, N. Trinh, D. A. Kochrekar, R. N. Cherat, G. G. Pai, *Org. Process Res. Dev.*, **2010**, *14*, 193-198.
- [141] S. K. Ma, J. Gruber, C. Davis, L. Newman, D. Gray, A. Wang, J. Grate, G. W. Huisman, R. A. Sheldon, *Green Chem.*, **2010**, *12*, 81-86.
- [142] a) C. A. Denard, J. F. Hartwig, H. Zhao, *ACS Catal.*, **2013**, *3*, 2856-2864; b) H. Pellissier, *Tetrahedron*, **2013**, *69*, 7171-7210.
- [143] a) B. Martín-Matute, *An. Quim.*, **2006**, *102*, 46-52; b) O. Verho, J.-E. Bäckvall, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 3996-4009.
- [144] a) V. Köhler, N. J. Turner, *Chem. Commun.*, **2015**, *51*, 450-464; b) J. Muschiol, C. Peters, N. Oberleitner, M. D. Mihovilovic, U. T. Bornscheuer, F. Rudroff, *Chem. Commun.*, **2015**, *51*, 5798-5811.
- [145] F. G. Mutti, T. Knaus, N. S. Scrutton, M. Breuer, N. J. Turner, *Science*, **2015**, *349*, 1525-1529.
- [146] J.-B. Wang, M. T. Reetz, *Nat. Chem.*, **2015**, *7*, 948-949.
- [147] P. Both, H. Busch, P. K. Kelly, F. G. Mutti, N. J. Turner, S. L. Flitsch, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 1511-1513.
- [148] G. Gourinchas, E. Busto, M. Killinger, N. Richter, B. Wilschi, W. Kroutil, *Chem. Commun.*, **2015**, *51*, 2828-2831.
- [149] E. Busto, N. Richter, B. Grischek, W. Kroutil, *Chem. Eur. J.*, **2014**, *20*, 11225-11228.
- [150] M. T. Reetz, *Chem. Rec.*, **2016**, *16*, 2449-2459.
- [151] U. T. Bornscheuer, G. W. Huisman, R. J. Kazlauskas, S. Lutz, J. C. Moore, K. Robins, *Nature*, **2012**, *485*, 185-194.
- [152] N. N. Rao, S. Lütz, K. Würges, D. Minör, *Org. Process Res. Dev.*, **2009**, *13*, 607-616.
- [153] C. Wiles, P. Watts, *Chem. Commun.*, **2011**, *47*, 6512-6535.

El camino de enlace cuarenta años después de su descubrimiento: una manifestación del enlace químico en el espacio real*

Chérif F. Matta

Resumen: El concepto de camino de enlace fue propuesto por Richard F. W. Bader en 1977 (hace cuarenta años) y, ahora, es parte del conocimiento básico en química teórica y en cristalografía. No obstante, y fruto de su incompreensión, su importancia es todavía objeto de debate en la literatura. El camino de enlace es una manifestación observable de la densidad electrónica que constituye el único mapeo directo en nuestro espacio físico real tridimensional de la fórmula estructural de un compuesto dibujada sobre la base de su química conocida.

Palabras clave: Camino de enlace, enlace químico, teoría cuántica de los átomos en moléculas (QTAIM).

Abstract: The bond path concept has been advanced by Richard F. W. Bader in 1977 (forty years ago) and is now part of the core knowledge of theoretical chemistry and crystallography, yet its usefulness and significance is still debated in the literature occasionally when incorrectly applied. The bond path is an observable manifestation of the electron density that constitutes the unique direct mapping, in the real three-dimensional physical space, of the structural formula of a compound drawn on the basis of its known chemistry.

Keywords: Bond path, chemical bond, the quantum theory of atoms in molecules (QTAIM).

* El autor dedica este artículo al profesor Víctor Luaña Cabal (Universidad de Oviedo) para celebrar casi dos décadas de amistad e intercambios intelectuales.

INTRODUCCIÓN

La representación del enlace químico por líneas, cuyo número equivale a la “capacidad de unión” (valencia) de un átomo en un compuesto se remonta más de un siglo y medio a las obras de Loschmidt, Kekulé, Kossel, y otros. En *Chemische Studien I*, Jan J. Loschmidt (1821-1895) tiene un apéndice con dibujos de más de 300 estructuras de reminiscencia de una combinación de bolas-y-varillas, esferas entrelazadas, y fórmulas estructurales bidimensionales.^[1,2]

Un átomo dentro de una molécula, independientemente de cómo se defina, interactúa con los otros átomos, compartan o no un enlace químico entre ambos. Lo demuestran, por ejemplo, las constantes de acopla-

miento de RMN. Hay algo, sin embargo, muy especial que caracteriza la interacción entre átomos ligados con un enlace químico, como la química experimental nos ha enseñado. *¿Existe un criterio inequívoco que distinga el enlace químico?*

EL DESCUBRIMIENTO DE BADER DE 1977: EL CAMINO DE ENLACE QUÍMICO

Generaciones de químicos fueron criados con una dieta de estructuras de Lewis^[3-5] y del modelo VSEPR (el modelo de la repulsión entre pares de electrones en la capa de valencia).^[6-9] La teoría de los orbitales moleculares (MO)^[10] y la teoría del enlace de valencia (VB)^[11] constituyen el marco teórico tradicional para entender el enlace químico. VB, en particular, y el libro clásico de Pauling sobre la naturaleza del enlace químico,^[12] han hecho popular la noción de “resonancia” y conceptos similares.

El cálculo computacional, sin embargo, va por otros derroteros, y los métodos VB han sido menos sencillos de implementar que los MO-LCAO. Además, la correlación



C. F. Matta

Department of Chemistry and Physics, Mount Saint Vincent University, Halifax, Nova Scotia, Canada B3M 2J6; Dalhousie University, Halifax, Nova Scotia, Canada B3H 4J3; Saint Mary's University, Halifax, Nova Scotia, Canada B3H 3C3.
C-e: cherif.matta@msvu.ca

Recibido: 17/09/2016. Aceptado: 17/11/2016.

entre electrones ha obligado a métodos demasiado complejos para que el químico experimental extraiga conceptos asequibles o familiares.

Mientras tanto, la práctica común en cristalografía de rayos X asigna un enlace químico cuando la distancia entre dos núcleos es menor que la suma de los radios de van der Waals de la par de átomos en cuestión. Cuanto más corta sea la distancia entre los dos átomos más fuerte se considera el enlace entre ellos. La infografía computacional se basa en esos simples conceptos. Las fórmulas estructurales familiares resultantes de estas consideraciones constituyen, matemáticamente, un grafo no dirigido, es decir, un conjunto de líneas (aristas) que representan enlaces que conectan puntos (vértices) que representan los átomos. Termodinámicamente, un enlace químico se manifiesta como una estabilización energética relativa con respecto al sistema separado.

Desde mediados del siglo XIX, pasando por hitos como el artículo de Lewis de 1916 o el libro de 1939 de Pauling, nunca hubo una observación directa de un enlace químico, simplemente porque es una *interacción* y no un *objeto* de existencia independiente. Sin embargo, sorprendentemente, existe una característica de la densidad electrónica que produce gráficos moleculares con conectividad que son casi siempre isomorfos a las fórmulas estructurales tradicionales. Cada línea de la fórmula estructural deducida a partir de los conocimientos químicos empíricos se refleja por una línea correspondiente trazada en la densidad electrónica de la molécula aislada o del cristal.^[13-17] La densidad electrónica tiene la importante ventaja de ser un observable cuántico en el sentido de Dirac que es (indirectamente) medible a través de los factores de estructura obtenidos de la difracción de los rayos X.^[18]

En efecto, en 1977, seis décadas después del nacimiento del modelo de Lewis, el teórico canadiense Richard F. W. Bader (1931-2012)^[19] (Figura 1) y sus colegas realizaron un descubrimiento importante que introdujeron como “el camino de enlace” (en Inglés: *The bond path*).^[13-15,17]



Figura 1. Richard F. W. Bader (1931-2012) en su oficina de casa en el verano de 2009. (Foto tomada por C. Matta)

Este camino de enlace se define como una línea de densidad electrónica máxima que une los núcleos de los átomos enlazados (Figura 2). Durante cuatro décadas el camino de enlace se ha observado de forma rutinaria en los mapas de densidad electrónica de alta resolución medidas desde difracción de rayos X^[20,21] y también de los mapas generadas a partir de cálculos cuánticos *ab initio*.^[13] Por otra parte, y muy recientemente, una manifestación de los caminos de enlace se han observado como líneas entre núcleos atómicos en imágenes obtenidas mediante la microscopía de fuerza atómica.^[22,23]

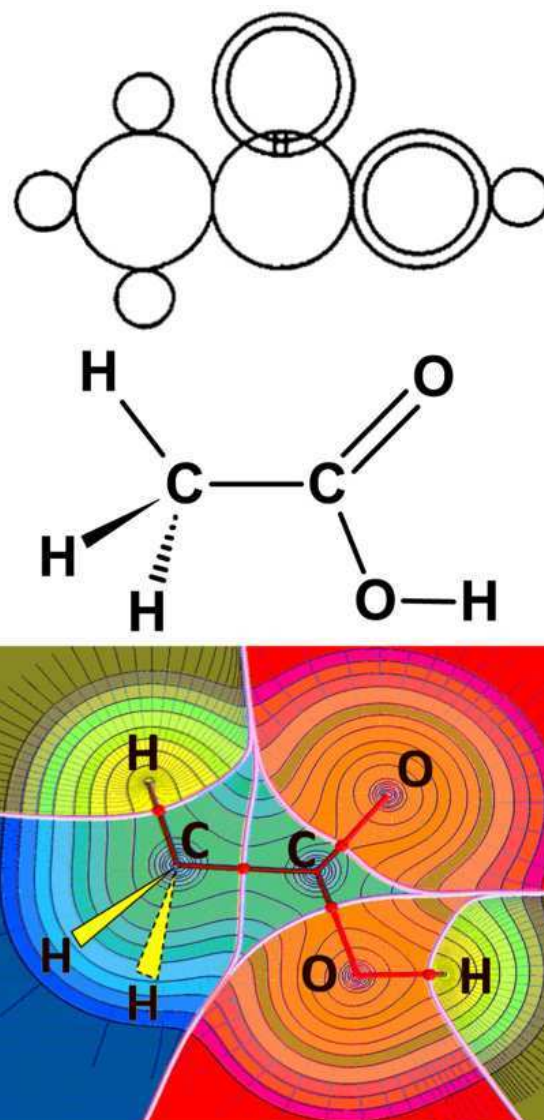


Figura 2. Arriba: Representación de Loschmidt de la molécula de ácido acético (nótese el símbolo del enlace doble entre el carbono y el oxígeno). Medio: La estructura química de la molécula. Abajo: Contornos de la densidad electrónica en el plano molecular principal. Los núcleos están unidos por caminos de enlace y las cuencas atómicas están separadas por las intersecciones de las superficies interatómicas (de flujo nulo en el campo de vector gradiente de la densidad electrónica) con el plano molecular. En la intersección de un camino de enlace con la superficie interatómica asociada hay un punto marcado en rojo que representa la ubicación del punto crítico de enlace

EL SIGNIFICADO DEL CAMINO DE ENLACE

El gráfico construido a partir de caminos de enlace reproduce anillos y jaulas de enlaces, enlaces covalentes, enlaces iónicos, enlaces débiles (van der Waals, hidrógeno, dihidrógeno, hidrógeno-hidrógeno, agósticos, etc.)^[24] por lo que el tipo del enlace químico y su fuerza se reflejan en sus propiedades topológicas y topográficas. Sin embargo, hay excepciones en las que están presentes caminos de enlace donde no se esperan y *viceversa*, y estos están entre los casos más interesantes. La controversia no ha estado alejada de estos hallazgos, un “rito” que cualquiera nueva idea digna de la ciencia tiene que pasar, en la opinión de este escritor.

Para cada camino de enlace en la densidad electrónica, hay asociada otra línea, también en el espacio real, esta vez en el campo escalar de la densidad de energía, y que vincula entre sí al mismo par de núcleos.^[25] Este camino es un verdadero duplicado (“doppleganger”) del camino de enlace y se denomina el “camino del virial”.^[25] De esta manera, y de un solo golpe, el camino de enlace ha unido el concepto de estructura química y el de la estabilidad energética en el mundo real del espacio tridimensional en el que vivimos.

Los caminos de enlace se *asocian* con la estabilidad energética del sistema y son determinados en una estructura experimental o una geometría optimizada teóricamente. En este caso, no hay ninguna fuerza neta sobre los átomos, ya sea los núcleos o la densidad electrónica misma. De haberla, la estructura cambiaría hasta alcanzar el punto de equilibrio. La palabra “asocian” es elegida, entonces, para evitar cualquier implicación de causalidad y, sobre todo, evitar la falaz “petición de principio” (*petitio principii*) de la gallina o el huevo.

A tal falacia llegaríamos al preguntar si la estabilidad de una molécula es la causa o el efecto de los enlaces químicos. El enlace químico, tal como se manifiesta en el camino de enlace, se desprende de la solución de la ecuación de Schrödinger molecular en puntos estacionarios de la superficie de energía potencial: “no es la causa ni es el resultado de la estabilidad energética, es simplemente una manifestación de esta estabilidad”.

Si este fuera el final de la historia habría sido un gran logro, pero esto “no es el final, no es ni siquiera el principio del fin” como dijo una vez Winston Churchill (1874-1965). Los caminos de enlace son útiles no sólo para establecer la vinculación entre dos átomos, para discutir la estabilidad estructural y su cambio durante una reacción química, o para elucidar la “naturaleza del enlace químico”, sino también desde un punto de vista más utilitario, en el desarrollo de robustos modelos QSAR (relaciones cuantitativas de estructura-actividad) capaces de predecir las propiedades y actividades de series de compuestos. Un ejemplo muy exitoso de esta estrategia es el de QTMS (similitud topológica molecular cuántica) de Paul L. A. Popelier.^[26-30] (Para un artículo de revisión, véase la referencia^[31]).

La importancia fundamental del descubrimiento del camino de enlace es que representó un hito en el desarrollo de la teoría cuántica de los átomos en moléculas

(QTAIM) de Bader.^[13] Esta teoría es una teoría general de la química que toma como su plataforma de lanzamiento el análisis, en el espacio real, de la topografía y la topología de la densidad electrónica. QTAIM representa un formalismo fundamentalmente físico y matemático de abordar el enlace químico desde el estudio de las propiedades experimentalmente accesibles. Entre sus declarados éxitos se encuentra el de destapar la física que gobierna las reglas de VSEPR reveladas en el laplaciano de la densidad electrónica,^[13,32] también el de explicar la existencia de especies químicas sin núcleo,^[33,34] conocidos como *pseudos-átomos*, de importancia para explicar las propiedades metálicas, de los centros-F en el estado sólido,^[35] de los electrones solvados,^[36] etc.

La transferibilidad de los átomos y de los grupos de átomos es una consecuencia natural de QTAIM, paralela a la transferibilidad de la superficie de flujo nulo que envuelve a un átomo dentro de la molécula. Mediante esta superficie el átomo está influenciado por sus vecinos inmediatos y los influye a su vez.^[37-40] Se aprovecha así de la *miopía de la matriz densidad*, de Walter Kohn (1923-2016).^[41-43]

De esta manera, todas las propiedades moleculares se expresan como propiedades atómicas aditivas, lo que constituye la contrapartida teórica de las esquemas de aditividad como, por ejemplo, los modelos de Sidney W. Benson (2018-2011).^[37,44,45]

En fin, el modelo de Lewis y su extensión desemboca en el lenguaje de la deslocalización electrónica derivada de la integración de los agujeros de correlaciones de Fermi y de Coulomb.^[46] El camino de enlace ha sido demostrado que representa un “canal privilegiado” para la deslocalización electrónica que se lleva a cabo a través del mecanismo de intercambio.^[47] Esto y mucho más se puede apreciar mediante la lectura del libro de Bader^[13] donde se generaliza la mecánica cuántica molecular a partir de *sistemas cuánticos cerrados* (moléculas enteras) hasta los *sub-sistemas cuánticos abiertos* (átomos-en-moléculas) que intercambian materia y energía con sus entornos. (Para obtener más perspectiva, el lector podría también consultar las referencias^[48-50]).

CONCLUSIÓN

El camino de enlace es una manifestación elegante, rica, y muy útil de los enlaces químicos, observable en el espacio real y por ello accesible a partir de la experimentación y de los cálculos teóricos. El camino de enlace se asocia con la estabilidad energética, y constituye uno de los pilares de la teoría cuántica de los átomos en moléculas (QTAIM) de Bader. Dicho esto, sin embargo, toda la profundidad de este concepto está, tal vez, aún por descubrir.

AGRADECIMIENTOS

El autor agradece al profesor Víctor Luaña Cabal por sus sugerencias, revisión y corrección lingüística de este artículo. El autor agradece también al doctor Chris Chap-

man, al doctor Joaquín Barroso, al doctor Todd A. Keith y al profesor Birger Ditttrich por sus comentarios sobre el manuscrito, y reconoce la financiación del Consejo de Investigaciones en las Ciencias Naturales e Ingeniería de Canadá (NSERC) y de la Fundación para la Innovación de Canadá (CFI).

