

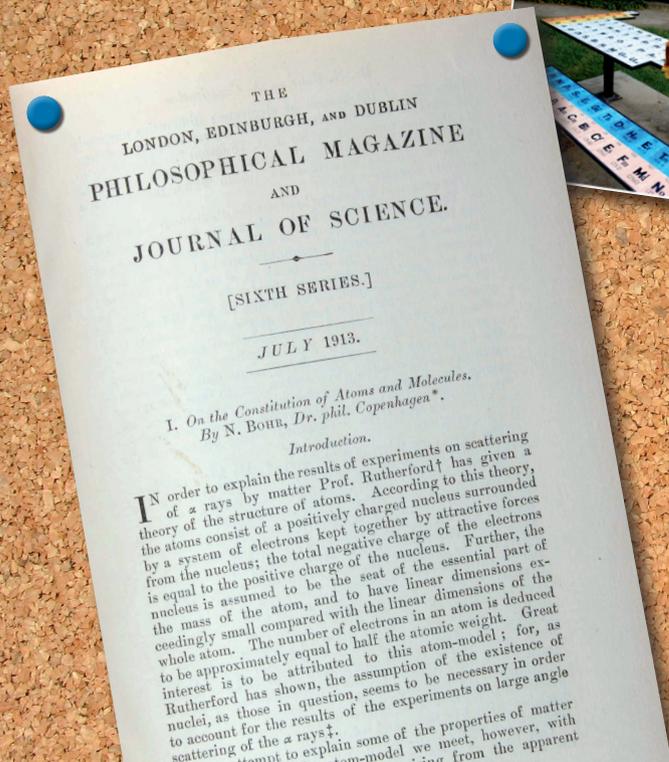
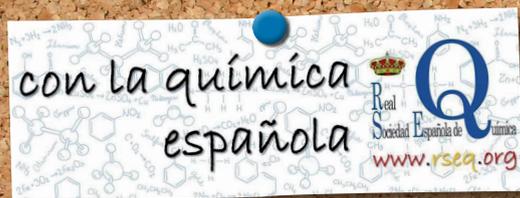
ANALES DE QUÍMICA

Revista de la Real Sociedad Española de Química

Segunda época

www.rseq.org/anales

Volumen 109 | Número 3 | Julio-Octubre 2013 | Páginas 169-252



Síguenos En Facebook Y Twitter

Issn 1575-3417



INVESTIGACIÓN
A. Pascual et al.
Organocatálisis
N. González et al.
Biodegradación de arenas

ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA
LABORATORIO DE QUÍMICA
HISTORIA DE LA QUÍMICA
RECORDANDO A CIENTÍFICOS ESPAÑOLES
BIENAL DE LA RSEQ
AÑO INTERNACIONAL DE LA CRISTALOGRAFÍA



Entidades colaboradoras



Socios Corporativos

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

Real Sociedad Española de Química ♦ Junta de Gobierno

Presidente

Jesús Jiménez Barbero

Vicepresidentes

Agustí Lledós Falcó
José Manuel Pingarrón Carrazón

Secretario General

Pedro J. Pérez Romero

Tesorera

Paloma Yáñez-Sedeño Orive

Editor General

Bernardo Herradón García

Vocales

Valentín García Baonza
Pilar Gómez Sal
Pilar Goya Laza
Emilia Iglesias Martínez
Sonsolés Martín Santamaría
Miguel Ángel Miranda Alonso
M^a Teresa Pineda Rodríguez
Mariona Sodupe i Roure