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Bader, A. *Roy. Inst. Proc.* **1992**, *64*, 197-205.
- [2] Loschmidt, J. *Chemische Studien. I. A. Constitutions - Formeln der organischen Chemie in graphischer Darstellung. B. Das Mariott'sche Gesetz.*; Druck von Carl Gerold's Shon, Vienna: Vienna, 1861.
- [3] Lewis, G. N. *J. Am. Chem. Soc.* **1916**, *38*, 762-785.
- [4] Lewis, G. N. *Valence and the Structure of Atoms and Molecules*; Dover Publications, Inc.: New York, 1966.
- [5] Gillespie, R. J.; Popelier, P. L. A. *Molecular Geometry and Chemical Bonding: From Lewis to Electron Densities*; Oxford University Press: New York, 2001.
- [6] Gillespie, R. J.; Hargittai, I. *The VSEPR Model of Molecular Geometry*; Allyn and Bacon: Boston, 1991.
- [7] Gillespie, R. J.; Nyholm, R. S. *Quart. Rev. Chem. Soc.* **1957**, *11*, 339.
- [8] Gillespie R. J.; Nyholm, R. S. in: *Progress in Stereochemistry*; Butterworths: London, 1958.
- [9] Gillespie, R. J.; Matta, C. F. *Chemistry Education: Research and Practice in Europe (CERAPIE)* **2001**, *2*, 73-90.
- [10] Szabo, A.; Ostlund, N. S. *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*; Dover Publications, Inc.: New York, 1989.
- [11] Shaik, S.; Hiberty, P. C. *A Chemist's Guide to Valence Bond Theory*; John Wiley and Sons, Inc.: New Jersey, 2007.
- [12] Pauling, L. *The Nature of the Chemical Bond, (Third Ed.)*; Cornell University Press: Ithaca, N.Y., 1960.
- [13] Bader, R. F. W. *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*; Oxford University Press: Oxford, U.K., 1990.
- [14] Runtz, G. R.; Bader, R. F. W.; Messer, R. R. *Can. J. Chem.* **1977**, *55*, 3040-3045.
- [15] Bader, R. F. W. *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 7314-7323.
- [16] Bader, R. F. W.; Matta, C. F.; Cortés-Guzmán, F. *Organometallics* **2004**, *23*, 6253-6263.
- [17] Bader, R. F. W. *J. Phys. Chem. A* **2009**, *113*, 10391-10396.
- [18] Bader, R. F. W.; Zou, P. F. *Chem. Phys. Lett.* **1992**, *191*, 54-58.
- [19] Matta, C. F.; Massa, L.; Keith, T. A. *J. Phys. Chem. A* **2011**, *115*, 12427-12431.
- [20] Tsirelson, V. G.; Ozerov, R. P. *Electron Density and Bonding in Crystals: Principles, Theory and X-ray Diffraction Experiments in Solid State Physics and Chemistry*; Institute of Physics Publishing: New York, 1996.
- [21] Coppens, P. *X-ray Charge Densities and Chemical Bonding*; Oxford University Press, Inc.: New York, 1997.
- [22] Gross, L.; Mohn, F.; Moll, N.; Schuler, B.; Criado, A.; Guitián, E.; Peña, D.; Gourdon, A.; Meyer, G. *Science* **2012**, *337*, 1326-1329.
- [23] Zhang, J.; Chen, P.; Yuan, B.; Ji, W.; Cheng, Z.; Qiu, X. *Science* **2013**, *342*, 611-614.
- [24] Mori-Sanchez, P.; Pendás, A. M.; Luaña, V. *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *124*, 14721-14723.
- [25] Keith, T. A.; Bader, R. F. W.; Aray, Y. *Int. J. Quantum Chem.* **1996**, *57*, 183-198.
- [26] Popelier, P. L. A. *J. Phys. Chem. A* **1999**, *103*, 2883-2890.
- [27] O'Brien, S. E.; Popelier, P. L. A. *Can. J. Chem.* **1999**, *77*, 28-36.
- [28] O'Brien, S. E.; Popelier, P. L. A. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **2001**, *41*, 764-775.
- [29] Popelier, P. L. A.; Chaudry, U. A.; Smith, P. J. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2* **2002**, 1231-1237.
- [30] O'Brien, S. E.; Popelier, P. L. A. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2* **2002**, 478-483.
- [31] Matta, C. F. *J. Comput. Chem.* **2014**, *35*, 1165-1198.
- [32] Bader, R. F. W.; Gillespie, R. J.; MacDougall, P. J. *J. Am. Chem. Soc.* **1988**, *110*, 7329-7336.
- [33] Cao, W. L.; Gatti, C.; MacDougall, P. J.; Bader, R. F. W. *Chem. Phys. Lett.* **1987**, *141*, 380-385.
- [34] Martin-Pendas, A.; Blanco, M. A.; Costales, A.; Mori-Sanchez, P.; Luana, V. *Phys. Rev. Lett.* **1999**, *83*, 1930-1933.
- [35] Bader, R. F. W.; Platts, J. A. *J. Chem. Phys.* **1997**, *107*, 8545-8553.
- [36] Taylor, A.; Matta, C. F.; Boyd, R. J. *J. Chem. Theor. Comput.* **2007**, *3*, 1054-1063.
- [37] Bader, R. F. W.; Keith, T. A.; Gough, K. M.; Laidig, K. E. *Mol. Phys.* **1992**, *75*, 1167-1189.
- [38] Bader, R. F. W.; Becker, P. *Chem. Phys. Lett.* **1988**, *148*, 452-458.
- [39] Bader, R. F. W.; Larouche, A.; Gatti, C.; Carroll, M. T.; MacDougall, P. J.; Wiberg, K. B. *J. Chem. Phys.* **1987**, *87*, 1142-1152.
- [40] Bader, R. F. W.; Martín, F. J. *Can. J. Chem.* **1998**, *76*, 284-291.
- [41] Kohn W. *Phys. Rev. Lett.* **1996**, *76*, 3168-3171.
- [42] Prodan, E.; Kohn, W. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2005**, *102*, 11635-11638.
- [43] Bader, R. F. W. *Int. J. Quantum Chem.* **1995**, *56*, 409-419.
- [44] Bader, R. F. W.; Bayles, D. *J. Phys. Chem. A* **2000**, *104*, 5579-5589.
- [45] Wiberg, K. B.; Bader, R. F. W.; Lau, C. D. H. *J. Am. Chem. Soc.* **1987**, *109*, 1001-1012.
- [46] Fradera, X.; Austen, M. A.; Bader, R. F. W. *J. Phys. Chem. A* **1999**, *103*, 304-314.
- [47] Martin Pendas, A.; Francisco, E.; Blanco, M. A.; Gatti, C. *Chem. Eur. J.* **2007**, *13*, 9362-9371.
- [48] Richard F. W. Bader Festschrift. *J. Phys. Chem. A* **2011**, Vol. 111 (Number 45), 12427-13209.
- [49] Sutton, M. *Chemistry World* **2016**, *13*, 58-61.
- [50] Alvarez, S. *Chemistry World* **2015**, *12*, 36-37.

Josep Pascual Vila (1895-1979): una aproximación biográfica

Joaquim Sales y Agustí Nieto-Galan

Resumen: Se presenta una primera aproximación a la biografía de Josep Pascual Vila, catedrático de Química Orgánica de la Universidad de Barcelona durante más de treinta años. Su trayectoria permite explicar la evolución de una escuela de investigación iniciada en los años 20 y desarrollada durante el franquismo.

Palabras clave: Josep Pascual Vila, Química Orgánica, Universidad de Barcelona, CSIC.

Abstract: This is a preliminary approach to the biography of Josep Pascual Vila, Professor of Organic Chemistry at the University of Barcelona for more than thirty years. His career helps us to describe a longstanding research school, from the 1920s to Franco dictatorship.

Keywords: Josep Pascual Vila, Organic chemistry, University of Barcelona, CSIC.

INTRODUCCIÓN

El conocimiento de la historia de la química en la España del siglo xx presenta todavía hoy importantes limitaciones. Una simple consulta de la obra de Manuel Lora-Tamayo, *La investigación química española*, nos proporciona un conjunto de nombres, escuelas y temas de investigación que están todavía en buena medida pendientes de historiar.^[1] Con el objetivo de recuperar uno de esos nombres, presentamos en este artículo una primera aproximación a la vida y obra de Josep Pascual Vila (1895-1979), uno de los químicos orgánicos más relevantes de las décadas centrales del siglo xx, que desarrolló su trabajo científico con éxito bajo distintos regímenes políticos, desde la Monarquía de Alfonso XIII, a la Transición democrática. Se trata de una figura clave para entender el desarrollo y consolidación de la investigación en Química Orgánica en Barcelona, desde las primeras décadas del siglo, en el contexto de la Junta para Ampliación de Estudios e Investigaciones Científicas (JAE), hasta el Franquismo y la Transición.^[2]

La identificación y estudio de nuevas fuentes, en particular de la correspondencia privada de Pascual, que se



Figura 1. Josep Pascual el año 1946^[3]

conserva en la Reial Acadèmia de Ciències i Arts de Barcelona (RACAB), nos ha permitido dar un paso adelante en el conocimiento de su biografía. Veamos pues a continuación sus rasgos principales.

PRIMEROS AÑOS (1895-1936)

Josep Pascual nació en Mataró (Barcelona), ciudad de fuerte tradición industrial, en una familia, no obstante, de origen campesino y menestral. Tras realizar los estudios de bachillerato en la Escuela Pía, se licenció en Farmacia y Ciencias en la Universidad de Barcelona (UB), los años 1916 y 1917, respectivamente, con premio extraordinario en ambos casos. Amplió después estudios en Madrid, en el Laboratorio de Investigaciones Físicas (LIF), asistiendo a los cursos de Química física y Electroquímica que im-



J. Sales¹

A. Nieto-Galan²

¹ Departament de Química Inorgànica. Universitat de Barcelona.
C-e: joaquim.sales@ub.edu

² Centre d'Història de la Ciència. Universitat Autònoma de Barcelona.
C-e: agusti.nieto@uab.cat

Recibido: 07/07/2016. Aceptado: 08/02/2017.

partían los químicos Enrique Moles^[4] y Julio Guzmán. El LIF era un centro de la JAE, dirigido por el físico Blas Cabrera,^[5] donde se impartían cursos y se llevaba a cabo una investigación científica de nivel europeo. Su profesorado gozaba de una excelente formación, adquirida en los mejores centros internacionales gracias, precisamente, a las pensiones que concedía la JAE.

De vuelta a la Universidad de Barcelona, Pascual se incorporó como auxiliar temporal en el Laboratorio de Química Orgánica dirigido por Antonio García Banús.^[6] Este químico valenciano, formado en el Instituto Federal Politécnico (ETH) de Zúrich, ocupaba la cátedra de Química Orgánica de la UB desde 1915, e inició una escuela de investigación en esta disciplina en la universidad catalana, con la instalación de unos laboratorios bien equipados en los que la investigación experimental, pasaba a formar parte del trabajo habitual del profesor y de los alumnos. De García Banús, aprendió las bases y fundamentos teóricos y experimentales de la Química Orgánica, que él mismo aplicó en la realización de la tesis doctoral “Sobre la tautomería del cloruro de bencilmagnesio”, presentada en la Universidad de Madrid en 1922.

En la primavera de este mismo año, con una beca de la UB, Pascual se desplazó al Laboratorio de Heinrich Wieland (1877-1957), en la Universidad de Friburgo, donde se inició en el estudio de los ácidos biliares, tema por el que Wieland obtendría el Premio Nobel en 1927. Esta estancia fue muy provechosa para él, ya que se inició en un campo nuevo orientado a la aplicación de compuestos orgánicos en medicina, tema de su tesis doctoral en Farmacia “Un procedimiento de deshidroxilación parcial de los ácidos colálicos”, presentada en 1926. Durante su estancia en Alemania, realizó una corta visita a la Universidad de Graz (Austria), donde se inició en el análisis químico elemental con Fritz Pregl (1869-1930), que había recibido el Premio Nobel en 1923, por el desarrollo de dicho método. En noviembre de este mismo año obtuvo por oposición la cátedra de Química Orgánica de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Salamanca.

La estancia en Salamanca fue relativamente breve, pero consiguió poner en marcha una primera línea de investigación que daría lugar a la primera de la cincuentena de tesis doctorales que llegaría a dirigir. En 1925 se trasladó a la Universidad de Sevilla, ciudad en la que se consolidó como catedrático y figura destacada de la Química Orgánica española, una autoridad que ejercería durante toda su larga vida profesional y científica. Bajo su dirección se inició, prácticamente, en Sevilla la investigación en Química Orgánica, y se presentaron las primeras tesis doctorales; impartió también las materias de Electroquímica y Química Teórica, que progresivamente se iban incorporando a las universidades españolas. En 1926 se constituyó en Sevilla la Sección local de la Sociedad Española de Física y Química –la primera que se establecía, bajo el impulso del presidente de la Sociedad, Enrique Moles– con una junta integrada por los químicos Francisco Yoldi, Manuel Lora-Tamayo y el propio Pascual, que organizó en 1929 la primera reunión de la Sociedad, germen de las actuales Bienales. Su inte-

gración en la sociedad sevillana fue intensa, siendo elegido miembro de la Academia de Medicina y Cirugía de Sevilla en 1928. Un hecho que tendría consecuencias muy favorables para su futuro académico y científico, fue la amistad que estableció con Manuel Lora-Tamayo, futuro ministro de Educación Nacional y presidente del CSIC, entre otros cargos, durante la dictadura franquista.

A primeros de octubre de 1934, Pascual volvió a Barcelona. Durante la República, la UB pasó a denominarse Universidad Autónoma de Barcelona (UAB), reflejo de un régimen especial que le permitió implantar un conjunto de reformas muy significativas.^[7] Se dotó de una organización distinta al sistema centralista imperante en la universidad española. Estaba dirigida por un Patronato, nombrado a partes iguales por el Gobierno central y el de la Generalitat de Catalunya, y sus nuevas competencias permitían el nombramiento de profesores, incluso de categoría equivalente a la de catedrático numerario, con la denominación de profesor agregado, que se seleccionaban por concurso de méritos y no por el tradicional y controvertido sistema de oposiciones. En aplicación de estas competencias el Patronato de la UAB, le nombró profesor agregado de Química Técnica, en noviembre de 1933, si bien no se incorporó hasta el comienzo del curso siguiente. En octubre de 1934, la situación política había cambiado radicalmente, debido a los denominados “*fets d'octubre*”, que comportaron la suspensión de la autonomía política de Cataluña y, también, de la universitaria.^[8] Esta nueva situación creó algunos conflictos importantes a los profesores agregados nombrados por el Patronato, que dejaron de percibir sus salarios. Después de distintas reclamaciones, el Ministerio nombró a Pascual, en diciembre de 1934, catedrático numerario de Química Técnica atendiendo a su previa pertenencia al cuerpo como catedrático que era de Química Orgánica. Esta decisión comportó una queja formal al Ministerio por parte de un numeroso grupo de catedráticos de química que consideraban dañados sus derechos.^[9]

Otra de las innovaciones que permitían los estatutos de la UAB era la creación de Institutos de investigación y entre ellos se encontraba el de Química, constituido por iniciativa de García Banús, que reunía distintas cátedras con el objetivo de facilitar las relaciones entre sus miembros, organizar reuniones científicas periódicas, impartir asignaturas optativas de licenciatura y de doctorado –durante la República el doctorado dejó de otorgarse exclusivamente por la Universidad Central de Madrid–, impulsar estancias en centros extranjeros, en definitiva normalizar la vida universitaria de un país moderno. El Instituto constaba de distintas secciones, una de Química Técnica bajo la dirección de Pascual.

LA GUERRA CIVIL

La Guerra Civil representó, obviamente, una alteración profunda, cuando no la anulación, de la actividad académica, con la movilización de la mayor parte de docentes y alumnos, la posterior represión y exilio, sin olvidar aque-

Los profesores que voluntariamente se pasaron al bando insurgente o no se reincorporaron en setiembre para iniciar el nuevo curso. La UAB –que en febrero de 1936 había recuperado su estatuto de autonomía– entró en una situación de extraordinaria precariedad; pasó a depender directamente de la Consejería de Cultura y los diversos centros fueron reorganizados. El Instituto de Química, dirigido ahora por Miguel Masriera,^[10] fue supervisado por el Consejo de Sanidad de Guerra de la Generalitat, colaborando inicialmente en la preparación de medicamentos, entre otras funciones, de modo que su labor investigadora quedó muy reducida. Por otro lado, la Generalitat creó, en agosto de 1936, la Comissió d'Indústries de Guerra (CIG) bajo la dirección del consejero Josep Tarradellas, que incautó las principales industrias químicas y metalúrgicas y algunos laboratorios universitarios necesarios en la nueva situación bélica. Entre estos centros incautados destacaba el Laboratorio de Química Orgánica (LQO) de la Escuela de Ingenieros Industriales de Barcelona, que se dedicaba al análisis de materias primas y a la preparación de nuevos compuestos, que posteriormente serían producidos a escala industrial.

La existencia de la CIG creó numerosos problemas de competencias con el Gobierno central que, finalmente, creó su propia Comisión de Industrias de Guerra en Cataluña. Coincidiendo con la instalación del Gobierno de la República en Barcelona, a finales de 1937, procedente de Valencia, se suprimió la CIG y sus instalaciones, fábricas y laboratorios quedaron bajo el control del Ministerio de Defensa Nacional. Consecuencia de esta nueva situación el Instituto de Química de la UAB y su personal pasaron a depender de la Subsecretaría de Armamento. Pascual, a finales de agosto de 1938, fue nombrado director del LQO y de una fábrica, denominada F-1, que era la antigua Unión Española de Explosivos (UEE).^[11] Esta fábrica, ubicada en Badalona, se dedicaba, principalmente, a la producción de tetraetilplomo, antidefonante imprescindible para la gasolina de los aviones. La fabricación de este compuesto no era tarea fácil, dada su naturaleza, la falta de materias primas y la inexperiencia de las fábricas catalanas en el campo de la química de guerra. No es sencillo valorar los resultados de producción obtenidos, pero en todo caso fueron limitados. Además, la dirección de Pascual duró sólo los cinco últimos meses de la guerra –las tropas franquistas entraron en Barcelona el 26 de enero de 1939– período en que las condiciones materiales, como los continuos cortes en los suministros de agua, gas y electricidad, iban empeorando día a día. Por otro lado existen fundadas dudas de la lealtad del personal, primero al Gobierno catalán y después al republicano.

En abril de 1939 en la Escuela de Ingenieros Industriales de Barcelona se creó una Comisión de depuración sobre las actividades realizadas en el LQO; prácticamente todas las declaraciones de los interrogados coinciden en indicar que este Laboratorio se convirtió en un refugio de personas para evitar ir al frente, muchos de ellas eran colaboradoras e incluso miembros de partidos y asociaciones franquistas como la Falange o los Requetés. Según estos

testimonios el boicot y chantaje al funcionamiento normal del LQO era habitual y continuo y contaba con el beneplácito de los distintos directores, Pascual incluido. La destrucción de la documentación del LQO de esta época impide aportar nuevos datos sobre dicho comportamiento.^[12] Obviamente, las declaraciones a una comisión depuradora, justo al finalizar la Guerra Civil, deben tomarse con todos los reparos ya que el objetivo fundamental era evitar represalias que podían comportar años de cárcel e incluso la propia vida; además, la desaparición de la documentación daba una cierto margen de seguridad a los declarantes. En todo caso, la Comisión depuradora concluyó que en el LQO se boicoteaba la actividad de investigación y análisis. En la fábrica de Badalona, la fabricación de tetraetilplomo fue prácticamente nula durante los últimos meses de la Guerra.