Ex-Presidente

Nazario Martín León

Presidentes de Secciones Territoriales

Alicante
Miguel Yus Astiz

Aragón
Concepción Gimeno Floría

Asturias
Marta Elena Díaz García

Cataluña
Antonio Echavarren Pablos

Castilla-La Mancha
Julián Rodríguez López

Extremadura
Vacante

Galicia
Carlos Saá Rodríguez

Granada
Juan Manuel Salas Peregrín

Islas Baleares
José Manuel Saá Rodríguez

Islas Canarias
Fernando García Tellado

La Rioja
Pedro J. Campos García

Madrid
Juan José Vaquero López

Málaga
Juan Teodomiro López Navarrete

Murcia
Alberto Requena Rodríguez

Navarra
Vacante

País Vasco
Pascual Román Polo

Salamanca
Miguel Ángel Bañares Muñoz

Sevilla
Rosario Fernández Fernández

Valencia
Gregorio Asensio Aguilar

Valladolid
Juan A. Casares González

Presidentes de Grupos Especializados

Adsorción Jose Rubén García Menéndez

Calorimetría y Análisis Térmico Francisco Fraga López

Coloides e Interfases Jacqueline Forcada García

Cristalografía y Crecimiento Cristalino Fernando J. Lahoz

Didáctica e Historia Manuela Martín Sánchez

Electroquímica Vicente Montiel Leguey

Física Atómica y Molecular Alberto García Vela

Física del Estado Sólido Luis Viña Liste

Fotoquímica José M^a Álvarez Pez

Hidratos de Carbono Francisco Santoyo González

Historia de la Ciencia Pascual Román Polo

Jóvenes Investigadores Químicos Begoña Milián Medina

Nanociencia y Materiales Moleculares Ángela Sastre Santos

Polímeros Julio San Román Del Barrio

Química Agrícola M^a Luisa González San José

Química Biológica José Luis Mascareñas Cid

Química del Estado Sólido Regino Sáez Puche

Química Inorgánica Jaime Casabó Gisbert

Química Orgánica Joan Bosch Cartes

Química Organometálica Pedro J. Pérez Romero

Química Productos Naturales Isidro González Collado

Reología Antonio Santa María Ibarburu

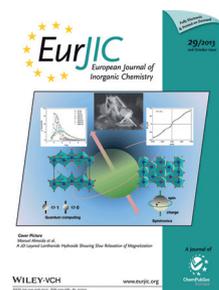
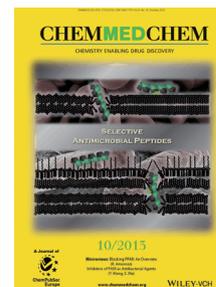
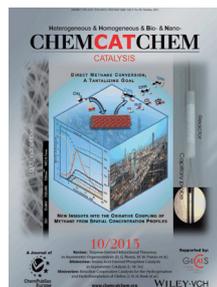
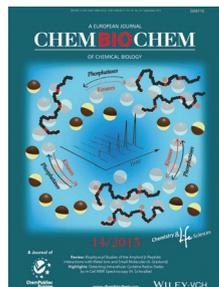
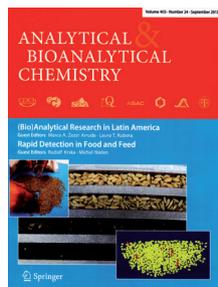
Resonancia Magnética Nuclear Óscar Millet Aguilar-Galindo

Termodinámica Jaime Amorós Arnau

Representantes

ANQUE Ernesto Castañeda Martín
RSEF Bianchi Méndez Martín

Revistas patrocinadas por la Real Sociedad Española de Química





La bienal de la RSEQ, el cartel apoyando a la química española, el icono de los químicos (la tabla periódica) y el artículo histórico de Bohr son aspectos importantes de la química y de la RSEQ; lo que destacamos en esta edición de Anales de Química.

ANALES de la Real Sociedad Española de Química

Editor General

Bernardo Herradón
Instituto de Química Orgánica General

Editora Adjunta

Sonsoles Martín-Santamaría
Universidad CEU San Pablo

Editora Asociada

Yolanda Pérez-Cortés
Universidad Rey Juan Carlos

Comité Editorial

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

Secretaría Administrativa

Patricia Yáñez-Sedeño
Real Sociedad Española de Química

Facultad de Ciencias Químicas Universidad Complutense

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

Diseño, Realización y Publicidad

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

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

Anales de la Real Sociedad de Química

Volumen 109 ♦ Número 3 ♦ Segunda época
Julio-Octubre 2013

Sumario

Editorial 172
Bernardo Herradón

Investigación Química

Organocatálisis: Hacia una nueva generación de catalizadores para la síntesis de polímeros ... 173
Ana Pascual, Haritz Sardon, James L. Hedrick, David Mecerreyes

Efecto de la concentración de surfactante y de la temperatura en la biodegradación 182
de naftaleno, antraceno y fenantreno por *Enterobacter sp.*, *Pseudomonas sp.* y *Stenotrophomonas sp.* aislados de un consorcio degradador de HAP
Natalia González, Luis Fernando Bautista, Carmen Molina, Raquel Simarro, Carolina Vargas, Raquel Flores

Historia de la Química

Bohr: cien años de estados estacionarios. 188
César Tomé-López

Recordando a científicos españoles

La teoría de Ostwald-de Izaguirre sobre adsorción en disolución. 193
Parte 1. Génesis y presentación de la teoría
Juan M. D. Tascón

La teoría de Ostwald-de Izaguirre sobre adsorción en disolución. 201
Parte 2. Impacto y repercusiones
Juan M. D. Tascón

Enseñanza de la Química

A vueltas con el mol: estrategias para explicar e introducir el concepto en secundaria. 209
Luis Ignacio García

Desenmascarando líneas espectrales de átomos hidrogenoides 213
José Zúñiga, Adolfo Bastida, Alberto Requena

Laboratorio de Química

Estrategias didácticas para la promoción de la química 218
en la enseñanza secundaria y bachillerato
Sergio Menargues, Amparo Gómez-Siurana

Noticias de la RSEQ 224

Noticias Científicas Relevantes 246

Editorial

Hace unas semanas se ha celebrado en Santander la XXXIV Reunión Bienal de la RSEQ. El congreso ha sido un éxito, tanto por la cantidad de asistentes (el record de participación) como por la calidad de las investigaciones presentadas. Este congreso marca, en cierto modo, un punto de inflexión en la organización de las bienales de la RSEQ, que se van a estructurar en líneas temáticas, generalmente de carácter multidisciplinar, con eventos satélites sobre aspectos actuales relacionados con la ciencia. Agradezco al profesor Ángel Irabien y a su equipo por el esfuerzo realizado en la exitosa organización del congreso. Tengo que destacar que Ángel ha conseguido reunir un joven equipo de voluntarios que ha facilitado la tarea a los ponentes y asistentes. En esta edición de Anales de Química hemos querido destacar adecuadamente al principal congreso de nuestra sociedad, dándole la cobertura que se merece y publicando las reseñas lo más cercanas posible a la fecha de celebración del congreso; lo que ha retrasado la publicación de esta edición.