Al acabar la Guerra Civil, todos los funcionarios fueron sometidos a un proceso de depuración; en cada universidad se nombraba un juez instructor que, oídos el decano de la facultad, y otros informes de la policía, autoridades militares y organismos del Movimiento, emitía su veredicto final con el sobreesimiento y la correspondiente reincorporación a la cátedra o bien la expulsión de la Universidad u otras sanciones más drásticas.^[13] Pascual solicitó la reincorporación a la UB mediante la declaración jurada reglamentaria en la que se detallaban las vicisitudes pasadas durante los tres años de la Guerra Civil. Como era habitual explicaba, entre otros aspectos, que estaba plenamente identificado con el Movimiento Nacional, y que su colaboración con distintos organismos de la Generalitat de Catalunya y del Gobierno republicano fue totalmente pasiva. Describía su actividad en el Instituto de Química de la UAB, pero prácticamente no indicaba nada de su colaboración con el Ministerio de Defensa ni de la dirección de la F-1 y del LQO.^[14] El informe del decano tampoco aportaba nuevos datos, con la aclaración que la información recibida se debía a comentarios de algunos testimonios, ya que no se encontró ninguna documentación referente a la labor de los laboratorios del Instituto de Química durante la Guerra.^[15] El informe de la FET y las JONS, de abril de 1940 y la totalidad de las declaraciones de los comparecientes ante el Juez instructor eran claramente favorables.^[16] En junio de 1940 el juez instructor propuso la “admisión sin sanción” que fue ratificada en mayo de 1941 por el Ministerio.^[17] Se ha especulado sobre el papel, del también químico, Emilio Jimeno Gil, a favor de la depuración sin sanción de Pascual.^[18] Jimeno fue el primer rector de la UB después de la entrada de las tropas franquistas en Barcelona, nombramiento debido a una antigua relación de amistad que tenía con Franco, por haber coincidido ambos en Oviedo durante los años 20.^[19]

VIDA UNIVERSITARIA EN EL PRIMER FRANQUISMO (1940-1965)

En enero de 1941, Pascual obtuvo, tras el informe preceptivo del CSIC,^[20] la cátedra de Química Orgánica de la Facultad de Ciencias de la UB, vacante por la expulsión

de García Banús, plaza que ocupó hasta su jubilación en 1965. Pascual impartió regularmente las asignaturas de Química Orgánica de la licenciatura de Química y fue de los primeros que, de forma ininterrumpida, dictó cursos de doctorado sobre distintos aspectos de su disciplina. Estuvo encargado, también, de la Química General en la licenciatura de Medicina, para la que escribió un libro de texto.^[21] Fue uno de los principales promotores de que todas las universidades concedieran el título de doctor, prerrogativa reservada exclusivamente a la Universidad de Madrid, y que el año 1955 se extendió a todas las universidades de provincias. Jugó un papel muy destacado como director del Seminario de Química; esta biblioteca era uno de los pocos organismos creados por la UAB que sobrevivieron a la legislación franquista. Se había creado en abril de 1936 y reunía los fondos bibliográficos de las distintas cátedras de Química de las Facultades de Ciencias y de Farmacia. Pascual fue su director prácticamente desde el final de la Guerra hasta su jubilación y durante este período consiguió mantener e incrementar significativamente sus fondos, especialmente obras de referencia, como el *Gmelin*^[22] y el *Beilstein*^[23] y las principales revistas especializadas, de manera que hoy día su sucesora, la Biblioteca de Física y Química de la UB, es, probablemente, la biblioteca con más fondos especializados del país. Pascual tuvo un especial interés por los temas de terminología y nomenclatura, asistió a varias reuniones de la IUPAC, fue miembro de la correspondiente Comisión de nomenclatura durante muchos años, y tradujo las primeras normas de Química Orgánica aprobadas por la IUPAC.^[24] Ocupó el único vicerrectorado de la UB entre junio de 1947 y octubre de 1951, cuando Francisco Buscarons, catedrático de Química Analítica, fue nombrado rector al acceder Joaquín Ruiz Giménez al Ministerio, en un primer intento, fallido, de apertura del régimen franquista. El papel más destacado como vicerrector fue la dirección de la “Junta de locales” creada con el objeto de gestionar la ampliación de la UB en los terrenos de la actual zona universitaria de la avenida Diagonal, la construcción de nuevos edificios destinados a Colegios Mayores y la Facultad de Farmacia inaugurada, finalmente, en 1957.

El establecimiento del CSIC en Barcelona tuvo lugar en 1941 con la constitución de una Delegación, que además de los servicios administrativos incluía a sus responsables científicos.^[25] Acogió, prácticamente, a todos los nombres relevantes de las distintas áreas del conocimiento –que habían superado el proceso de depuración– dado que, de hecho, era imposible llevar a cabo ninguna actividad de investigación fuera de su seno. En el campo de las ciencias experimentales y en concreto de la química, Pascual fue, sin ninguna duda, el nombre clave del CSIC en Cataluña. La amistad que le unía a Lora-Tamayo, iniciada en Sevilla en la década de los 30, y el beneplácito de José M.^a Albareda, secretario todopoderoso del Consejo,^[26] jugaron un papel decisivo. En marzo de 1940, cuando aún no se había resuelto el proceso de depuración, Pascual fue nombrado vocal del Patronato Juan de la Cierva y tres meses más tarde se creó en su cátedra de Química Orgánica, la Sección correspondiente del Instituto Alonso Barba



Figura 2. Inauguración del CID en 1967^[25]

del Patronato Alfonso el Sabio. En 1955 se estableció en Barcelona una Delegación del Patronato Juan de la Cierva, de la que Pascual fue nombrado presidente. El mencionado Departamento de Química Orgánica, a pesar de su dedicación a la investigación básica, se incorporó en 1961 al Patronato Juan de la Cierva, orientado a la investigación científico-técnica, por razones de tipo económico. Otra participación activa de Pascual en la consolidación del CSIC en Barcelona fue la creación del Instituto de investigaciones técnicas en 1944, con la colaboración de la Diputación provincial de Barcelona, aprovechando las instalaciones del Laboratorio General de Ensayos, que había creado la Mancomunitat de Catalunya el año 1921, que tenía como objetivo principal la realización de estudios al servicio de los organismos técnicos estatales y de la industria privada.^[27] Con el tiempo este Instituto tendría secciones de Electrotecnia, Química Industrial, Metalurgia y Metalografía, Cemento y hormigones, Física Industrial, Piel y curtidos, y Celulosas.

Un momento decisivo en la vida científica de Pascual y, de hecho, de buena parte de la investigación experimental en Cataluña, fue la construcción en la zona universitaria de Pedralbes, del Centro de Investigación y Desarrollo (CID) –conocido coloquialmente como “el Patronato”– formado por dos edificios intercomunicados de 1600 m², que llegó a ser, posiblemente, el centro de investigación más grande y potente de Cataluña. Este centro, además del Instituto de Química, albergaba el Instituto Textil y de Curtidos y el Departamento de Farmacología. En la actualidad el centro lleva su nombre “Centro de Investigación y Desarrollo Josep Pascual Vila”, e integra el “Instituto de Química Avanzada de Cataluña” y el “Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios sobre el agua”.

ACTIVIDAD CIENTÍFICA^[28]

Como se ha indicado, la tesis doctoral de Pascual abordaba los reactivos de Grignard, tema de gran actualidad en aquel momento, en que Victor Grignard había sido galardonado con el Premio Nobel en 1912. Esta línea de investigación la había importado García Banús, de su estancia en Zurich con Julius Schmidlin. En concreto estudiaba la reacción del cloruro de bencilmagnesio con cetonas y alde-

hídos; este campo fue recuperado por Pascual en Salamanca, en la tesis de José Cerezo, en distintos trabajos sobre la bencilbenzoína.^[29]

En una primera aproximación, las principales aportaciones científicas de Pascual, pueden concretarse las siguientes líneas:

1. *α-aminocetonas*. Iniciada en Sevilla se prolongó hasta 1959, con la ampliación al estudio de β-hidroxi-α-aminoácidos (homoserinas); de la serina se consiguió resolver los derivados *eritro* y *treo*, por métodos químicos.
2. *Estereoquímica de cicloalcanos*. Pascual se sintió especialmente atraído por los aspectos estereoquímicos, campo iniciado en 1940, que le ocupó prácticamente hasta su jubilación. Se sintetizaron los ácidos 2-hidroxiciclanocarboxílicos con ciclos de 5, 6 y 7 átomos de carbono. Se separaron los isómeros geométricos y se determinaron sus constantes de acidez. En la serie del ciclohexano se resolvieron los isómeros ópticos y se determinó la configuración absoluta de los productos y se correlacionó la preferencia ecuatorial-axial de los grupos carboxilo e hidroxilo.
3. *Ortoesteres y pseudoesteres*. Línea desarrollada entre los años 40 y 50, con el objetivo de preparar éteres de enol para estudiar la mayor o menor facilidad de enolización de productos con más de un grupo enolizable. Se pudo encontrar una reacción diferencial de orto y pseudoesteres.
4. *Pironas y butenolidas con actividad antibiótica*. Entre 1955 y 1965, financiado por la Fundación Juan March. Se demostró que la adición intramolecular de un grupo carboxilo al triple enlace de cadenas de but-2-en-4-inos conduce a butenolidas en vez de pironas como se había supuesto.
5. *Alcoholes terpénicos monocíclicos*. Campo iniciado tras su jubilación de la cátedra, fue financiado por el Departamento de Agricultura de los EUA. Consistió en la síntesis y aislamiento en estado puro, de una serie de mentanoles y mentoles saturados e insaturados con hidroxilos en las posiciones 7 y 9, con el fin de disponer de patrones para el estudio y revalorización de residuos forestales, interesantes para dicho organismo.
6. *Reductodímeros de la pulegona*. Tema iniciado también tras su jubilación, su último artículo trata de este tema.^[30] Se pretendía contribuir al estudio de la dimerización reductiva de cetonas α-etilénicas y a la posible obtención de derivados útiles de la pulegona, además de su reducción a mentoles. Por sus implicaciones estereoquímicas y la habilidad experimental requerida en el aislamiento y purificación de los diversos productos, fue uno de sus temas preferidos. La falta de la instrumentación adecuada obligó a la asignación estructural exclusivamente por métodos químicos. En 1986 –como muestra de la excelente investigación del grupo de Pascual– se

confirmó por difracción de rayos X las configuraciones absolutas asignadas al reductodímero principal de la pulegona.^[31]

Dirigió una cincuentena de tesis doctorales y publicó más de un centenar de artículos, una buena parte de ellos en revistas especializadas de nivel internacional. Es destacable la preocupación que tuvo por enviar a sus discípulos a realizar estancias postdoctorales en centros extranjeros y la relación intensa que mantuvo con muchos colegas europeos y americanos, lo que permitió establecer un nivel de actividad científica en su laboratorio y en el cultivo de la Química Orgánica poco frecuente en la universidad de aquellos tiempos.

VIDA INSTITUCIONAL

En su condición de catedrático y director de institutos del CSIC, participó de manera regular en la elaboración de nuevas directrices en los ámbitos académicos y de organización de la investigación del país, como miembro de numerosos tribunales de oposiciones a cátedras universitarias –principalmente de Química Orgánica, pero también de Química Técnica en los años 40– y de comisiones *ad hoc* del Ministerio y del CSIC para la elaboración, principalmente, de nuevos planes de estudio.^[32]

Pascual tuvo además una actividad destacada en la vida oficial e institucional barcelonesa: entre otros aspectos cabe señalar su decisivo papel en la creación del Colegio de Químicos de Cataluña y en la de la sección local de la Asociación de Químicos de España (ANQUE), de los que fue su primer decano y presidente, respectivamente. Ingresó en la RACAB en 1942, de la que fue presidente de 1962 a 1977, período en que se conmemoró el segundo centenario de su fundación, con diversas publicaciones y un conjunto de actos –con la pleitesía, propia de la época, a las autoridades– como la concesión de la Medalla del Bicentenario al Jefe del Estado. En octubre de 1965 se celebró en Barcelona el “XXXII Congreso Internacional de Química Industrial”, del que fue vicepresidente del Comité ejecutivo y presidente del Comité Científico-técnico. En el campo de colaboración con organizaciones empresariales cabe destacar su participación en la “II Semana de la Técnica Textil”, organizada por la patronal catalana Fomento del Trabajo Nacional, el mes de noviembre de 1960. Así como en la “Campaña de apoyo y estímulo a la Industria Nacional”, organizada para conmemorar el cincuentenario de la Cámara Oficial de Industria de Cataluña, celebrada en la primavera de 1964. Formó parte del grupo piloto, patrocinado por el Banco Urquijo, que estudió las necesidades de petróleo de la industria catalana, presentado al Ministerio de Industria en junio de 1969. Mantuvo también una cierta presencia en los medios de comunicación barceloneses, con la publicación de artículos sobre la importancia de la investigación científica para el desarrollo del país, actitud poco practicada en aquellos tiempos.^[33] En este ámbito divulgador, puede incluirse el

discurso inaugural del curso 1951-52, “La Química en la Facultad de Ciencias de Barcelona”, en el que muestra su interés por los aspectos históricos de la química y la entidad.^[34]

Como consecuencia de todas estas actividades aquí resumidas, Pascual recibió numerosos reconocimientos en distintos ámbitos que van desde la Medalla de Oro de su ciudad natal, pasando por el Premio de investigación y Medalla al mérito científico del Ayuntamiento de Barcelona, hasta el Premio Francisco Franco de Investigación y la gran cruz Alfonso X el Sabio.

CONCLUSIONES

Posiblemente, uno de los mayores méritos a reconocer en la trayectoria de Pascual es el elevado número de discípulos que ocuparon y aún ocupan cátedras en distintas universidades y en institutos de investigación, principalmente del CSIC. Como ejemplo, se pueden citar, los profesores universitarios José Cerezo (Salamanca), Ricardo Granados (Valladolid, Granada y Barcelona), Ramón Carreras (Barcelona), Josep Castells (Autónoma de Barcelona y UB), Ramón Mestres (Valencia), Josep Font (Autónoma de Barcelona), Marcial Moreno (Autónoma de Barcelona), Pelayo Camps (Valencia y UB). En El CSIC han desarrollado su actividad, entre otros, Manuel Ballester, Félix Serratos, M.^a Ángeles Ferrer, Juan Castañer, Francesc Camps, José M.^a Roqué, Josep Coll. Con ello consiguió dar continuidad a una escuela de Química Orgánica en Barcelona, cuyos orígenes cabe buscarlos en los laboratorios que García Banús organizó al incorporarse a la UB, en 1915.

Este hecho, reconocimiento y consolidación de un maestrazgo, científico en este caso, iniciado antes de la Guerra Civil debe destacarse de manera singular, dada la cultura ahistórica en la que lamentablemente se forman hoy las nuevas generaciones de químicos. En el contexto de la dictadura de Franco y también en el período democrático después de la transición, cualquier alusión a los orígenes de un determinado grupo de investigación, se ha venido asociando a un “padre fundador”, que en los años 1950 creó, desarrolló o inventó una nueva disciplina, ignorando así la existencia de una generación de científicos marginada por la Guerra Civil y la represión posterior, pero cuya cultura científica permeó de manera más o menos explícita en el nuevo régimen. Es precisamente en esta clave que cabe entender la escuela de Química Orgánica de Pascual, su continuidad y prestigio durante el franquismo.

AGRADECIMIENTOS

A Ramon Pascual, presidente actual de la RACAB, por facilitarnos el acceso a la correspondencia privada de Josep Pascual, y a Josep Font Cierco, académico y director de la biblioteca, por la clasificación de la misma.

BIBLIOGRAFIA

- [1] M. Lora-Tamayo, *La investigación química española*, Alhambra, Madrid, **1981**.
- [2] El papel determinante jugado por la JAE en el renacimiento de la ciencia española experimentado durante el primer tercio del siglo pasado, la denominada Edad de Plata, ha sido ampliamente estudiado y por ello no se insistirá más aquí. J. M. Sánchez Ron (ed.) *La Junta para Ampliación de Estudios 80 años después*, CSIC, Madrid, **1988**. L. E. Otero Carvajal, J. M. López Sánchez, *La lucha por la modernidad. Las ciencias naturales y la Junta para ampliación de estudios*, Publicaciones de la Residencia de Estudiantes, Madrid, **2012**, 127-181.
- [3] RACAB. www.racab.es/es/academics/historics/numerais-h/p/pascual-vila. Consultado el 15 de noviembre de 2016.
- [4] Una amplia relación de antecedentes biográficos de Enrique Moles se encuentra en: J. Sales, A. Nieto-Galan, Enrique Moles (1883-1953). Esplendor y represión de la ciencia en España. *Anal. Quim.*, **2014**, *110*, 152-161.
- [5] A. Romero de Pablos, *La europeización de la ciencia*. Cabrera, Moles, Rey Pastor, Nívola, Tres Cantos, **2002**.
- [6] A. Nieto-Galan, Free radicals in Europe periphery: translating organic chemistry from Zurich to Barcelona in the early twentieth century. *Brit. J. Hist. Sci.*, **2004**, *37*, 167.
- [7] J. Casassas, F. García, J. M. Fullola (coord.) *La Universitat de Barcelona*. Publicacions de la UB, Barcelona, **2008**. J. Sales, *La Química a la Universitat de Barcelona*. Publicacions de la UB, Barcelona, **2011**.
- [8] J. Fontana, R. Villares (directores) *Historia de España*, vol. 8, J. Casanova, “*República y guerra civil*”. Crítica/Marcial Pons, Barcelona, **2009**.
- [9] Archivo General de la Administración, AGA, Educación. Expediente José Pascual Vila, 21-2047-00085
- [10] A. Nieto-Galan, From papers to newspapers: Miguel Masriera (1901-1981) and the role of science popularization under Franco regime. *Science in Context*, **2013**, *26*, 527-549.
- [11] F. de Madariaga, *Las industrias de Guerra de Cataluña durante la Guerra Civil*, Tesis doctoral, Universitat Rovira i Virgili, Tarragona, **2003**. P. Pagès, La Comisión de la industria de guerra en Cataluña. *Ebre*, **2008**, *38*, 43-64.
- [12] G. Lusa, *La Escuela de Ingenieros en Guerra (1936-1939)*, Barcelona, Documentos de la Escuela de Ingenieros Industriales de Barcelona, Número 17, **2007**.
- [13] J. Claret, *El atroz desmoche*, Crítica, Barcelona, **2006**. L. Otero Carvajal, et. al., (dirs.), *La destrucción de la ciencia en España: depuración universitaria en el franquismo*, Editorial Complutense, Madrid, **2006**. L. Otero Carvajal (dir.), *La universidad nacionalcatólica. La reacción antimoderna*. Universidad Carlos III de Madrid-Editorial Dykinson, Madrid, **2014**.
- [14] AGA, Educación. Expediente de depuración de José Pascual Vila, 21-2047-00085.
- [15] Arxiu General Històric de la Universitat de Barcelona. Expediente de depuración de José Pascual Vila, X-T.3.
- [16] Arxiu General Històric de la Universitat de Barcelona. Expediente de depuración de José Pascual Vila, X-T.3
- [17] AGA, Educación. Expediente de depuración de José Pascual Vila, 21-2047-00085.

- [18] S. Riera Tuèbols, *La història de la ciència a la Catalunya moderna*. Eumo editorial, Vic, **2003**. Pág. 209.
- [19] J. Sales, *La Química a la Universitat de Barcelona*. Edicions de la UB, Barcelona, **2011**. Pág. 38.
- [20] AGA, Educación. Expediente de depuración de José Pascual Vila, 21-2047-00085.
- [21] José Pascual. *Lecciones de química general para estudiantes de medicina*. Herder, Barcelona, **1951**.
- [22] Gmelin-Institut für Anorganische Chemie und Grenzgebiete. *Handbuch der Anorganischen Chemie*. Springer, Berlín, **1927-1995**.
- [23] Beilstein-Institut für Literatur der Organischen Chemie. *Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie*. Springer, Berlin, **1918-1995**.
- [24] *Reglas de nomenclatura de la química orgánica y de la química biológica según la IUPAC*. Bayer Hnos., Barcelona, **1953**. *Nomenclatura química orgánica. Reglas definitivas acordadas por la IUPAC*. RSEFQ, Madrid, **1960**.
- [25] L. Calvo (ed.), *El CSIC en Cataluña (1942-2012): siete décadas de investigación científica*. CSIC, Barcelona, **2012**. A. Malet, El papel político de la delegación del CSIC en Cataluña. *Arbor*, **1998**, 631, 431-439. J. Josa, Medio siglo del CSCIC en Cataluña. *Arbor*, **1994**, 588, 49-62.
- [26] A. Malet, José María Albareda (1902–1966) and the formation of the Spanish Consejo Superior de Investigaciones Científicas. *Ann. of Sci.*, **2009**, 66, 307-332.
- [27] Arxiu de la Diputació de Barcelona. Q 626, 1946, Exp. 26.
- [28] J. Castells, F. Serratosa, *Obra científica del Profesor Dr. José Pascual Vila*. Eunibar, Barcelona, **1982**. F. Camps, *La química en el CID-CSIC: 40 años de labores científicas en El CSIC en Cataluña (1942-2012): siete décadas de investigación científica*, Luis Calvo (editor), CSIC, Madrid, **2012**. J. Font Cierco, Química 1950-2000. *An. Quím.*, **2015**, 111, 21-24.
- [29] J. Pascual, J. Cerezo, Sobre la bencilbenzoína. *An. Quím.*, **1925**, 23, 76-78.
- [30] F. Muñoz-Madrid, J. Pascual, Dimerización reductiva de la (R) (+)-pulegona. *An. Quím.*, **1978**, 74, 1270-1276.
- [31] M. Kikuchi, Z. Taira, Molecular structure of a reductive dimer of pulegone. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **1986**, 59, 3659-60.
- [32] Archivo de la RACAB. Correspondencia de José Pascual.
- [33] Ver, por ejemplo, "La Investigación Científica" en *La Vanguardia Española*, 14.12.1962.
- [34] Depósito digital UB. <http://diposit.ub.edu/dspace/handle/2445/100266>. Consultado el 15 de noviembre de 2016.



ISMSC
ISACS | 2017

2-6 July 2017 Cambridge, UK

12th International Symposium on Macrocyclic and
Supramolecular Chemistry in conjunction with
ISACS: Challenges in Organic Materials &
Supramolecular Chemistry

Determinación de la constante de Avogadro mediante un experimento de electrólisis realizado con productos de bajo coste

Antonio Tomás-Serrano y Rafael Garcia-Molina

Resumen: Se presenta un procedimiento sencillo y barato, basado en la electrólisis del sulfato de cobre, para determinar el valor de la constante de Avogadro N_A . Mediante la pesada independiente de la masa metálica que forma el depósito, en función del tiempo que dura la electrólisis, se obtienen resultados numéricos para N_A en muy buen acuerdo con el valor aceptado internacionalmente. Este hecho es remarkable, dadas las características del dispositivo experimental empleado, basado en el uso de materiales cotidianos y de bajo coste. Dada la buena calidad del resultado, así como la sencillez y economía de medios, esta actividad representa un excelente complemento para la discusión del concepto de mol y la cantidad numérica que tiene asociada.

Palabras clave: Constante de Avogadro; Electrólisis; Experimentos de bajo coste.

Abstract: A simple and inexpensive procedure, based on the electrolysis of copper sulfate, is presented to determine the value of Avogadro's constant N_A . From the weight of the metallic mass deposited in this process (weighted independently of the anode), measured as a function of the duration of the electrolysis, numerical results for N_A are obtained in very good agreement with the internationally accepted value. This is a remarkable fact, given the characteristics of the experimental set up employed, which is based in the use of household and low cost materials. Given the quality of the result, as well as the simplicity and economy of devices, this activity represents an excellent complement to the discussion of the concept of mole and the associated numerical quantity.

Keywords: Avogadro's constant; Electrolysis; Low cost experiments.

INTRODUCCIÓN

La constante de Avogadro, N_A , corresponde a la cantidad de entidades elementales (átomos, moléculas, electrones, etc.) contenidas en un mol de dichas entidades. Como el tamaño de estas partículas es muy pequeño, el número correspondiente a N_A resulta ser extraordinariamente grande. En las Refs. 1 y 2 puede encontrarse una breve discusión sobre su determinación y el uso del nombre Avogadro en su designación. El valor de la constante de Avogadro no se logró medir con precisión hasta principios del siglo xx; en la Ref. 3 puede encontrarse una exposición más detallada sobre los progresos reali-

zados en su determinación. Actualmente se acepta que $N_A = 6.02214129 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.^[4,5]

La determinación del valor numérico de N_A tiene una importancia crucial, ya que en él se basa la definición de la unidad para la cantidad de sustancia en el Sistema Internacional.^[6] De hecho, recientemente se ha discutido la posibilidad de definir la unidad de masa en término de la constante de Planck h , para lo cual es necesario una determinación de N_A con una gran precisión, ya que h se puede obtener a partir de N_A (y viceversa), usando otras constantes fundamentales que se conocen con mayor precisión.^[7,8]

De los diferentes métodos que hay para determinar el valor de N_A , posiblemente el más empleado sea el basado en la coulombimetría (que consiste en medir la cantidad de electricidad necesaria en una reacción de electrólisis para transformar una masa conocida). Puesto que la constante de Faraday es la carga eléctrica de un mol de unidades elementales de carga y su valor es conocido, $N_A \cdot e = 96485.3365 \text{ C}$, siendo $e = 1.602176565 \times 10^{-19} \text{ C}$ la carga elemental,^[5] es posible determinar el valor de N_A si se conoce la masa de la sustancia que se ha obtenido cuando ha circulado una carga determinada en una reacción de electrólisis.

En la actividad experimental que se presenta a continuación se utilizará este método, basado en la electrólisis, dada la sencillez y bajo coste del dispositivo experimental necesario, así como la calidad de los resultados obtenidos. En comparación con otros métodos similares,^[9] en nuestro caso no se precisa disponer de una fuente de alimentación que suministre una intensidad de corriente constante ni es necesario pesar los electrodos antes y después del paso de la corriente, puesto que el depósito electrolítico se puede pesar fácilmente de forma independiente.



A. Tomás-Serrano¹

R. Garcia-Molina²

¹ I.E.S. Vega del Táder
Avda. Gutiérrez Mellado. Molina de Segura, 30500 Murcia.
C. e.: atserrano@gmail.com

² Departamento de Física - Centro de Investigación en Óptica y Nanofísica,
Universidad de Murcia, 30100 Murcia.
C. e.: rgm@um.es

Recibido: 24/11/2016. Aceptado: 08/02/2017.

Esta actividad es adecuada para estudiantes de bachillerato y primeros cursos universitarios, dada la naturaleza de los conocimientos involucrados. Además, sirve para introducir y discutir el concepto de mol y la cantidad numérica asociada.^[10,11]

MATERIALES

Los materiales necesarios están presentes en cualquier laboratorio escolar o pueden adquirirse fácilmente (véase la Figura 1). A continuación se detallan estos materiales: una fuente de alimentación que suministre una diferencia de potencial comprendida entre 5 V y 24 V (se pueden usar dos pilas alcalinas –de larga duración– de 4,5 V conectadas en serie o, mejor todavía, un adaptador de c.a./c.c. como los que se emplean para cargar baterías o alimentar aparatos eléctricos, tales como una antena wifi, un ordenador portátil, etc.); un recipiente de material aislante de unos 10 cm de diámetro (puede servir un recipiente de uso alimentario); unos 100 cm³ de disolución de sulfato de cobre (CuSO₄); un cuentagotas; unos 40 cm de cable rígido de cobre (para los electrodos); un amperímetro (un polímetro ordinario); un cronómetro (se puede usar la función cronómetro de los teléfonos móviles), y una balanza que permita apreciar centésimas de gramo.

FUNDAMENTO

La discusión que se presenta a continuación corresponde a la electrolización de una disolución de sulfato de cobre, CuSO₄. El procedimiento es similar cuando se emplean otras sales, tales como ZnSO₄ o AgNO₃.

El cátodo debe ser de un material conductor que no reaccione con los iones de la disolución (por ejemplo, una varilla de grafito), aunque lo más sencillo es utilizar un cable

rígido de cobre. El ánodo ha de ser forzosamente de cobre para que al oxidarse, por acción de la diferencia de potencial que se aplica a la celda electrolítica, libere iones cobre, Cu²⁺:



Estos iones viajan a través de la disolución de CuSO₄ y, finalmente, se reducen al llegar al cátodo:

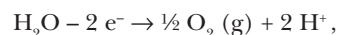


Por ello, el proceso global de esta celda (suma de las dos semi-reacciones) es:

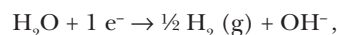


Como no ocurre cambio químico neto, sólo se necesitará una pequeña diferencia de potencial para que se inicie y se mantenga la corriente eléctrica. Obviamente, cuanto mayor sea el voltaje aplicado, mayor será la intensidad de corriente y más rápido será el proceso.

Además del cobre, también podría participar el agua en el transporte de la corriente eléctrica. Sin embargo, la fracción de corriente debida a la oxidación del agua (en el ánodo)



o su reducción (cátodo)



es insignificante en las condiciones en las que se lleva a cabo la electrólisis, tal y como se deduce al comparar los correspondientes valores de los potenciales normales de electrodo implicados ($E^\circ(\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}) = + 1,23 \text{ V}$, $E^\circ(\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}) = + 0,34 \text{ V}$, $E^\circ(\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2) = - 0,83 \text{ V}$) y del hecho, fácilmente observable, de que no hay desprendimiento de gases (O₂ y H₂) en los electrodos, ni formación de un precipitado (azul) de hidróxido de cobre, Cu(OH)₂, en las proximidades del cátodo, $\text{Cu}^{2+} + 2 \text{OH}^- \rightarrow \text{Cu(OH)}_2(\text{s})$.^[12]

De acuerdo con lo anterior, para que en el cátodo se produzca un depósito de un mol de cobre, cuya masa molar M es 63,55 g/mol, debe circular una carga igual a $2 \cdot N_A \cdot e$. Como en el experimento real circula una carga Q diferente (generalmente menor, dadas las características de los materiales utilizados), la masa m de cobre depositada en el cátodo estará relacionada con su masa molar M mediante:

$$\frac{m}{M} = \frac{Q}{2 \cdot N_A \cdot e}. \quad (1)$$

Si se mide la carga Q transferida en este experimento y la masa m del depósito metálico que se forma, se puede determinar el valor de N_A , puesto que conocemos el valor de la carga elemental e .

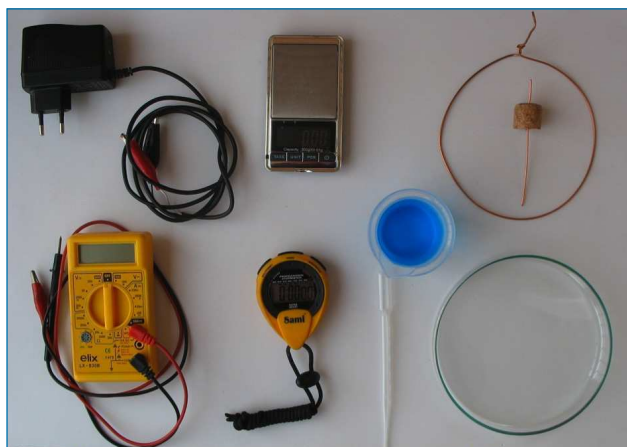


Figura 1. Materiales necesarios para llevar a cabo este experimento. En la parte superior derecha se muestran los dos electrodos de cobre: el ánodo circular y el cátodo central (insertado en un pequeño trozo de corcho para facilitar su sujeción mediante una pinza). Debajo de ellos se encuentra el recipiente que hará de celda electrolítica (con un diámetro ligeramente superior al del ánodo) y la disolución de CuSO₄. A la izquierda aparece la fuente de alimentación y los aparatos de medida (cronómetro, balanza y amperímetro)

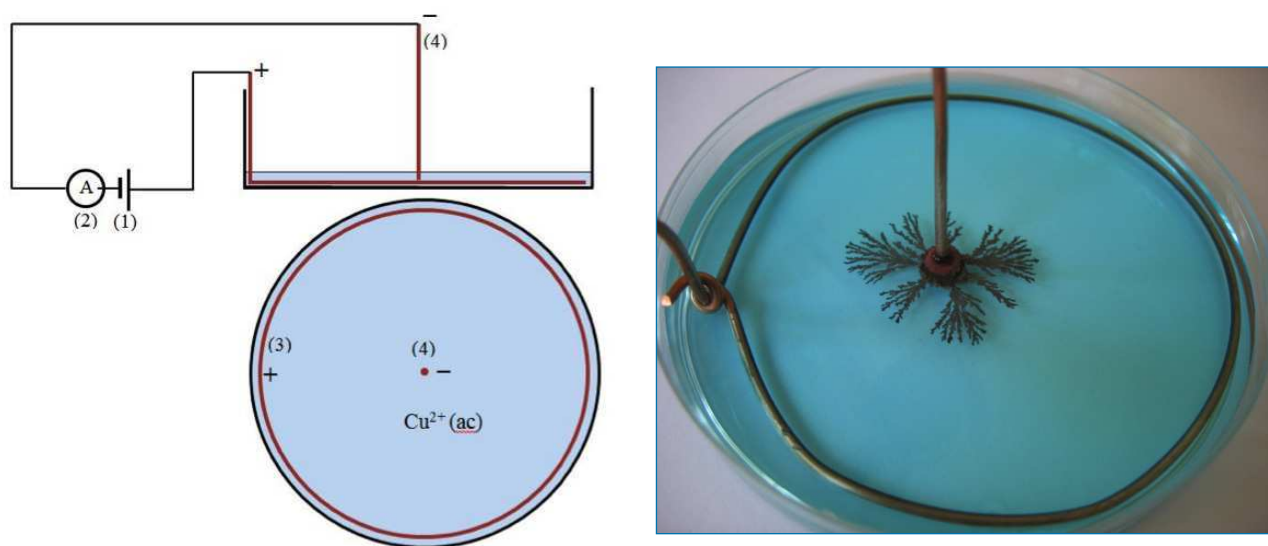


Figura 2. Izqda.: Alzado y planta de la celda electrolítica con los diferentes elementos que integran el circuito eléctrico. (1) Fuente de alimentación, (2) amperímetro, (3) ánodo circular de cobre rígido, (4) cátodo de cobre. Dcha.: Celda electrolítica (por conveniencia, se ha utilizado una placa Petri, pero se puede emplear un recipiente de uso alimentario) en la que se aprecia la formación de un depósito de cobre en torno al cátodo central.

El valor de la carga Q transportada por los iones cobre, se obtiene registrando el valor de la intensidad de corriente I que circula por la celda electrolítica a medida que transcurre el tiempo t . Como la resistencia eléctrica de la disolución disminuye al crecer el depósito metálico en torno al cátodo (y reducirse la distancia entre los electrodos), la intensidad de corriente aumenta al avanzar el proceso. Por este motivo se tomarán medidas de la intensidad, a intervalos de unos cinco minutos, con la finalidad de obtener un conjunto de valores (I, t) que permitan establecer una función $I(t)$ que muestre la variación de la intensidad en función del tiempo. El valor de la carga Q que ha circulado cuando ha transcurrido un tiempo $t = T$ será igual a la integral de la función $I(t)$:

$$Q = \int_0^T I(t) dt . \quad (2)$$

DISPOSITIVO EXPERIMENTAL

Aunque puede utilizarse un amplio abanico de voltajes y de concentraciones, debe tenerse en cuenta que, al aumentar los valores de estas magnitudes, también aumenta la intensidad de corriente. Por este motivo, además de calentarse excesivamente la disolución, se corre el riesgo de sobrecargar el aparato de medida y la fuente de alimentación. Por otra parte, deben evitarse las condiciones de trabajo en las que la intensidad de corriente sea demasiado baja, ya que esto implicaría un ritmo de crecimiento muy lento de la masa del depósito metálico.