En la bienal han participado muchos jóvenes, un hecho muy destacable, que unido a la calidad de la investigación presentada, nos hace ser optimista respecto al futuro de la química española, esperando que se cumpla el lema de la bienal: “*Química para un futuro común*”. Con motivo de la bienal, a través de las redes sociales (el grupo de Facebook de la RSEQ, <http://on.fb.me/1fJwuDP>, y la cuenta de Twitter, @RSEQUIMICA) hemos hecho una “campana” para atraer personas a la química; publicitando adecuadamente las actividades de la RSEQ y los beneficios de la química. En este contexto, tengo que destacar la buena acogida que ha tenido la iniciativa de solicitar tablas periódicas a través de las redes sociales. Hemos encontrado una respuesta masiva y nos han enviado muchas tablas periódicas; algunas tan atractivas como las que se recogen en la portada de esta revista. En la sección *Noticias de la RSEQ* se publica una breve reseña de esta iniciativa y un artículo completo se publicará en la web, en el blog <http://elcuadernodecalpurniatate.com/>. Tengo que dar las gracias al profesor Javier García-Martínez (Universidad de Alicante), siempre un estímulo en este tipo de actividades, que ha diseñado el atractivo cartel “*Con la química española*” que se muestra en la portada de la revista. También tengo que agradecer a Fernando Gomollón-Bel (ISQCH-CSIC-UZ), estudiante de doctorado, por su implicación en apoyo de la química y su colaboración en la edición de este número de Anales de Química. Quiero agradecer muy especialmente a Luis Moreno-Martínez, joven licenciado en Química por la UCM y profesor de Física y Química, por su contagioso entusiasmo en las tareas de divulgación de la ciencia, en general, y la química en particular. Luis ha sido el principal “responsable” de que las redes sociales de la RSEQ hayan aumentado espectacularmente el número de sus seguidores (especialmente en Twitter), así como su trabajo elaborando una imagen más atractiva de las redes sociales de la RSEQ.

Estos jóvenes químicos, así como los voluntarios y los asistentes a la bienal, son una muestra de que la química interesa a los jóvenes. Esto también se ha demostrado a través de diversas iniciativas que se describen en la sección *Noticias de la RSEQ*: la *Olimpiada*

Internacional de Química y concursos para jóvenes científicos, entre los que hay que destacar *Ciencia en Acción*, al que pude asistir como jurado de diversas modalidades científicas. Tengo que destacar la presencia de muchos niños (algunos tan jóvenes como 7 años), que demostraron un gran interés y talento por la ciencia. Si cuidamos esta cantera (especialmente por las autoridades políticas, científicas y educativas) la ciencia española no estará en peligro.

En 2014, toda la comunidad científica se debe sentir implicada en un proyecto supranacional: el *Año Internacional de la Cristalografía* (IYCr, por sus siglas en inglés). La cristalografía es un área científica multidisciplinar, con la que prácticamente todas las ciencias se relaciona. No hace falta recordar las grandes aportaciones mutuas entre la química y la cristalografía, que ha permitido que ambas ciencias progresen, desde la época de von Laue y los Bragg (se recomienda leer el artículo publicado en *Anales Quim.* **2012**, *108*, 225). En la sección *Noticias de la RSEQ* nos hacemos eco de diversas actividades relacionadas con el IYCr.

Como el lector apreciará, debido a todas estas actividades recientes, la sección *Noticias de la RSEQ* es bastante amplia. Agradezco a Yolanda Pérez (Universidad Rey Juan Carlos) y a Enrique Mann (IQOG-CSIC) su ayuda al elaborar esta sección. Debido a esta extensión, la sección *La química en la web* no se ha podido publicar en esta edición. Se retomará en el próximo número.

No hay que olvidar que el pasado mes de julio se conmemoró el centenario de la publicación del artículo de Niels Bohr en el que presentaba su modelo del átomo de hidrógeno. Este hecho fue un punto culminante en la física atómica con implicaciones químicas, del que nos hacemos eco en esta edición (destacado en portada) con un magnífico artículo de investigación histórica escrito por César Tomé-López.

Finalmente, el resto de artículos de este número es un muestreo de temas de diversa índole: investigación destacada realizada en España (en áreas tan diversas como la organocatálisis y aspectos medioambientales), enseñanza de la química e historia de la química.

Espero que disfrutes de la lectura de la revista.