Una forma de conseguir que la intensidad de corriente tenga un valor adecuado para nuestros fines consiste en colocar un ánodo circular, de unos 5 cm de radio, en la periferia del recipiente y situar el cátodo en el centro de la celda, tal y como se muestra en la parte izquierda de la Figura 2, en la que aparece un esquema del dispositivo experimental; en la parte derecha se observa cómo crece el depósito de cobre alrededor del cátodo, con una estructura ramificada cuyo estudio detallado pone de manifiesto un comportamiento fractal.^[13]

Bastará con preparar unos 100 cm³ de la disolución de sulfato de cobre, ya que sólo se empleará la cantidad imprescindible que garantice el paso de la corriente entre el ánodo y el cátodo (será suficiente disolver de 5 a 10 g de CuSO₄·5H₂O en 100 cm³ de agua). Téngase en cuenta que el valor de esta concentración no es crítico, puesto que todo el cobre que se deposita en el cátodo procede del liberado por el ánodo (por ello la concentración de la disolución de sulfato de cobre permanece constante). Conviene notar que si el sulfato de cobre estuviese contaminado con otra sal, se obtendría un error mayor en el valor de N_A que resulta al final de este trabajo. No obstante, si se desea experimentar con diferentes concentraciones, se puede preparar una disolución más concentrada (por ejemplo, 0,6 mol/L) y obtener, mediante dilución, el resto de disoluciones de concentración menor.

En la Tabla 1 se muestra la variación de la intensidad, frente al tiempo, correspondiente a uno de los experimentos que hemos realizado.

Tabla 1. Valores de la intensidad de corriente cuando se electroliza una disolución de CuSO₄, en un recipiente de 12 cm de diámetro, con una diferencia de potencial de 12 V, una concentración de 0,2 mol/L y un volumen de 50 cm³

t (min)	0	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55	60
I (A)	0,14	0,20	0,23	0,25	0,27	0,30	0,33	0,36	0,39	0,43	0,46	0,49	0,54

ALGUNAS CONSIDERACIONES A TENER EN CUENTA

Una vez realizado el montaje indicado en la Figura 2, se conectará la fuente de alimentación y comenzará a medirse la intensidad de corriente para pequeños intervalos de tiempo. Aunque en el ejemplo mostrado en la tabla 1 los intervalos son de cinco minutos, en la práctica estos intervalos pueden tener otro valor (o ser diferentes entre sí), siempre que sean suficientemente pequeños para que la intensidad de corriente no experimente un gran cambio entre ellos.

El tiempo debe comenzar a medirse en cuanto se conecte la alimentación, puesto que en ese momento empezará a depositarse cobre metálico en el cátodo.

Dado que la intensidad de corriente irá aumentando a medida que avance la electrólisis, es aconsejable realizar algún ensayo previo para seleccionar el rango de medida adecuado en el polímetro. Antes de llevar a cabo el experimento final, se filtrará la disolución para retirar el cobre que se haya depositado en estos ensayos previos (se puede utilizar papel de filtro ordinario).

Como medida de seguridad, se desconectará la alimentación y se dará por terminada la electrólisis cuando la intensidad de corriente alcance un valor próximo a 1 A, o el depósito de cobre esté a un centímetro de distancia del ánodo. Para evitar un cortocircuito, es importante que el depósito metálico no entre en contacto con el ánodo.

MEDIDA DE LA CARGA TRANSFERIDA

Para obtener la función $I(t)$ que mejor se ajusta a la serie de datos experimentales se puede utilizar una hoja de cálculo (u otro programa análogo). La Figura 3 muestra los resultados correspondientes a los valores recogidos en la Tabla 1.

La función $I(t)$ se ha obtenido al realizar un ajuste mediante un polinomio de segundo grado; con polinomios de

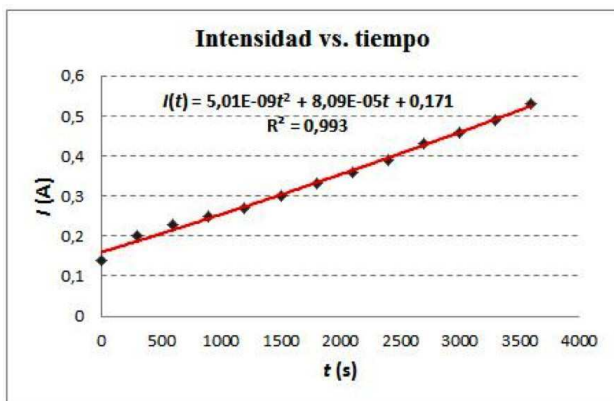


Figura 3. Representación gráfica de la intensidad de corriente frente al tiempo, para un experimento en el que el voltaje de alimentación es $V = 12\text{ V}$ y la concentración de la disolución de sulfato de cobre vale $c = 0,2\text{ mol/L}$. Obsérvese que el polinomio de segundo grado $I(t) = 5,01 \times 10^{-9} t^2 + 8,09 \times 10^{-5} t + 0,171$ se ajusta bastante bien ($R^2 = 0,993$) al conjunto de puntos experimentales

grado superior se consigue mejorar (aunque no sensiblemente) el resultado.

En cualquier caso, el cálculo de la integral que aparece en la Ecuación (2) es muy sencillo, dado que se trata de una función polinómica. Nótese que en una primera aproximación podríamos ajustar los puntos a una línea recta y el resultado sería similar al obtenido con el polinomio de segundo grado. Por otra parte, no es imprescindible el uso de un programa informático para la obtención de la carga transferida. En efecto, se puede hacer la representación de la intensidad frente al tiempo, en un papel milimetrado, y estimar el área bajo la curva como suma de áreas de rectángulos, de acuerdo con el procedimiento convencional para calcular el valor aproximado de una integral definida.

VALOR OBTENIDO PARA N_A

Transcurrido un tiempo T comprendido entre 45 y 80 minutos (dependiendo, sobre todo, del voltaje y de la concentración de la disolución) se dará por finalizada la electrólisis, se retirará el ánodo y, con una jeringa o un cuentagotas, se procederá a la extracción de la disolución de sulfato de cobre y de los posibles residuos que se hayan generado en el ánodo, procurando no aspirar partículas de cobre del depósito obtenido. A continuación, se puede añadir un pequeño volumen de agua destilada para efectuar una segunda extracción de restos de sulfato de cobre. La masa de cobre que se puede perder en estas operaciones de eliminación de la disolución es muy pequeña y no afecta sensiblemente al resultado final.

Una vez extraídos los electrodos y la disolución, el depósito electrolítico presentará un aspecto similar al mostrado en la Figura 4.

Se puede observar que el cobre se ha ido depositando, en torno al cátodo central, siguiendo un patrón de crecimiento muy especial, con una estructura ramificada que no ocupa la totalidad del espacio disponible, y que tiene un cierto grado de autosimilitud (las partes son similares al todo), por lo que este tipo de depósitos electrolíticos se pueden considerar como objetos fractales.^[13]

Una vez que el depósito esté seco y libre de restos de disolución, se medirá su masa con una balanza, para lo cual se habrá determinado previamente la masa de la celda electrolítica (sin los electrodos). De acuerdo con la Ecuación (1), el valor de la constante de Avogadro se obtiene mediante la expresión:

$$N_A = \frac{Q \cdot M}{2 \cdot e \cdot m} \quad (3)$$

Para el depósito de la parte izquierda de la Figura 4 (que corresponde a la gráfica mostrada en la Figura 3) se obtiene $m = 0,41\text{ g}$ y $Q = 1218\text{ C}$. Con estos resultados, la Ecuación (3) da un valor de $5,9 \times 10^{23}$ partículas/mol para N_A , que sólo difiere en un 2 % del valor aceptado, que es $6,022 \times 10^{23}\text{ mol}^{-1}$.^[4,5]

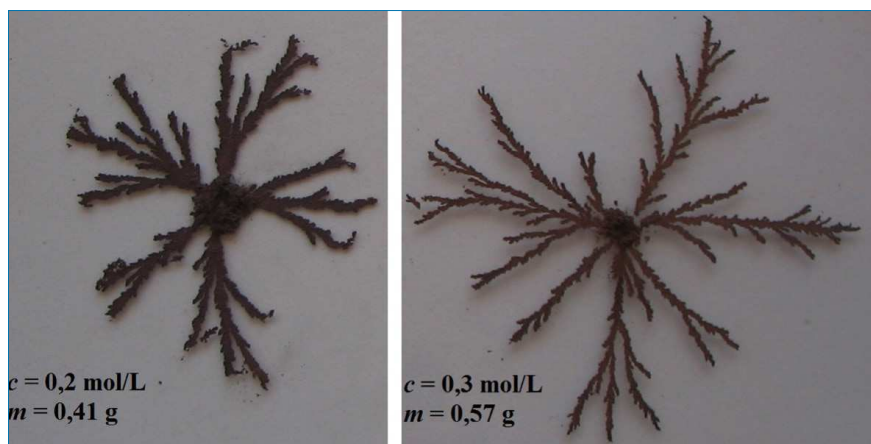


Figura 4. La masa y el aspecto final del depósito metálico dependen de las condiciones de trabajo. Los dos depósitos que se muestran en esta figura se han obtenido tras una hora de electrólisis y usando el mismo voltaje (12 V), pero con diferente concentración de sulfato de cobre; el de la izquierda corresponde a una concentración $c = 0,2$ mol/L, mientras que el de la derecha se ha obtenido para $c = 0,3$ mol/L. En general, cuanto menor sea la concentración de la disolución, mayor será la tendencia del depósito a disgregarse (como se aprecia en la figura de la izquierda)

PROPUESTAS COMPLEMENTARIAS DE TRABAJO

A continuación se sugieren algunas variantes que pueden enriquecer esta propuesta experimental. En primer lugar, este trabajo se puede llevar a cabo con depósitos electrolíticos de otros elementos, tales como cinc o plata. Al igual que en el caso del cobre, los electrodos deben ser del mismo metal que la sal empleada (p. ej. cinc y sulfato de cinc o plata y nitrato de plata, respectivamente). No se deben utilizar elementos que, al estar finamente divididos, se oxidan fácilmente (hierro, estaño o plomo).

Otro experimento complementario consistiría en observar cómo afectan las condiciones de trabajo a la estructura del depósito electrolítico. En este caso, se realizaría un montaje de dos o tres celdas dispuestas en serie, de modo que en cada una de ellas la disolución de sulfato de cobre tuviese diferente concentración, tal y como se representa esquemáticamente en la Figura 5.

En estas condiciones de trabajo, las tres celdas son atravesadas por la misma intensidad de corriente, por lo que los depósitos electrolíticos que se forman deben tener la misma masa. Ahora bien, como las condiciones de voltaje y de concentración son distintas en las tres celdas, los depósitos presentan formas diferentes, como puede apreciarse en la Figura 6.

Además de comprobar que estos depósitos tienen la misma masa (salvo errores inherentes al procedimiento

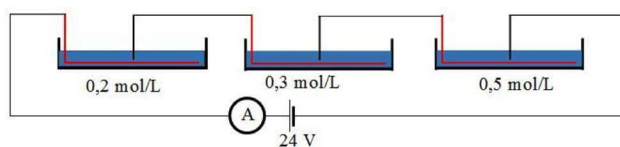


Figura 5. Esquema del montaje de tres celdas, conectadas en serie, con diferentes concentraciones de sulfato de cobre

experimental), también se pueden utilizar para determinar el valor de la constante de Avogadro, tomando el valor medio de la masa de los tres depósitos.

Si el profesor lo considera oportuno, se puede emplear este dispositivo experimental para estudiar cómo varía la diferencia de potencial en cada una de las celdas, a medida que avanza el proceso electrolítico.

Otro estudio complementario que se puede realizar es la comprobación experimental de que la concentración de la disolución de sulfato de cobre permanece constante durante el proceso. La forma más sencilla consiste en determinar la densidad de la disolución antes y después de llevar a cabo la electrólisis, para lo cual sólo se necesitará una bureta y una balanza que aprecie centésimas de gramo; en realidad, la concentración y la densidad de la disolución aumentan ligeramente debido a la evaporación del agua, sobre todo, cuando la intensidad de corriente es alta y se calienta la disolución por efecto Joule. Tanto si se realiza esta comprobación, como si no se hace, será interesante que los estudiantes observen cómo se reduce el grosor de un ánodo de cobre que haya participado en varios procesos de electrólisis, tal como puede apreciarse en la parte izquierda de la Figura 7.

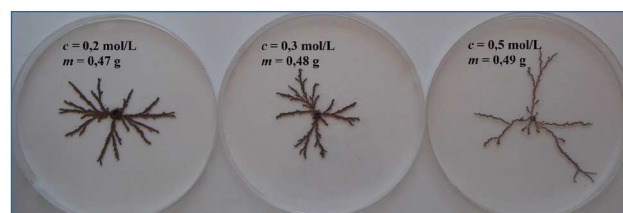


Figura 6. Depósitos electrolíticos de cobre obtenidos en tres celdas en serie alimentadas con una diferencia de potencial total de 24 V. El de la izquierda se obtuvo para una concentración de sulfato de cobre $c = 0,2$ mol/L, el central para $c = 0,3$ mol/L y el de la derecha para $c = 0,5$ M. Aunque tienen (prácticamente) la misma masa, presentan formas distintas



Figura 7. Fragmento de un cable de cobre que se ha usado varias veces como ánodo. Obsérvese la diferencia entre el grosor de la parte del electrodo que ha quedado dentro (izquierda) y fuera (derecha) de la celda electrolítica

Finalmente, para mostrar que el transporte de masa lo realizan iones cargados que se desplazan (casi) radialmente entre los dos electrodos, se puede colocar un imán bajo la placa Petri, con su campo magnético orientado perpendicularmente a la trayectoria de los iones. La forma en que crece ahora el depósito metálico indica que los iones se desvían a causa de la fuerza magnética que actúa sobre una carga en movimiento. En la Figura 8 aparece un ejemplo del depósito obtenido en las condiciones que se acaban de describir.



Figura 8. Depósito electrolítico obtenido situando un imán de neodimio bajo la placa petri, con su campo magnético orientado perpendicularmente a la superficie de la placa petri (debajo de la cual se halla). Puede comprobarse cómo en el crecimiento del depósito electrolítico subyace una desviación en el sentido horario

NORMAS DE SEGURIDAD Y REUTILIZACIÓN DE LOS MATERIALES UTILIZADOS

Aunque no se requieren cuidados especiales para manipular el sulfato de cobre, se debe manejar con guantes y evitar inhalar su polvo, ya que puede producir irritación en la piel y mucosas.

Las disoluciones empleadas en este trabajo se pueden reutilizar tantas veces como se desee, puesto que no experimentan ningún cambio químico durante la electrolisis y la pequeña evaporación, debida al calentamiento produci-

do por el paso de la corriente, no afecta al resultado final. Además, estas disoluciones y el cobre obtenido pueden emplearse para estudiar otras reacciones de oxidación-reducción.^[14] En ningún caso deben verterse al desagüe porque pueden ocasionar daños al medio ambiente. En su lugar, se puede recuperar el sulfato de cobre sólido mediante cristalización a partir de la disolución.

CONCLUSIONES

El experimento que se propone en este trabajo puede realizarse con alumnos del último año de bachillerato o primeros cursos universitarios. Requiere materiales que, generalmente, se encuentran en cualquier laboratorio. Es sencilla, rápida y proporciona un buen resultado (habitualmente, se obtienen valores con menos del 5 % de error respecto del valor aceptado para N_A).

Como actividad introductoria, el profesor podría llevar a cabo el clásico experimento de la estimación del valor de la constante de Avogadro mediante la medida del área de una capa monomolecular de aceite sobre agua.^[15,16]

Dependiendo del nivel del alumnado, puede que sea necesario dedicar algún tiempo a revisar el manejo del polímetro y de la hoja de cálculo. No obstante, no es imprescindible usar el cálculo integral para hallar el valor de la carga transportada por los iones. Bastará con ajustar los puntos obtenidos a una línea recta y hallar el área del correspondiente trapecio (la diferencia en el valor de Q usando este método y el cálculo de la integral es menor del 2 %).

Como ampliación, se puede llevar a cabo una pequeña investigación acerca de la influencia de las condiciones de trabajo sobre la estructura de los depósitos electrolíticos obtenidos, así como introducir algunos conceptos básicos de la geometría fractal que sean útiles para describir estas estructuras.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] W. B. Jensen, How and when did Avogadro's name become associated with Avogadro's number? *J. Chem. Educ.* **2007**, *84* (2) 223-223.
- [2] W. B. Jensen, Why has the value of Avogadro's constant changed over time?, *J. Chem. Educ.* **2010**, *87* (12) 1302-1302.
- [3] P. Becker, History and progress in the accurate determination of the Avogadro constant, *Rep. Prog. Phys.* **2001**, *64*, 1945-2008.
- [4] CODATA International Recommended 2014 values of the Fundamental Physical Constants <<http://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html>>
- [5] W. M. Haynes (ed.), *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 97th ed., CRC Press LLC - Taylor and Francis, Boca Raton, **2015**. <<http://hbcponline.com/>>
- [6] Bureau International des Poids et Mesures, *The International System of Units (SI)*, 8th ed. <http://www.bipm.org/utls/common/pdf/si_brochure_8_en.pdf>

- [7] L. Yang, Z. Mester, R. E. Sturgeon, J. Meija, Determination of the atomic weight of ^{28}Si -enriched silicon for a revised estimate of the Avogadro constant, *Anal. Chem.* **2012**, *84*, 2321-232.
- [8] S. G. Karshenboim, P. J. Mohr, D. B. Newell, Advances in determination of fundamental constants, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **2015**, *44*, 031101.
- [9] C. A. Seiglie, Determination of Avogadro's number by improved electroplating, *J. Chem. Educ.* **2003**, *80* (6) 668-669.
- [10] S. Novick, J. Menis, A study of student perceptions of the mole concept, *J. Chem. Educ.* **1976**, *53*, 720-722.
- [11] J. J. Andrade Gamboa, H. L. Corso, F. C. Gennari, Se busca una magnitud para la unidad mol, *Rev. Eureka Ens. Divul. Cienc.* **2006**, *3* (2), 229-236.
- [12] T. L. Brown, H. E. Lemay, B. E. Bursten. *Química, la ciencia central*. Prentice Hall, México, **1997**.
- [13] V. Talanquer, G. Irazoque, Fractals: to know, to do, to simulate, *Phys. Teacher* **1993**, *31* (2) 72-78.
- [14] A. Tomás, J. Hurtado, A. Martínez, J. Torregrosa, M. A. Cases, J. García, J. A. Cayuelas, *Física y Química enlatadas*. Aguaclara, Alicante, **2007**.
- [15] Nuffield Foundation, *Química*, Reverté, Barcelona, **1970**.
- [16] Nuffield Foundation, *Estimating the size of a molecule using an oil film* <<http://practicalphysics.org/estimating-size-molecule-using-oil-film.html>>



Universidad de
Castilla-La Mancha



X INTERNATIONAL SCHOOL
ON ORGANOMETALLIC CHEMISTRY
MARCIAL MORENO MAÑAS
5-7 JULY, 2017
CIUDAD REAL (SPAIN)

Los profesores Luis Liz-Marzán, José Luis Mascareñas y Antoni Llobet, nuevos miembros de la Academia Europea de Ciencias



Luis Liz-Marzán



José Luis Mascareñas



Antoni Llobet

Los investigadores Luis Liz-Marzán (Director Científico del CIC biomaGUNE), José Luis Mascareñas (Director Científico del CiQUS) y Antoni Llobet (Group Leader del ICIQ) han sido elegidos miembros de la Academia Europea de Ciencias (división de Química). Suman así su nombre a los de los dos únicos españoles que formaban parte de esta división (los profesores Luis Oro y Santiago Álvarez).

El profesor Luis Liz-Marzán, es Ikerbasque Professor y Director Científico del CIC biomaGUNE. Cuenta con una ERC Advanced Grant y ha sido galardonado con numerosos premios, incluyendo el Premio Rey Jaime I de Investigación Básica (2015) y la Medalla de Oro de la RSEQ (2014). Es miembro de la Real Academia Española de Ciencias y ha sido incluido en las listas de los investigadores más citados en Química y Ciencia de Materiales por Scopus (2016) y Thomson Reuters (2014, 2015, 2016). Es miembro del comité editorial y asesor de una larga lista de revistas científicas, entre ellas: *ACS Omega*, *Chemistry – A European Journal* y *Accounts of Chemical Research*.

El profesor José Luis Mascareñas, es Catedrático de la Universidad de Santiago de Compostela y Director Científico del CiQUS. Cuenta con una ERC Advanced Grant y ha sido galardonado con varios premios, incluyendo el premio de Química Orgánica de la RSEQ (2009), la Insignia de Oro de la Universidad de Santiago (2013), la Medalla de Oro de la RSEQ (2015). Es el representante español en la División de Química Orgánica de EuCheMS y miembro de los consejos editoriales de diversas revistas, entre ellas: *ChemBioChem* y *Asian Journal of Organic Chemistry*.

El profesor Antoni Llobet, es Catedrático de la Universidad de Barcelona y Group Leader en el Instituto de Cataluña de Investigación Química (ICIQ). En 2011 fue galardonado con el Premio Bruker de Química Inorgánica de la RSEQ y en 2012 fue galardonado con la conferencia “Hermanos Elhuyar-Hans Goldschmidt” que se otorga de forma conjunta por la RSEQ y la Sociedad Química Alemana (GDCh). En la actualidad es miembro del Consejo Editorial de las revistas *Catalysis Science and Technology*, *Inorganic Chemistry* y *European Journal of Inorganic Chemistry*.

Todas las noticias deberán enviarse a la Secretaría de Publicaciones pyanezs@ucm.es
Su publicación es discrecional al Comité Editorial de *Anales*.

M.^a Concepción Gimeno distinguida por la IUPAC como una de las doce mejores químicas del mundo en 2017

Nuestra querida amiga y compañera del GEQO, María Concepción Gimeno (Conchita, para todos los que tenemos el enorme placer de conocerla), ha sido distinguida por la IUPAC como una de las doce mejores químicas del mundo en 2017: “IUPAC 2017 Distinguished Women in Chemistry”. Este programa de premios se inició en el año 2011 para reconocer y promover el trabajo de mujeres que investiguen en cualquier ámbito dentro del campo de la Química e Ingeniería Química. El premio de este año ha prestado especial atención a seleccionar investigadoras con una capacidad contrastada de liderazgo y servicio a la comunidad científica durante el desarrollo de sus carreras investigadoras.

Conchita Gimeno desarrolla su trabajo en el Instituto de Química y Catálisis Homogénea (ISQCH) perteneciente al CSIC y a la Universidad de Zaragoza. Su interés investigador se ha basado en la obtención de compuestos del grupo 11 con propiedades ópticas, biológicas y catalíticas.

Conchita Gimeno realizó la Tesis Doctoral bajo la supervisión de los profesores Rafael Usón y Antonio Laguna. Posteriormente realizó una estancia postdoctoral con el profesor Gordon A. Stone en la Universidad de Bristol. En el año 1990 regresó a Zaragoza, incorporándose al ISQCH, donde actualmente ocupa una plaza de Profesora de Investigación adscrita al CSIC.

La productividad investigadora de Conchita Gimeno se ve reflejada en el altísimo número de publicaciones (230) en revistas internacionales de alto índice de impacto. A su labor investigadora hay que sumar que Conchita Gimeno ha desarrollado numerosas labores de gestión, alguna de ellas asociada a cargos vinculados a la RSEQ. Por ejemplo, en el período 2007-2016 fue Presidenta de



María Concepción Gimeno

la Sección Territorial de Aragón de la RSEQ, y vocal del GEQO desde 2010 a 2014. Ha sido miembro de la Comisión del Área de Ciencias y Tecnologías Químicas del CSIC en el período 2008-2012, y desde 2012 es la Vicedirectora del Instituto de Química y Catálisis Homogénea (ISQCH) de Zaragoza.

Los que tenemos la suerte de conocerla sabemos de su carácter amable y siempre dispuesto a ayudar. Espero que este reconocimiento sea sólo el primero de muchos otros por venir. ¡Enhorabuena, Conchita!

EDUARDO PERIS
Presidente del GEQO de la RSEQ

Toda la información sobre este premio la podéis encontrar en este enlace:

<https://iupac.org/iupac-2017-distinguished-women/>

La doctora María Vallet-Regí, elegida *Fellow* del American Institute for Medical and Biological Engineering (AIMBE)



La doctora María Vallet-Regí

La doctora María Vallet-Regí, catedrática de Química Inorgánica de la Facultad de Farmacia de la Universidad Complutense de Madrid, ha sido elegida *Fellow* del American Institute for Medical and Biological Engineering (AIMBE).

Para pertenecer al AIMBE es necesario que los *Fellows* sean nominados cada año por sus compañeros y que éstos representen el 2% de la comunidad médica y biológica. Será presentada en la Academia Nacional de Ciencias en Washington DC, en el mes de marzo de 2017.

Premios GEPRONAT 2016

PREMIO GEPRONAT-PHARMAMAR 2016 A LA EXCELENCIA EN LA INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA DE PRODUCTOS NATURALES

Ángel Rodríguez de Lera es Catedrático de la Universidad de Vigo desde 1998. Se doctoró en la Universidad de Santiago de Compostela (1983) y realizó una estancia postdoctoral con el profesor Okamura en la Universidad de California, Riverside. Su investigación se centra en la síntesis estereocontrolada de productos naturales que contienen motivos poliénicos, y en la Química Médica de moduladores de receptores nucleares y enzimas epigenéticas. Ha sido profesor visitante de las Universidades de Freiburg y Paris-Sud.



El doctor Ángel Rodríguez de Lera

PREMIO GEPRONAT 2016 A LA INNOVACIÓN EN INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA DE PRODUCTOS NATURALES

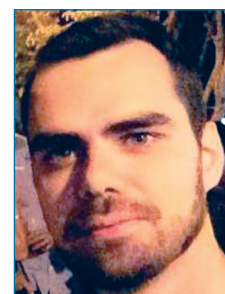


El doctor Teodor Parella

Director de la Unidad de RMN de la UAB y profesor asociado del Dpto. de Química de la UAB. Obtuvo el doctorado en Química (1993) bajo la supervisión del profesor A. Virgili. Ha publicado alrededor de 260 artículos científicos (incluyendo capítulos de libros y reseñas) principalmente en los campos de la espectroscopia de RMN y Química. En 2012, fue galardonado con el premio del grupo NMR especializado (GERMN) de la RSEQ. Su investigación incluye el diseño de modernas metodologías de RMN y su aplicación para resolver problemas estructurales y dinámicos en una variedad de condiciones y muestras. Algunos intereses actuales son, por ejemplo, estudios de enantiodiferenciación por RMN y el diseño de nuevas técnicas de RMN para la elucidación estructural de moléculas orgánicas y organometálicas complejas, así como productos naturales.

PREMIO GEPRONAT 2016 AL INVESTIGADOR NOVEL DEL GRUPO ESPECIALIZADO DEL GRUPO ESPECIALIZADO EN QUÍMICA DE PRODUCTOS NATURALES

El doctor José Antonio González Delgado es licenciado en Química (2009) por la Universidad de Huelva, Máster en Biotecnología (2010) por la Universidad de Granada y Doctor Internacional en Química (2014) en dicha Universidad bajo la dirección del profesor Dr. A. F. Barrero, la Dra. M. M. Herrador y el Dr. J. F. Arteaga trabajando sobre la "Química de la Interacción Sexual de los hongos Mucorales *Phycomyces blakesleeanus* y *Blakeslea trispora*". Durante su etapa pre-doctoral, hizo una estancia de investigación de 3 meses en la Universidad de Bristol (Reino Unido) bajo la dirección del profesor Dr. V. K. Aggarwal. En el período 2014-2016 disfrutó una beca postdoctoral Marie Curie ITN en la empresa "Inovapotek, Pharmaceutical Research and Development" (Oporto, Portugal). Ha publicado un total de 14 artículos, la mayoría de ellos en revistas de alto índice de impacto. Actualmente es profesor de Química Orgánica a tiempo parcial en la Universidad de Huelva.



El doctor J. A. González Delgado

PREMIO GEPRONAT 2016 A LA TRAYECTORIA CIENTÍFICA EN INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA DE PRODUCTOS NATURALES



El doctor B. M. Fraga González

Braulio Manuel Fraga González (Guía de Isora, Tenerife, 1944) se doctoró en Química por la Universidad de La Laguna (1970). En 1971 se le concedió el premio de Jóvenes Investigadores de la RSEQ. En 1976-1977 estuvo realizando tareas de investigación en la School of Molecular Sciences, Universidad de Sussex (Inglaterra). Previamente (1972) había obtenido puesto de Científico Titular en el CSIC, donde más tarde accedió a las plazas de Investigador Científico (1986) y Profesor de Investigación (1987), realizando su trabajo en el Instituto de Productos Naturales Orgánicos en La Laguna. En este centro del CSIC fue director en el período 1988-1991. Anteriormente había obtenido plaza de Profesor Agregado de Química Orgánica, Universidad de Valencia, (1981) y ya como supernumerario fue nombrado Catedrático de dicha especialidad (1983). Como Delegado y Coordinador Institucional representó al CSIC en la Comunidad Autónoma de Canarias en el período 1991-2014. Ha sido miembro del Comité Directivo de la Phytochemical Society of Europe (1998-2002), y del Consejo Editorial de las revistas científicas *Phytochemical Analysis* y *Steroids*. Después de su jubilación ha continuado realizando su labor en el Instituto de Productos Naturales y Agrobiología del CSIC como profesor "Ad Honorem". Sus temas de investigación se han centrado en el aislamiento, elucidación estructural, síntesis parcial, biosíntesis y biotransformación de productos naturales obtenidos de hongos y plantas, no sólo de especies naturales de estas últimas, sino de cultivo de tejidos y raíces transformadas. Ha dirigido veinticinco tesis doctorales y publicado más de 230 artículos científicos.

Emilio J. Cocinero, investigador de la UPV/EHU (Bizkaia, España), premio “Enrique Pérez-Payá” de la Sociedad Española de Biofísica

Emilio José Cocinero, investigador del Departamento de Química Física de la Universidad del País Vasco (<http://grupodeespectroscopia.es/MW/>), ha sido reconocido con el premio Enrique Pérez-Payá, un galardón que se concede anualmente en el transcurso del Congreso de la Sociedad de Biofísica Española que este año tendrá lugar en Sevilla. El prestigioso premio Enrique Pérez-Payá, reconoce la trayectoria de científicos jóvenes independientes (menores de 40 años), con contribuciones sobresalientes en el campo de la Biofísica, premiando así, a los investigadores jóvenes más brillantes a nivel nacional. Emilio J. Cocinero recibió el premio por “sus importantes contribuciones en el campo de la espectroscopía molecular”.

El acto de entrega del premio tendrá lugar en el marco de la *16th edición del Congreso de la Sociedad Española de Biofísica*, que se celebrará en Sevilla del 6 al 8 de junio. Con motivo de este premio, el doctor Cocinero impartirá una conferencia en el congreso que tratará sobre la aportación/posibilidades de la espectroscopía en el estudio de biomoléculas.

Emilio J. Cocinero es doctor en Química por la Universidad de Valladolid. Tras una estancia de casi tres años en la Universidad de Oxford, en enero de 2009 se vinculó a la Universidad del País Vasco en el Departamento de Química Física, donde dirige una línea de investigación centrada en resolver diferentes problemas estructurales de la Química a escala molecular. La trayectoria investigadora del doctor Cocinero ya ha sido reconocida con varios premios. En 2015 fue galardonado con el premio *Flygare*, por sus contribuciones sobresalientes en el campo de la Espectroscopía molecular. En 2012 la Real Sociedad



El doctor Emilio José Cocinero

Española de Química (RSEQ) concedió al doctor Cocinero el premio SIGMA-ALDRICH y la sociedad SusCHEM le otorgó el premio POSTDOC por la mejor publicación del año 2011 realizada por un joven investigador en cualquier área de la Química. Desde finales de 2014 es presidente del Grupo Especializado de Jóvenes Investigadores Químicos de la RSEQ.

Emilio Cocinero ha publicado más de 90 artículos en revistas de reconocido prestigio internacional, destacando sus publicaciones en *Nature*, *Angewandte Chemie International Edition*, y *Journal of the American Chemical Society*, entre otras.



**XIV SIMPOSIO DE INVESTIGADORES JÓVENES
DE LA REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUÍMICA**
REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUÍMICA - SIGMA ALDRICH (MERCK)
BADAJOZ, NOVIEMBRE 2017

Alfredo Pérez Rubalcaba imparte la conferencia “Química y Política” en la Facultad de Ciencias de la UMA con motivo de la celebración del “Día de la Química” organizado por la Sección Territorial de Málaga de la RSEQ

El profesor Alfredo Pérez Rubalcaba ha impartido en la Facultad de Ciencias de la UMA la conferencia “Química y Política”, con motivo de la celebración del “Día de la Química” en la Universidad de Málaga.

El acto, presidido por el Vicerrector de Investigación y Transferencia de la UMA, Juan Teodomiro López Navarrete, en su calidad también de Presidente de la Sección Territorial de Málaga de la RSEQ, fue introducido por el decano de la Facultad de Ciencias, Antonio Flores Moya, que dio la bienvenida a los asistentes y al conferenciante, mostrando “satisfacción por la oportunidad de recuperar la celebración del Día de la Química en la Facultad de Ciencias”. Ejerció como moderador Ezequiel Pérez-Inestrosa, catedrático de Química Orgánica de la UMA, en su calidad de miembro de la Junta Directiva de la Sección Territorial de Málaga de la RSEQ, haciendo una breve presentación del conferenciante, en su dimensión política, que tras tres décadas alejado de la docencia universitaria se reincorporó como profesor del departamento de Química Orgánica I de la Universidad Complutense de Madrid.

El profesor Pérez Rubalcaba ofreció una conferencia repleta de analogías entre la Química y la Política, sus dos grandes pasiones y ocupaciones. La conferencia la dedico a la memoria del fallecido catedrático de química orgánica de la UMA Rafael Suau, por el que expresó su reconocimiento como científico y persona. Comenzó hablando de políticos hiperreactivos: “si eres muy reactivo estás presente todo el tiempo y en todo lugar, pero acabas siendo muy poco eficaz”; principios químicos como “semejante disuel-

ve a semejante”, que en el caso de las coaliciones políticas, “unir a semejantes lleva generalmente a una disolución en favor del más fuerte. En política prefiero las emulsiones a las disoluciones”; pasando por distintos conceptos de estudio de las Ciencias Químicas, como la Cinética o la Termodinámica: “Las decisiones políticas tienen muchas veces más que ver con la velocidad de la Cinética, que con la estabilidad de la Termodinámica”.

Tras un turno de preguntas, cerró el acto el Vicerrector de Investigación y Transferencia de la UMA, Juan Teodomiro López Navarrete, quien destacó “la recuperación del Día de la Química en la Universidad de Málaga”, haciendo un pequeño repaso a sus ediciones y conferenciantes anteriores en la Facultad de Ciencias.

El “Día de la Química” es una celebración creada por los distintos organismos y asociaciones sectoriales y profesionales del sector químico en España, con el objetivo de impulsar la divulgación de la ciencia química y sensibilizar a la sociedad sobre su contribución a la mejora de la calidad de vida.

En el “Día de la Química” en la Universidad de Málaga han colaborado el Vicerrectorado de Investigación y Transferencia de la UMA, la Facultad de Ciencias, la Real Sociedad Española de Química y el Campus de Excelencia Andalucía Tech.

PROF. DR. EZEQUIEL PÉREZ-INESTROSA
Catedrático de Química Orgánica-UMA
Tesorero de la Sección de Málaga-RSEQ



Acto de la conferencia “Química y Política”, con motivo de la celebración del “Día de la Química” en la Universidad de Málaga

Homenaje a Antonio de Ulloa, descubridor del platino, en el 300 aniversario de su nacimiento

El pasado 26 de septiembre, Correos emitió un sello conmemorativo del 300 aniversario del nacimiento de Antonio de Ulloa (<http://bit.ly/2dIMQ09>). Además, también realizó un sobre de “primer día de emisión” con el correspondiente matasellos (<http://bit.ly/2i6JT5u>). Las imágenes de ambos materiales, disponibles en oficinas de Correos en enero de 2017, hasta que se agoten las ediciones, se muestran en las siguientes figuras.



La vida y obra de Antonio de Ulloa y de la Torre (Sevilla, 1716 – Isla de León, Cádiz, 1795) son apasionantes: oficial de marina, matemático, astrónomo, naturalista, escritor... Llegó a ser gobernador de Luisiana (un vasto territorio que entonces comprendía cuatro veces el de la España actual), entre otros cargos de la Administración.