Bernardo Herradón García
Editor General



Organocatálisis: hacia una nueva generación de catalizadores para la síntesis de polímeros

Ana Pascual, Haritz Sardon, James L. Hedrick, David Mecerreyes

Resumen: La exigente demanda de nuevos materiales en nuestra sociedad y la preocupación por una química más verde, ha supuesto la revelación de una nueva generación de catalizadores altamente selectivos y sostenibles (catalizadores orgánicos) como herramienta útil para la síntesis de polímeros. Las ventajas que poseen estos catalizadores frente a los catalizadores organometálicos tradicionales en cuanto a toxicidad y versatilidad hacen de la organocatálisis y su aplicación en reacciones de polimerización un campo en continua expansión. Este trabajo aporta una visión actual de las posibilidades de la organocatálisis en los procesos de polimerización y nuestra opinión sobre los futuros retos de la organocatálisis en el siglo XXI.

Palabras clave: Organocatálisis, polímeros, química sostenible, ingeniería macromolecular.

Abstract: The demanding requirements of new materials in our society and concern for greener chemistry, has led to the revelation of a new generation of highly selective and sustainable catalysts (organic catalysts) as a useful tool for the synthesis of polymers. The advantages that these catalysts offer versus traditional organometallic catalysts in terms of toxicity and versatility makes the organocatalysis and their application in polymerization reactions a continuously expanding field. This work provides a current view of the possibilities of organocatalysis in polymerization processes and our opinion on the future challenges in the XXI century.

Keywords: Organocatalysis, polymers, sustainable chemistry, macromolecular engineering.

Introducción

Durante años los polímeros o macromoléculas vienen cobrando cada vez mayor importancia en nuestra sociedad hasta un punto en el cual es difícil imaginar situaciones en nuestra vida diaria donde los polímeros no estén presentes. Materiales compuestos por polímeros que hoy en día son cotidianos tales como las ventanas aislantes, las sartenes antiadherentes, los parachoques de los coches, las lentes de contacto o los pañales de los niños eran inexistente hace apenas unos años.

Los materiales poliméricos se pueden clasificar en dos grupos; los polímeros de origen natural y los polímeros sintéticos o los que se obtienen industrialmente mediante reacciones químicas. En la mayoría de estas reacciones químicas es necesaria la utilización de catalizadores. Tradicionalmente los catalizadores que intervienen en procesos de polimerización industrial son

catalizadores organometálicos. Estos compuestos que contienen rodio, rutenio, estaño, níquel, cromo, cobre, lantánidos, titanio, aluminio, zinc o platino en su estructura han sido los más empleados debido a su alta eficacia como catalizadores a pesar de ser tóxicos y difíciles de eliminar del polímero final.¹ El uso de otros catalizadores como las enzimas en reacciones de polimerización, se limita básicamente a la hidrólisis de ácidos grasos o a la síntesis de polímeros a escala de laboratorio debido a su alto coste y su extremada selectividad.²

La necesidad de una transición hacia una química más sostenible ha hecho que los investigadores no hayan cesado en el intento de obtener catalizadores reutilizables más baratos y eficaces, y menos tóxicos.

En el año 2001, una nueva generación de catalizadores emergió cuando el grupo de Hedrick (IBM Almaden Research Center in California, USA) junto con el grupo de Waymouth (Universidad de Stanford, California, USA) introdujeron el concepto de organocatálisis en reacciones de polimerización. El concepto de organocatálisis que ya era utilizado en diversas reacciones en química orgánica demostró ser útil para algunas reacciones de polimerización, por ejemplo la síntesis de ácido poliláctico (PLA) por polimerización por apertura de anillo de la L-Lactida, utilizando 4-dimetilaminopiridina (DMAP) como catalizador.³ De este modo se sintetizó PLA de una manera controlada sin tener que recurrir a la catálisis organometálica convencional. Comenzaba la era de la organocatálisis en reacciones de síntesis de polímeros. Un catalizador orgánico puede definirse como un compuesto orgánico con actividad catalítica formado por elementos no metálicos como carbono, hidrógeno, nitrógeno, fósforo o azufre. Las mayores ventajas de estos catalizadores respecto a los organometálicos son principalmente:

- La gran variedad de catalizadores disponibles y sintetizables debido a la versatilidad que nos ofrece la química orgánica a la hora de diseñar catalizadores a la carta.



A. Pascual¹

H. Sardon^{1,2}

J.L. Hedrick²

D. Mecerreyes^{1,3}

¹ POLYMAT, Universidad del País Vasco-UPV/EHU, Joxe Mari Korta Center, Avda. Tolosa 72, 20018 Donostia-San Sebastián.

² IBM Almaden Research Center, 650 Harry Road, San Jose, CA 95120, USA.

³ Ikerbasque, Basque Foundation for Science, E-48011 Bilbao, España. C-e: ana.pascualg@ehu.es

Recibido: 24/06/2013. Aceptado: 31/07/2013.

- Son fáciles de purificar y pueden ser diseñados inertes al agua y al aire lo que facilita su manejo y almacenamiento.
- Son generalmente menos tóxicos y se pueden eliminar con relativa facilidad del polímero.

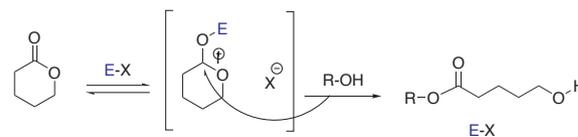
El objetivo de este artículo es mostrar las posibilidades de la organocatálisis en la síntesis de polímeros. Citaremos los catalizadores más empleados en los diferentes procesos de polimerización así como la utilidad de la catálisis orgánica para obtener diferentes familias de polímeros. En primer lugar realizaremos una breve introducción a los organocatalizadores clasificándolos en función de su mecanismo de activación. Posteriormente nos centraremos en las diferentes reacciones de polimerización. Concluiremos explicando los futuros retos de la organocatálisis en el siglo XXI.

Catalizadores orgánicos. Mecanismos de activación

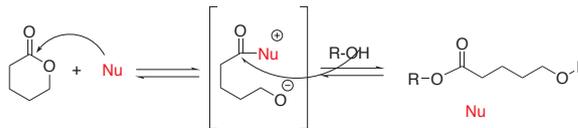
Los grandes avances en la química de polímeros del siglo XX se debieron mayoritariamente a la utilización de catalizadores organometálicos. Para poder sustituir los catalizadores organometálicos por catalizadores orgánicos en reacciones de polimerización debemos demostrar que las propiedades catalíticas de los compuestos orgánicos son al menos equiparables a las de los catalizadores organometálicos. Junto con la velocidad de polimerización, el control de la polimerización es vital para obtener el tipo o estructura de polímero deseada –desde polímeros lineales hasta hidrogeles– dependiendo de la aplicación. Podemos decir que un catalizador orgánico es competente cuando además de aumentar la velocidad de la reacción de polimerización es capaz de aumentar la selectividad entre reacciones y por tanto el control de la polimerización. El catalizador aumenta la velocidad y la selectividad de la reacción mediante diferentes mecanismos de activación.⁴ En este caso, clasificaremos los catalizadores orgánicos dependiendo de su mecanismo de activación (Figura 1). Tomando como ejemplo la polimerización por apertura de anillo de una lactona, esta activación puede ser mediante activación electrófila (Figura 1a), nucleófila (Figura 1b), activación mediante una base (Figura 1c) o mediante una doble activación (Figura 1d).

- Los **catalizadores electrófilos** se rigen principalmente por un mecanismo de activación electrófila activando un centro electronegativo de una especie (principalmente el oxígeno de un carbonilo) convirtiéndolo en un centro más activo facilitando el posterior ataque de una especie nucleófila. En la Figura 1a se muestra la activación electrófila del oxígeno de un grupo carbonilo y la posterior reacción del alcohol con el centro activado. Los ácidos orgánicos como el ácido trifluorometanosulfónico o ácido trifílico (TfOH), difenilfosfato (DPP) y el ácido dodecibenceno sulfónico (DBSA) son algunos ejemplos de catalizadores electrófilos (Figura 2).
- Los **catalizadores nucleófilos** se rigen por un mecanismo en el que el catalizador ataca directamente a un centro electrófilo, normalmente un carbonilo, generando compuestos de reacción intermedios más reactivos que el monómero inicial. Estos compuestos reactivos suelen poseer cargas positivas y negativas en su estructura como

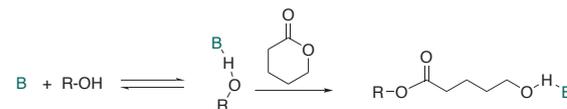
a) Activación electrófila



b) Activación nucleófila



c) Activación mediante una base



d) Activación bifuncional

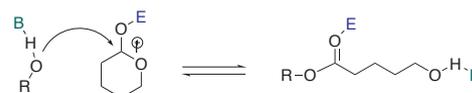


Figura 1. Mecanismos de activación de los catalizadores orgánicos en el caso de la apertura de anillo de una δ -valerolactona.

se muestra en la Figura 1b. En este caso el catalizador reacciona con el grupo carbonilo de la lactona cíclica creando un compuesto intermedio el cual fácilmente puede reaccionar con otro monómero presente en el medio de reacción promoviendo la polimerización. Los carbenos heterocíclicos, fosfinas y las piridinas como la DMAP son los ejemplos más representativos de este tipo de mecanismo (Figura 2).

- Las “**súper bases**” actúan de forma diferente a los sistemas previamente descritos. Estos compuestos extremadamente básicos son capaces de desprotonar la especie nucleófila generando un compuesto mucho más reactivo que el monómero inicial favoreciendo la reacción con el centro electrófilo. Como se muestra en la Figura 1c la súper base desprotona el alcohol haciendo posible el ataque del alcóxido formado al grupo carbonilo permitiendo la polimerización. Las bases más utilizadas son las guanidinas cíclicas tales como diazabicycloundeceno (DBU) o triazabicyclodeceno (TBD) y algunos fosfazenos (Figura 2).
- En el último grupo están los **catalizadores bifuncionales**. La activación simultánea tanto del centro electrófilo como del centro nucleófilo que participan en la reacción de polimerización, es una manera muy efectiva de aumentar la velocidad de polimerización. En el ejemplo de la Figura 1d se observa como en este caso el catalizador es capaz de activar el carbonilo y a su vez activar el alcohol extrayendo su protón y haciéndolo más nucleófilo. Los sistemas más utilizados actualmente están constituidos por dos catalizadores; generalmente una tiourea y una base, como por ejemplo la

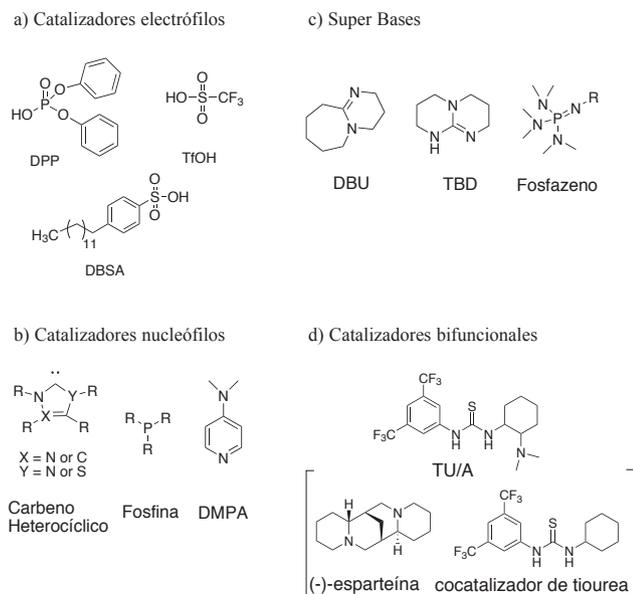


Figura 2. Catalizadores orgánicos clasificados según su mecanismo de activación.

(-)-esparteína o DBU, aunque también se ha utilizado como catalizador bifuncional una única molécula que contiene tanto carácter de tiourea como de amina como se muestra en la Figura 2 el compuesto Tiourea/Amina (TU/A).

Reacciones de polimerización

Probablemente la reacción de polimerización más estudiada a día de hoy mediante catálisis orgánica es la polimerización por apertura de anillo de lactonas, lactidas, carbonatos y siliconas

en la cual el control de la polimerización es fundamental para poder obtener polímeros bien definidos.⁴ Pero la organocatálisis se ha extendido a otro tipo de polimerizaciones como son las polimerizaciones por transferencia de grupo de acrilatos y metacrilatos⁵ o polimerización por etapas de poliuretanos⁵, polibenzoinas,⁶ poliésteres⁷ o policarbonatos.⁸ Además, y de manera muy interesante, estos catalizadores orgánicos han sido utilizados satisfactoriamente en reacciones de despolimerización de poliésteres comerciales y de elevado consumo como el polietilentereftalato o PET obteniendo los monómeros de partida y abriendo así una nueva posibilidad en cuanto a su reciclado.⁹ La Figura 3 muestra algunas de las reacciones de polimerización llevadas a cabo mediante catalizadores orgánicos.

A continuación detallaremos la eficacia de los catalizadores orgánicos en diferentes reacciones, comenzando por ejemplos de polimerizaciones en cadena y posteriormente polimerizaciones en etapas.

1. Polimerizaciones en cadena

En la polimerización por crecimiento en cadena, un iniciador (I) reacciona con el monómero generando una especie activa (iniciación) a la que se le va uniendo el monómero de uno en uno dando lugar al crecimiento de la cadena polimérica (propagación).

Las mayores ventajas de la polimerización en cadena respecto a la polimerización por etapas son que no se requieren estrictas condiciones de estequiometría ni condiciones drásticas de presión y temperatura para obtener polímeros de alto peso molecular.

1.a) Polimerización por apertura de anillo o ROP (“Ring opening polymerization”)

La polimerización por apertura de anillo es sin lugar a dudas el proceso de polimerización en el que el uso de la organocatálisis ha sido más popular en concreto en la obtención de

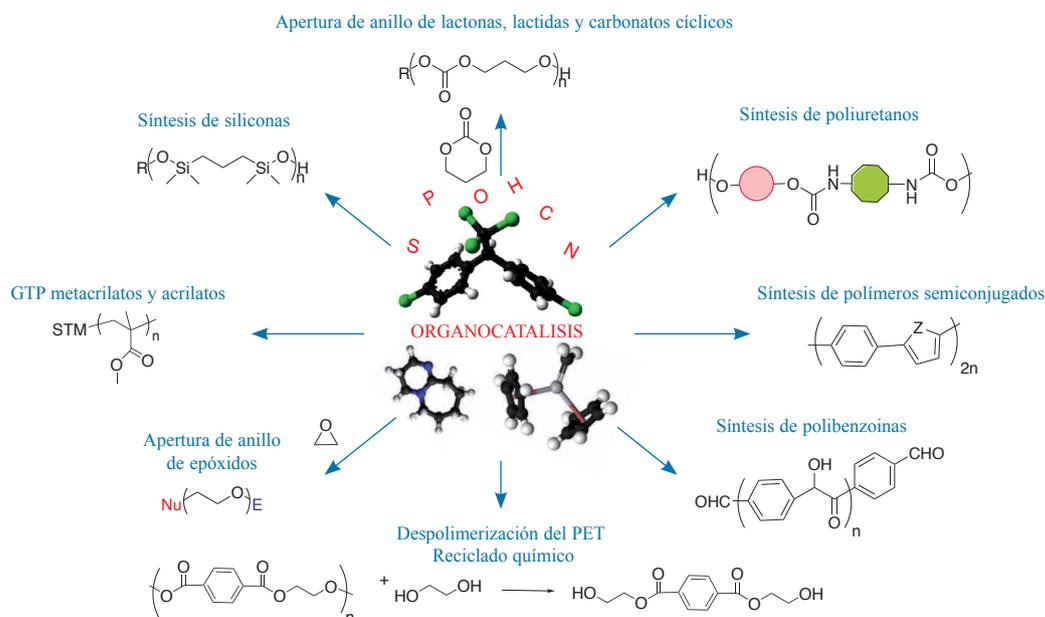


Figura 3. Esquema ilustrativo de la utilización de la organocatálisis en reacciones de polimerización.

poliésteres alifáticos o polilactidas.^{4,10} Además se han utilizado todos los tipos de catalizadores con mayor o menor éxito.

Catalizadores electrófilos: ácidos orgánicos

El método más simple para llevar a cabo polimerizaciones por apertura de anillo de lactonas o carbonatos cíclicos es el uso de ácidos orgánicos fuertes ya que su mecanismo de activación es el más sencillo. Se ha demostrado que, especialmente, el TfOH es altamente eficaz para la polimerización controlada de lactonas como ϵ -caprolactona¹¹ y lactida.¹² El DPP a pesar de ser un ácido más débil también ha sido capaz de polimerizar lactonas¹³ y carbonatos cíclicos¹⁴ con elevados niveles de control. Los catalizadores electrófilos son los únicos que actúan de una manera distinta a los catalizadores nucleófilos, bases y bifuncionales los cuales utilizan su carácter básico o nucleófilo como método de activación. Estos métodos de activación imposibilitan la polimerización de monómeros ácidos ya que desactivan el catalizador (de carácter básico) y por tanto, monómeros que contienen grupos ácidos, amidas u otras funcionalidades ácidas se quedan fuera de las posibilidades de la organocatálisis básica. El mayor problema de éstos catalizadores es su alta tendencia a interaccionar con el agua lo cual reduce considerablemente su eficacia junto con la dificultad de controlar la polimerización. Recientemente, el grupo de Hedrick ha demostrado que los catalizadores ácidos son la única alternativa para polimerizar monómeros con grupos amidas en su estructura manteniendo el control de la polimerización.¹⁵ En este trabajo demostraron que los ácidos débiles pueden tener un efecto nucleófilo en la polimerización activando de una manera dual la polimerización. En otro artículo publicado por el mismo grupo se ha demostrado que el TfOH es el único capaz de promover la polimerización en presencia de ésteres activados. Estos ésteres activados son altamente reactivos en presencia de ambientes básicos pero no son reactivos en ambientes ácidos por lo que no se ven afectados durante la polimerización.¹⁶ Una vez finalizada la polimerización, la incorporación de grupos funcionales es relativamente sencilla debido a su alta reactividad. Por otro lado, el grupo de Mecerreyes publicó la polimerización de macrolactonas (lactonas con más de 12 átomos en su estructura) utilizando catalizadores ácidos en tiempos relativamente cortos y la posibilidad de llevar a cabo la reacción en agua, lo cual era un reto hasta la fecha (Figura 4).¹⁷

Catalizadores nucleófilos

A partir del descubrimiento de la DMAP en 2001 como catalizador para la obtención de poliésteres alifáticos a partir de ésteres cíclicos,³ se empezaron a investigar otras bases nucleófilas entre las que destacan los carbenos N-heterocíclicos (NHC).¹⁸ Tras el primer artículo publicado en 2002 demostrando la habilidad de los NHC para catalizar la apertura de anillo de l-lactida, ϵ -caprolactona y β -butirolactona,¹⁹ estos catalizadores se han empleado en numerosas polimerizaciones por apertura de anillo. Los NHC han demostrado una alta actividad sobre todo en la polimerización de ácido láctico obteniendo polímeros de alto peso molecular en cuestión de segundos.²⁰ Además, el grupo de Hedrick demostró la eficacia de estos catalizadores a la hora de polimerizar siloxanos cíclicos observándose una mayor velocidad de reacción a medida que se aumentaba la cantidad de NHC²¹ y el grupo de Taton en la polimerización de epóxidos dando lugar a poli(óxido de etileno) y poli(óxido de propileno).²²

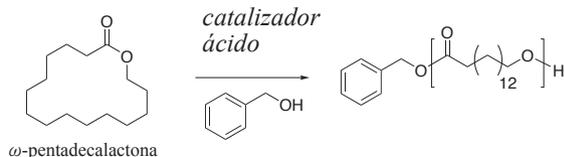


Figura 4. ROP de ω -pentadecalactona utilizando ácidos orgánicos.¹⁷

Sin embargo, una de las limitaciones de los NHC es su elevada reactividad con el agua y por lo tanto su escasa estabilidad en condiciones atmosféricas. Por ello, estos catalizadores se suelen sintetizar en condiciones de atmósfera de nitrógeno y justo antes de su utilización mediante la desprotonación de cationes tipo imidazolio con bases fuertes.¹⁸ Recientemente el grupo de Taton ha sido capaz de solventar estos problemas mediante la síntesis de carbenos N-heterocíclicos protegidos con carboxilatos (NHC-CO₂) (Figura 5).²³ Estos compuestos mucho más estables y manejables son capaces de generar el carbeno *in situ* y polimerizar ésteres cíclicos en tiempos de polimerización razonables. Además, recientemente se han conseguido polimerizaciones controladas en ausencia de disolvente utilizando NHC,²⁴ un logro muy importante en el campo de la organocatálisis ya que el control de la polimerización no suele ir unido a la polimerización en ausencia de disolvente o en masa.

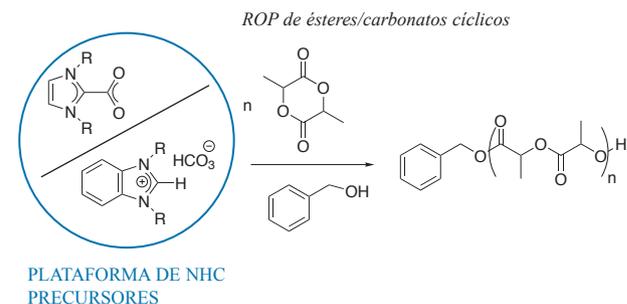


Figura 5. ROP de lactida a través de carbenos N-heterocíclicos carboxilatos.¹⁷

Súper bases

El uso de aminas en procesos por apertura de anillo es un concepto antiguo. Sin embargo, la aparición de “súper bases” como pueden ser las guanidinas cíclicas tipo TBD o DBU han dado un nuevo impulso a la catálisis básica en polimerizaciones por apertura de anillo.⁴ Los altos valores de pKa (>25) hacen que estos sistemas extraigan fácilmente el protón de la especie propagante haciéndolo extremadamente reactivo y permitiendo que la reacción de polimerización se pueda llevar a cabo en tiempos relativamente cortos con un buen control. Por citar unos ejemplos, el grupo de Dubois ha sido capaz de polimerizar lactonas utilizando DBU²⁶ obteniendo polímeros peine mientras que el grupo de Song ha sido capaz de polimerizar carbonatos cíclicos con grupos azida capaces de reaccionar fácilmente mediante “click-chemistry” permitiendo la post-modificación de los carbonatos.²⁷ En la Figura 6 se muestra el carbonato polimerizado por el grupo de Song con grupos azida colgantes.

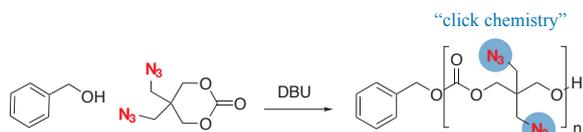


Figura 6. Preparación de policarbonatos funcionalizados mediante DBU.²⁷

catalizador	[M]/[I]	tiempo	conversión (%)	Mn (PDI)	catalizadores
MTBD	100	48 h	0		
TBD	10	0.5 h	93		
	50	3 h	94	7300 (1.04)	
	100	6 h	87	13100 (1.04)	
	200	18 h	82	18300 (1.03)	
	400	26 h	76	23400 (1.05)	
1	100	0.5 h	80	12800 (1.14)	
2	100	1 min	99	10200 (1.19)	

Figura 7. Polimerización de siloxanos con cabenos y súper bases.²¹

El mayor problema de estas bases es que, aparte de promover la polimerización, pueden dar lugar a reacciones secundarias tales como transesterificaciones dificultando el control de la polimerización. En el caso del DBU estas reacciones pueden evitarse añadiendo un ácido débil que inactive el catalizador al terminar la reacción.²⁵ En el caso de catalizadores básicos extremadamente fuertes como el TDB, el control de la polimerización disminuye siendo un reto difícil de conseguir. Sin embargo, en los casos en los que los monómeros poseen menor tensión de anillo es decir son menos reactivos como son la lactida funcionalizada con norborneno,²⁸⁻²⁹ los fosfoésteres cíclicos,³⁰⁻³¹ ω -pentadecalactona³² y δ -lactonas impedidas³³⁻³⁴ el TBD es una opción muy válida. Además, es importante destacar que con la TBD se han conseguido obtener polisiloxanos (siliconas) de alto peso molecular con un buen control de la polimerización (Figura 7).²¹

Catalizadores bifuncionales

La utilización de bases débiles como las aminas terciarias en la síntesis por apertura de anillo no había sido muy exitosa hasta que en el año 2005 el grupo de Hedrick descubrió que combinando las bases con un ácido débil como la tiourea se conseguía un catalizador bifuncional capaz de activar tanto el centro electrófilo (el monómero) como del centro nucleófilo (el iniciador).

De esta manera se generó un catalizador muy eficaz para la polimerización de la lactida lo cual marcó un paradigma en este campo.³⁵ Desde este estudio se han investigado diferentes bases débiles siendo quizá la (-)-esparteína la que crea un balance ideal entre selectividad y reactividad.³⁶ Teniendo en cuenta que la base por sí sola no da lugar a la polimerización y que el aceptor de enlaces de hidrógeno activa selectivamente, las reacciones secundarias no deseadas como transesterificaciones o