Con solo 19 años (en 1735) fue destinado, junto con Jorge Juan y Santacilia (más conocido por el público general), a la emblemática “misión geodésica francesa”, liderada por los astrónomos Louis Godin, Pierre Bouguer y Charles Marie de la Condamine, encargada de medir la longitud de un grado de longitud en el ecuador terrestre, en una zona del actual Ecuador. La medida se compararía con otra realizada en Laponia y serviría para dilucidar una controversia polémica desde hacía varias décadas, con importantes consecuencias para la navegación y la cartografía, sobre si la Tierra estaba achatada por los polos (como había defendido Newton) o por el ecuador (como habían justificado Descartes y Cassini). Tras múltiples aventuras y trabajos científicos y militares en dicha expedición, en su retorno a Europa, ya en 1745, su barco fue apresado por corsarios británicos que le llevaron a Inglaterra, donde quedó retenido cerca de dos años. Allí fue especialmente apreciado por sus conocimientos científicos y le hicieron miembro de la *Royal Society*.

También cabe destacar que fue el fundador del Estudio y Gabinete de Historia Natural, antecesor del actual Museo Nacional de Ciencias Naturales. Una aproximación a su biografía, con bibliografía al respecto, puede encontrarse en la dirección web: <http://bit.ly/1LauQtL>.

En todo caso, es especialmente recordado en el ámbito de la química por ser el descubridor (durante el viaje científico antes mencionado) del platino. En concreto, encontró un mineral que se consideraba como impureza indeseable del oro, y se dio cuenta de que se trataba de un nuevo metal que, gracias a él, es el único elemento químico con nombre y símbolo derivados de un vocablo español. Era conocido como *platina*, y también como *platina del Pinto*, por estar localizado de forma relevante en las cercanías del río Pinto, cerca de la ciudad de Popayán en el Nuevo Reino de Granada (actualmente Colombia).

El sello se basa en el retrato realizado por Antonio Cortés y Aguilar en 1856 (seis décadas después del fallecimiento de Ulloa). Actualmente está en la Casa Consistorial de Sevilla. Una reproducción del mismo se expone en el Museo Naval de Madrid donde, además, están en venta llaveros, imanes de nevera y otros objetos basados en el retrato. Estos recursos constituyen una oportunidad para que docentes de distintas etapas educativas acerquen la figura de Ulloa a sus alumnos y al público en general.

Aparte de tener dedicadas calles en varias ciudades, como Quito, Madrid o Sevilla (justo en su casa natal) se indica, como curiosidad, que en la fachada del edificio de la sede del Ministerio de Agricultura y Pesca, Alimentación y Medio Ambiente, en la plaza de Atocha en Madrid, hay una escultura de Antonio de Ulloa, esculpida por José Alcoverro y Amorós en 1899. El edificio, inicialmente proyectado para alojar la Escuela de Artes y Oficios y posteriormente la Facultad de Ciencias, estuvo finalmente construido como sede del Ministerio de Fomento. Ambas obras, el cuadro y la escultura, se ilustran en las siguientes imágenes

Sirvan estas breves líneas como homenaje a la vida y obra de un sevillano universal, no suficientemente conocido ni reconocido en España, que brilla, como el platino, con “luz propia” en la historia de la química.

GABRIEL PINTO CAÑÓN

Grupo Especializado de Didáctica e Historia de las Reales Sociedades Españolas de Física y de Química



Patrimonium Hispalense. Ayuntamiento de Sevilla. Retrato del Almirante Antonio Ulloa, pintado por Andrés Cortés y Aguilar

Elena Soriano Santamaría (Logroño, 1973-2016)

Elena siempre permanecerá en nuestra memoria

Los que compartimos la vida con Elena conocemos su carácter firme pero cercano, marcado por fuertes convicciones, gran sensibilidad y un sentido del humor que sólo puede dar la inteligencia. Su nivel de compromiso y lealtad, junto con su gran interés y motivación por la ciencia la llevaron a ser una estudiante destacada en la UNED, e investigadora incansable del CSIC, con una trayectoria académica y científica ejemplar. Elena sufría una enfermedad degenerativa; sin embargo, las limitaciones físicas nunca fueron una barrera para ella, afrontando todos los desafíos que se le pusieron por delante con valentía, afán de superación y perseverancia casi de forma autodidacta.

La Química fue una de las grandes pasiones de Elena, concretamente la Química Orgánica. Siguiendo su verdadera vocación, Elena inició su carrera en el Colegio Universitario de La Rioja (1991), adscrito a la Universidad de Zaragoza y, finalmente, se licenció en Ciencias Químicas por la UNED (1996), obteniendo el premio al mejor expediente en Química de su promoción. Su gran capacidad de concentración, organización y superación le llevó a la consecución del siguiente objetivo que sería la realización de su Tesis Doctoral (ESS, “Química Computacional de Agentes de Contraste para Resonancia Magnética Biomédica”, UNED 2003) bajo la dirección de la profesora Ballesteros. A partir de entonces comienza su andadura postdoctoral iniciando la colaboración con investigadores de prestigiosos grupos nacionales e internacionales, participando y liderando proyectos de investigación financiados en convocatorias competitivas. En 2008 gana mediante oposición una plaza de Científica Titular, incorporándose al Instituto de Química Orgánica General del CSIC. Por entonces, su producción científica es ya notable, y su ritmo de investigación vigoroso en campos de investigación punteros en los que se especializa, destacando entre ellos el estudio de procesos catalizados por oro o platino y la síntesis de



moléculas complejas bioactivas. Elena es ya una investigadora de reconocido prestigio internacional en el estudio mecanístico de los procesos químicos mediante cálculos computacionales.

A partir de 2009, su salud empeora considerablemente. Sin embargo, después de algunos meses de inactividad, Elena vuelve a relanzar su trayectoria científica. Aún siendo su salud cada vez más delicada, en 2015, promociona a Investigadora Científica del CSIC. En su relación continuada en el tiempo con la UNED, formaba parte del Programa de Doctorado de esta universidad dirigiendo varias Tesis Doctorales; tarea difícil para llevarla a cabo a distancia. Sin embargo, Elena se las ingenió una vez más para poder formar a futuros investigadores no sólo en el campo de Química Computacional, haciendo fácil lo realmente difícil, sino también inculcando valores personales llegando a establecer vínculos de amistad más allá de la relación meramente académica.

Gracias a su trabajo, tesón, fuerza de voluntad y la iluminación de su mente privilegiada, Elena consiguió ser una investigadora destacada. Es autora de un centenar de publicaciones científicas de índice de impacto alto (índice-H 23, casi dos mil citas), en colaboración con prestigiosos investigadores nacionales e internacionales, varios capítulos de libro y patentes. La comunidad científica ha perdido, sin duda, a una investigadora de un valor extraordinario y los que estuvimos a su lado, sin que la distancia fuera un impedimento, una gran amiga y confidente a la que echamos de menos cada día.

Resulta sumamente complicado tratar de expresar qué ha supuesto Elena para nosotros a nivel profesional sin citar la palabra amistad, ya que sus enseñanzas en el campo del cálculo computacional han ido ligadas a un apoyo, confianza e intimidad, que sólo ella lograba conseguir, independientemente de la distancia o el medio de comunicación. Porque es absolutamente imposible dejar de admirar la capacidad de guía, tutela y enseñanza de una persona que, pese a las dificultades, siempre supo sobreponerse a ellas, convirtiéndose en un ejemplo a seguir para nosotros, tanto a nivel profesional como, especialmente, personal. Elena era paciente, cariñosa, disponible, positiva, tenaz, alegre, inteligente y su pérdida constituye un daño irreparable, dejando el vacío de una profesora y amiga que siempre supo insuflarnos el ánimo que, en ocasiones, no éramos capaces de encontrar. Sin embargo, no sería justo para ella recordarla de otra forma que no fuera por sus incalculables enseñanzas, desmesurado positivismo y amor por la ciencia. Por ello, ya sea a la hora de proponer una estructura de transición, como afrontando cualquier tipo de situación, Elena y su huella siempre nos acompañarán.

MARINA GODINO OJER y DANIEL GONZÁLEZ RODAL
Doctorandos, UNED

Elena era coqueta y presumida. Le gustaba leer libros en papel, escuchar música y el cine. A Elena le gustaba la belleza y la sencillez de las flores. Le gustaba pasear y contemplar la naturaleza (especialmente el mar Cantábrico), perderse en su infinitud. Y en esta infinitud, encontró la respuesta a algunas preguntas importantes de su vida. Amaba la libertad, la verdad y la coherencia. No rehuía el compromiso ni la dificultad. Cuidaba y mimaba a sus amigos de una forma que tan sólo ella sabía hacer. Siempre se adelantaba a tus pensamientos. Siempre tenía palabras de aliento, a veces “empujones” de aliento, y fue decisiva en la toma de decisiones importantes de nuestras vidas.

Elena, nos sigues guiando y acompañando.

ELENA PÉREZ MAYORAL, UNED
SONSOLES MARTÍN SANTAMARÍA, CSIC

Como hermanos de Elena, nada más podemos aportar en el terreno profesional, en el que la admiramos cada día y nos sentimos muy orgullosos. Sí nos gustaría añadir que, en lo personal, nos consideramos enormemente afortunados de tenerla como hermana, amiga y consejera incansable. Por su inteligencia, sensatez, cariño, sentido del humor... Un ejemplo de vida, de entrega, de valentía y de generosidad. Nosotros no seríamos los mismos sin su influencia, por lo cual nos sentimos unos privilegiados.

Siempre estará con nosotros.

YOLANDA SORIANO SANTAMARÍA
ALEJANDRO SORIANO SANTAMARÍA

George A. Olah

In memoriam

El pasado miércoles 8 de marzo falleció en su casa de Beverly Hills (Los Ángeles, CA) el profesor George A. Olah, Premio Nobel de Química del año 1994. Su carrera científica no transcurrió por un camino fácil. Nacido en Budapest el año 1927 y superviviente en esa ciudad de la Segunda Guerra Mundial, recibió una amplia educación que daría lugar a su afición por las humanidades que, siendo un científico, le acompañaría para siempre. Su primer contacto con la Química lo tuvo en la Universidad Técnica de Budapest, una institución exigente con sus estudiantes de la que, en su autobiografía, recordaba sus exámenes orales “do or die” en los que quienes fracasaban no podían continuar sus estudios. Pronto se sintió “intrigado” por la Química Orgánica y esto junto a su intuición química definiría su personalidad científica. Gran comunicador, su enorme curiosidad y habilidad para identificar lo sorprendente y lo desconocido de entre los resultados experimentales caracterizaron su carrera. Heredero de los conocimientos de Emil Fischer en sus comienzos como asistente de investigación del profesor G. Zemplen en Budapest, adquirió una sólida formación química. Desde el principio se interesó por la química de los carbocationes, área en la que S. Winstein desarrollaba un trabajo pionero en la década de los 50. Los carbocationes, postulados como especies intermedias en muchas transformaciones químicas, poseían una reactividad muy elevada y en consecuencia una vida media tan corta que impedía su aislamiento y caracterización. El propio Winstein sugirió también la existencia especies iónicas de carbono pentacoordinado para interpretar el reagrupamiento de los derivados de 2-norbornilo, compuestos muy presentes en la química orgánica alemana de la época. Esta idea fue ampliamente rebatida por H.C. Brown, quien años más tarde, en 1979, obtendría el Premio Nobel de Química. Sobre esta discrepancia se suscitó una enconada polémica, en la que subyacía una escasa comprensión de la



El profesor George A. Olah

naturaleza del enlace químico en los hidrocarburos, que contribuyó muy significativamente al desarrollo de la química orgánica física.

Olah hubo de renunciar a la Universidad y la Academia de Ciencias abandonando en 1956 una Hungría sacudida por la revolución. Emigró junto a su esposa Judith y su hijo incorporándose a la Compañía Dow Chemical inicialmente en Canadá y posteriormente en los Estados Unidos. Con su trabajo en la industria intuyó que la química carboiónica en la que se había implicado hasta

entonces, además de un interés teórico evidente, tenía aplicaciones prácticas de gran alcance. Descubrió que los iones carbenio, centrados en un átomo de carbono tricoordinado, podían generarse mediante superácidos, ácidos millones de veces más fuertes que los ácidos más fuertes conocidos y que habían sido descritos por aquel tiempo por el químico canadiense R.J. Gillespie. Además, observó que estos iones eran especies estables en un amplio intervalo de temperatura en medios de reacción no nucleofílicos como el SO_2 , SO_2ClF o SO_2F_2 . Tras describir el Ácido Mágico ($\text{HCF}_3\text{SO}_3/\text{SbF}_5$), un ácido capaz de disolver y fragmentar los hidrocarburos, y ya como Profesor de la Western Reserve University, más tarde CWRU (Cleveland, OH), pudo observar y caracterizar decenas de carbocationes y sus procesos de reagrupamiento. Utilizó para ello los métodos espectroscópicos habituales y muy especialmente la RMN de protón, flúor y carbono y la Espectroscopia Fotoelectrónica de rayos-X (ESCA), que eran métodos emergentes en los años 60. Ya en 1963 recibió la Medalla Priestley, Premio de la ACS en Química del Petróleo por su trabajo en química de Friedel-Crafts en relación con el refinado del petróleo. Otra de sus aportaciones de mayor transcendencia teórica y práctica fue el establecer inequívocamente el concepto de ion carbonio que implica la existencia de átomos de carbono penta-coordinados con carga positiva, zanjando así la controversia existente acerca del reagrupamiento de los derivados del norbornano. Mostró como, en los carbocationes, un carbono podía estar enlazado a otros cinco, seis o siete átomos. Con ello, abrió las puertas a una nueva química de hidrocarburos que permite su isomerización y transformación en otros de distinto peso molecular, un descubrimiento de aplicación inmediata en el campo de los combustibles líquidos. Desde 1977 desarrollo esta química ya como director fundador del Hydrocarbon Research Institut en la USC (Los Angeles, CA) puesto al que había accedido con el mecenazgo de Donald P. y Katherine B. Loker. Su curiosidad científica no se agotó en 1994 al ser galardonado con el Premio Nobel de Química por sus contribuciones a la química de los carbocationes y continuó investigando en este contexto sobre superelectrófilos. Junto a Surya Prakash, uno de sus estudiantes de

doctorado de finales de los años 70 y años después su más directo colaborador, colega y sucesor al frente del Loker Hydrocarbon Research Institute en la University of Southern California (USC), pronto desplazó su interés hacia la economía del metanol, un nuevo desafío que le planteó nuevos objetivos científicos como la conversión del metano o el dióxido de carbono en metanol. Su química siempre tuvo objetivos claros y concretos. Fruto de esta segunda etapa fueron el desarrollo de una pila de combustible para generar electricidad directamente de metanol sin producir primero hidrógeno y el desarrollo de nuevos procesos catalíticos para combatir tanto el efecto invernadero como la dependencia de los combustibles fósiles con la reducción del dióxido de carbono a metanol. Una tecnología verde desarrollada por Carbon Recycling International (CRI) en Islandia con una producción de 5 millones de litros de metanol a partir de 5500 toneladas de CO_2 . En su última intuición especulaba que el metanol, formado a partir de CO_2 y H_2 , pudiera haber sido la materia prima de las biomoléculas en el origen de la vida [*J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 566].

La originalidad y creatividad de sus planteamientos científicos y su perseverancia las recordaremos sólo como una parte secundaria de su personalidad. Ante todo fue una gran persona, cercana en su trato, que no olvidó sus orígenes como emigrante en los Estados Unidos. Fue siempre generoso con quienes tuvimos la fortuna de conocerle y trabajar con él, un grupo muy numeroso de estudiantes y asociados, al que gustaba referirse como la “Olah’s family”, y al que siempre recordaba mostrando su gratitud al recibir las numerosas distinciones a las que fue acreedor. Cerca de 1.500 publicaciones científicas, 160 patentes de siete países, incluyendo cuatro para la transformación del gas natural en hidrocarburos integrantes de la gasolina, 20 libros de los que fue autor y el hecho de que su Química ya forma parte de los libros de texto immortalizan su contribución a la Química.

GREGORIO ASENSIO
Departamento de Química Orgánica
Universidad de Valencia

Q. Garrido Garrido: *CIENCIA, y además entiendo!!!*, 2016

<http://www.madrimasd.org/blogs/fisicateorica/2017/01/30/370/>

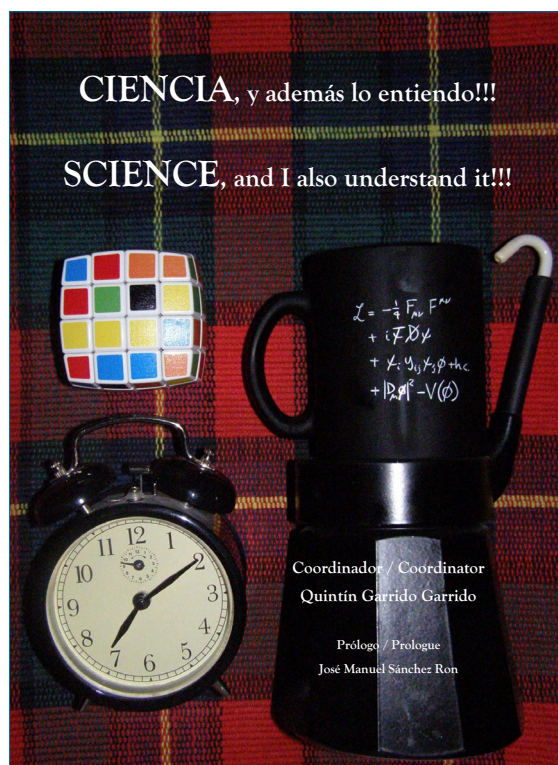
Era de suponer que, si científicos de distintas áreas y especialidades y sin una coordinación escriben en un blog, es muy difícil que salga un libro coherente sobre la ciencia. Se trata de un trabajo sin un hilo conductor como lo indica el hecho de que unas quinientas páginas tengan 82 apartados. Es demasiado ambicioso y con tanta variedad poco estructurado.

El nivel de los capítulos es, en general, de divulgación, aunque en algunos casos será más difícil de entender por alguien que sea ajeno a ese tema concreto. Por otra parte, está lleno de curiosidades científicas y es muy difícil que a cualquier lector después de molestarse en leer detenidamente el índice no haya señalado varios apartados que por el tema le pueden interesar, ya porque estén en el campo de sus preferencias o porque el título le llama la atención. No obstante puede que su curiosidad no quede demasiado satisfecha, salvo que ya tuviera una idea del tema, porque con frecuencia el autor de algunos capítulos da por supuesto conocimientos que están ligados o lo trata de forma tan resumida que no es muy fácil entender para profanos en ese tema. En este sentido, la variedad en el tratamiento de los diferentes temas es demasiado grande por la forma de enfocarlo y en algunos casos se completa con una bibliografía adecuada pero este complemento no siempre existe.

Nos preguntamos si podría servir como nexo de unión entre las dos culturas de las que hablaba Peter Snow en 1959 cuando refiriéndose a la cultura occidental decía que había una grave hendidura entre la cultura científica y humanística, idea que más tarde, en 1995, recogió Brockman con el nombre de *Tercera cultura*,^[1] argumentando que la ciencia a diferencia de las artes y humanidades siempre ha permanecido al margen de la vida social y cultural cosa que no pasa con las artes y humanidades, pero consideramos que difícilmente podría cumplir esta función.

Posiblemente se podría recomendar a alumnos en enseñanzas medias o de los primeros cursos de la universidad de las ramas de ciencias que con frecuencia se suelen hacer preguntas por temas muy diversos y con su lectura podrían resolver varias de sus preguntas.

No cabe duda que Quintín Garrido ha utilizado muchas de sus horas para estructurarlo, de forma que los temas a lo largo del índice sean similares, lo que siempre es de agradecer y algo ha conseguido pero la variedad es tan grande y los temas tan dispersos que ciertamente no se podría buscar otra solución.



En el apéndice aparece una justificación tomando como base la obra de Asimov *Cien Preguntas básicas*,^[2] de la que existen varias ediciones, sin embargo existe una diferencia importante, en ese caso el que contesta la pregunta es siempre el mismo autor y hace que el estilo del libro sea más coherente, y la contestación sea más escueta y concreta por parte de un buen divulgador, además son unas doscientas páginas.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] J. Brockman *The Third Culture: beyond the scientific revolution*, 1995, Nueva York: Simon & Schuster.
- [2] I. Asimov, *Cien preguntas básicas*, 1977, Alianza.

MANUELA MARTIN SÁNCHEZ
Didáctica de Ciencias Experimentales, UCM
mmartins@ucm.es

Nombres y símbolos en español de los elementos aceptados por la IUPAC el 28 de noviembre de 2016 acordados por la RAC, la RAE, la RSEQ y la Fundéu

El 28 de noviembre de 2016 la IUPAC (*International Union of Pure and Applied Chemistry*) publicó la tabla periódica de los 118 elementos químicos conocidos y aceptados con sus nombres y símbolos.^[1,2] En el informe realizado por el grupo de trabajo sobre terminología química de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) se recomendaba traducir al español los nombres de los elementos químicos de números atómicos 113, 115, 117 y 118 adoptados definitivamente por la IUPAC como *nihonio* (Nh), *moscovio* (Mc), *tennesso* (Ts) y *oganesson* (Og), respectivamente.^[3] Por otro lado, el Departamento de «Español al día» de la Real Academia Española (RAE) elaboró un informe sobre el nombre en español de los nuevos elementos de números atómicos 113, 115, 117 y 118 que fue aprobado con fecha 22 de diciembre de 2016 por la Comisión de Vocabulario Científico y Técnico de la RAE en el que proponían los nombres de *nihonio* (Nh), *moscovio* (Mc), *teneso* (Ts) y *oganesón* (Og), respectivamente. Ante las discrepancias surgidas en los nombres de los elementos de números atómicos 117 y 118, se decidió convocar una reunión entre representantes de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales (RAC), la RAE, la RSEQ, y la Fundéu sobre los nombres en español de todos los elementos químicos. Dicha reunión tuvo lugar el día 1 de febrero de 2017 en la sede de la RAC con el fin de adoptar un criterio unificado debido a la diferente grafía que se asignaba a algunos elementos químicos en español. Los asistentes fueron: José Elguero Bertolini (presidente de la RAC), Salvador Gutiérrez Ordóñez (académico miembro de la Comisión de Vocabulario Técnico de la RAE), Elena Hernández (directora del Departamento de «Español al día» de la RAE), Pascual Román Polo (coordinador del grupo de trabajo sobre terminología química de la RSEQ) y Javier Bezos López (ortotipógrafo y responsable de la Wikilengua en Fundéu BBVA). Se revisaron los nombres en español de todos los elementos químicos con el fin de asignar a cada uno de ellos un único nombre. A continuación, se indican los acuerdos adoptados en relación con los nombres que en este momento figuran en el *Diccionario de la lengua española* (DLE, 23.^a ed., RAE y ASALE, 2014) y con los ya aprobados para su incorporación en próximas actualizaciones:

1. Dar preferencia a la grafía *zinc* para el elemento de número atómico 30 y registrar *cinc* como variante, de acuerdo con el uso mayoritario. [Supone invertir la preferencia actual del DLE].
2. Mantener la preferencia por la grafía *kriptón* para el elemento de número atómico 36 y registrar *criptón* como variante, de acuerdo con el uso mayoritario. [Supone invertir la preferencia actual del DLE].
3. Dar preferencia a la grafía *circonio* en el nombre del elemento de número atómico 40 y registrar *zirconio* como variante, de acuerdo con el uso mayoritario.
4. Mantener la preferencia por la forma *telurio* como nombre del elemento de número atómico 52 y seguir registrando *teluro* como variante.
5. Dar preferencia a la grafía *yodo* en el nombre del elemento de número atómico 53 y seguir registrando *iodo* como variante, de acuerdo con el uso mayoritario.
6. Suprimir *tantalio* como variante de *tántalo*, único nombre que debe figurar para el elemento de número atómico 73.
7. Dar como preferida la denominación *wolframio* (variante *volframio*) para el elemento químico de número atómico 74, a pesar de que el nombre establecido en inglés por la IUPAC sea *tungsten* (español *tungsteno*). La RSEQ reivindica esa denominación por estar basada en el nombre que le dieron quienes primero aislaron este elemento, los hermanos Delhuyar, químicos riojanos.
8. Mantener el par *lawrencio/laurencio*, con preferencia por la primera forma, en el nombre del elemento de número atómico 103. La RAC valorará la posibilidad de incluir en su *Vocabulario científico y técnico* la variante *laurencio* (que ahora no figura), aunque mantendrá de momento la preferencia por *lawrencio* en espera de ver por cuál de las dos formas se decanta el uso mayoritario. *En la tabla periódica se dará también preferencia a la grafía más cercana a la etimología: lawrencio.*

9. Eliminar el nombre *kurchatovio* para el elemento de número atómico 104 (denominación adoptada por los rusos en el contexto de la Guerra Fría, que durante un tiempo compitió con el hoy definitivo *rutherfordio*). Se puede justificar la supresión por la ausencia en el *DLE* de denominaciones no vigentes hoy de otros elementos químicos.
10. Sustituir la grafía *hassio* (en cursiva) por *hasio* (en redonda) como nombre del elemento químico de número atómico 108. Se suprime *hassio* incluso como variante, pues la secuencia gráfica *—s—* es ajena al sistema ortográfico del español. La condición híbrida de esa grafía semiadaptada obligaba a escribir el nombre de este elemento en cursiva.
11. Sustituir la forma *darmstadio* por *darmstatio* para el elemento de número atómico 110, por ser la *t* la dental que se conserva en la pronunciación en inglés (al menos en el británico, pues en el americano se relaja y suena /d/, tal como puede comprobarse en las pronunciaciones que registra el *Oxford English Dictionary*: bit.ly/2kzO3AT, y por ser también /t/ el sonido final que presenta en alemán la ciudad que le da nombre: *Darmstadt* [därmʃtat].

12. Establecer las formas *teneso* y *oganesón* como nombres españoles de los nuevos elementos de números atómicos 117 y 118, respectivamente.
13. En relación con las pautas de la IUPAC para la creación de los nombres provisionales de los nuevos elementos químicos y el conflicto que se plantea con la norma ortográfica del español que obliga a escribir *m* antes de *p* o *b* (p. ej., ingl. *ununpentium* > esp. *ununpentio*), se sugiere que, si no se quiere aplicar esa norma ortográfica por considerar que oscurece la formación numérica composicional de esos nombres, se emplee la grafía inglesa (con terminación *-ium*) en cursiva hasta tanto se apruebe el nombre definitivo y su adaptación a nuestra lengua. El uso de la grafía original inglesa permite mantener las secuencias etimológicas *np* y *nb* inalteradas, mientras que su mantenimiento en la forma española (**ununpentio*, por ejemplo) supone la creación de formas semiadaptadas, híbridos que no responden ya ni a las pautas ortográficas inglesas ni a las españolas.

En la Figura 1 se recoge la tabla periódica de los elementos químicos propuesta por la RSEQ basada en la publicada por la IUPAC el 28 de noviembre de 2016 con los acuerdos citados anteriormente.

© 2017 Real Sociedad Española de Química

Tabla Periódica de los Elementos de la RSEQ

1																		2																											
H hidrógeno 1.008 (1,0079, 1,0082)																		He helio 4,0026																											
3 Li litio 6,94 (6,938, 6,997)		4 Be berilio 9,0122		Clave: número atómico Símbolo nombre peso atómico convencional peso atómico estándar														5 B boro 10,81 (10,806, 10,821)		6 C carbono 12,01 (12,009, 12,012)		7 N nitrógeno 14,007 (14,006, 14,008)		8 O oxígeno 15,999 (15,999, 16,000)		9 F flúor 18,998		10 Ne neón 20,180																	
11 Na sodio 22,990		12 Mg magnesio 24,305 (24,304, 24,307)		13 Al aluminio 26,982			14 Si silicio 28,085 (28,084, 28,086)			15 P fósforo 30,974			16 S azufre 32,06 (32,059, 32,076)			17 Cl cloro 35,45 (35,446, 35,457)			18 Ar argón 39,948																										
19 K potasio 39,098		20 Ca calcio 40,078(4)		21 Sc escandio 44,956		22 Ti titanio 47,867		23 V vanadio 50,942		24 Cr cromo 51,996		25 Mn manganeso 54,938		26 Fe hierro 55,845(2)		27 Co cobalto 58,933		28 Ni níquel 58,693		29 Cu cobre 63,546(3)		30 Zn zinc 65,38(2)		31 Ga galio 69,723		32 Ge germanio 72,630(8)		33 As arsénico 74,922		34 Se selenio 78,971(8)		35 Br bromo 79,904 (79,901, 79,907)		36 Kr kriptón 83,786(2)											
37 Rb rubidio 85,468		38 Sr estroncio 87,62		39 Y itrio 88,906		40 Zr circonio 91,224(2)		41 Nb niobio 92,906		42 Mo molibdeno 95,95		43 Tc tecnecio 98		44 Ru rutenio 101,07(2)		45 Rh rodio 102,91		46 Pd paladio 106,42		47 Ag plata 107,87		48 Cd cadmio 112,41		49 In indio 114,82		50 Sn estaño 118,71		51 Sb antimonio 121,76		52 Te telurio 127,60(3)		53 I yodo 126,90		54 Xe xenón 131,29											
55 Cs cesio 132,91		56 Ba bario 137,33		57-71 lantanoideos			72 Hf hafnio 178,49(2)		73 Ta tantalio 180,95		74 W wolframio 183,84		75 Re renio 186,21		76 Os osmio 190,23(3)		77 Ir iridio 192,22		78 Pt platino 195,08		79 Au oro 196,97		80 Hg mercurio 200,59		81 Tl talio 204,38 (204,38, 204,39)		82 Pb plomo 207,2		83 Bi bismuto 208,98		84 Po polonio 209		85 At astato 210		86 Rn radón 222										
87 Fr francio		88 Ra radio		89-103 actinoides			104 Rf rutherfordio		105 Db dubnio		106 Sg seaborgio		107 Bh bohrio		108 Hs hasio		109 Mt meitnerio		110 Ds darmstatio		111 Rg roentgenio		112 Cn copernicio		113 Nh nihonio		114 Fl flerovio		115 Mc moscovio		116 Lv livermorio		117 Ts teneso		118 Og oganesón										
57 La lantano 138,91																		58 Ce cerio 140,12		59 Pr praseodimio 140,91		60 Nd neodimio 144,24		61 Pm prometio 145		62 Sm samario 150,36(2)		63 Eu europio 151,96		64 Gd gadolinio 157,25(3)		65 Tb terbio 158,93		66 Dy disprosio 162,50		67 Ho holmio 164,93		68 Er erbio 167,26		69 Tm tulio 168,93		70 Yb iterbio 173,05		71 Lu lutecio 174,97	
89 Ac actinio		90 Th torio 232,04		91 Pa protactinio 231,04		92 U uranio 238,03		93 Np neptunio		94 Pu plutonio		95 Am americio		96 Cm curio		97 Bk berkelio		98 Cf californio		99 Es enslenio		100 Fm fermio		101 Md mendeléevio		102 No nobelio		103 Lr lawrencio																	

Esta tabla periódica es la traducción de la versión realizada por la IUPAC con fecha 28 de noviembre de 2016. Para acceder a información actualizada sobre esta tabla se recomienda consultar www.iupac.org. Derechos reservados ©2016 IUPAC, la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada.

Figura 1. Esta tabla periódica es la traducción de la versión realizada por la IUPAC con fecha 28 de noviembre de 2016. Para acceder a información actualizada sobre esta tabla se recomienda consultar www.iupac.org. Derechos reservados ©2016 IUPAC, la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada

CONCLUSIÓN

El grupo de trabajo sobre terminología química de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) ha resuelto traducir al español los 118 nombres de los elementos químicos de la tabla periódica de los elementos basados en la versión de la IUPAC del 28 de noviembre de 2016, para ello se han mantenido los acuerdos adoptados por la RAC, la RAE, la RSEQ y la Fundéu (Figura 1).

BIBLIOGRAFÍA

- [¹] IUPAC Periodic Table of the Elements, versión fechada el 28 de noviembre de 2016, bit.ly/2bjmHcz, visitada el 08/02/2017.
- [²] a) IUPAC announces the names of the elements 113, 115, 117 and 118, IUPAC recent posts, 30/11/2016; bit.ly/2fPyFQg,

visitada el 08/02/2017. b) IUPAC announces the names of the elements 113, 115, 117 and 118, IUPAC recent posts, 30/11/2016. For Immediate Release 30 November 2016, Formato PDF, bit.ly/2gEUbs5, visitada el 08/02/2017.

- [³] M. A. Ciriano, J. Elguero, J. García-Martínez, P. Goya, P. Román Polo, *An. Quím.* **2016**, *112* (4), 200-204, bit.ly/2jeSVL0, visitada el 08/02/2017.

MIGUEL ÁNGEL CIRIANO
JOSÉ ELGUERO

JAVIER GARCÍA-MARTÍNEZ

PILAR GOYA

PASCUAL ROMÁN POLO

Grupo de trabajo sobre terminología química
de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ)

C-e: pascual.roman@ehu.es

Para obtener una versión imprimible de esta Tabla Periódica pinchar aquí



Para obtener una versión imprimible en tamaño poster-A3 de esta Tabla Periódica pinchar aquí



XXXVI REUNIÓN BIENAL DE LA REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUÍMICA Sitges 25-29 junio 2017

CONFERENCIANTES PLENARIOS

Pedro J. Pérez
Universidad De Huelva-Ciqso, España

Alanna Schepartz
Yale University, Connecticut, USA

George C. Schatz
Northwestern University, Illinois, USA

Daniel G. Nocera
Harvard University, Massachusetts,
USA

José Luis Mascareñas
Universidad de Santiago de Compostela
Ciqs, España

SIMPOSIOS

- S1** GRAFENO Y OTROS MATERIALES 2D
- S2** MATERIALES ORGÁNICOS OPTOELECTRÓNICOS PARA CONVERSIÓN DE ENERGÍA
- S3** MATERIALES PARA LA GENERACIÓN Y ALMACENAJE DE ENERGÍA
- S4** POLÍMEROS PARA UN DESARROLLO SOSTENIBLE
- S5** PRODUCTOS NATURALES, SONDAS MOLECULARES CON ESTRUCTURAS PRIVILEGIADAS
- S6** DETERMINANTES ESTRUCTURALES DE LOS PROCESOS DE RECONOCIMIENTO MOLECULAR EN MOLÉCULAS BIOLÓGICAS
- S7** QUÍMICA EN LA FRONTERA CON LA BIOLOGÍA
- S8** NUEVOS DESARROLLOS TEÓRICOS Y EXPERIMENTALES EN EL ANÁLISIS DE LAS PROPIEDADES TÉRMICAS DE LA MATERIA
- S9** LA REACTIVIDAD QUÍMICA A TRAVÉS DE LA ESTRUCTURA
- S10** ORGANOCATÁLISIS ASIMÉTRICA
- S11** QUÍMICA EN FLUJO CONTÍNUO
- S12** SÍNTESIS ORIENTADA A OBJETIVOS Y NUEVOS MÉTODOS DE SÍNTESIS
- S13** ESPECTROSCOPIA OPERANDO IN SITU: AVANZANDO EN EL ESTUDIO DE MATERIALES FUNCIONALES
- S14** QUÍMICA PREBIÓTICA EN EL ESPACIO Y EN LA TIERRA
- S15** UTILIZACIÓN QUÍMICA SOSTENIBLE DE CO₂: RETOS Y OPORTUNIDADES
- S16** APLICACIONES DE LA ESPECTROSCOPIA RAMAN EN LA QUÍMICA MODERNA
- S17** LA QUÍMICA EN LAS CIENCIAS FORENSES
- S18** BIOSENSADO
- S19** REACCIONES DE FORMACIÓN Y RUPTURA DE ENLACES INDUCIDAS POR METALES. DISEÑO DE LIGANDOS
- S20** AVANCES EN QUÍMICA TEÓRICA: BIOMOLÉCULAS Y MATERIALES
- S21** NANOCATÁLISIS
- S22** ENSEÑANZA, HISTORIA Y DIVULGACIÓN DE LA QUÍMICA
- S23** MUJERES EN QUÍMICA
- S24** REDES METALORGÁNICAS (MOFS) Y ORGÁNICAS

Sigue el congreso en

facebook

Bienal RSEQ 2017

twitter

@BienalRSEQ2017

www.bienal2017.com

ORGANIZADORES:

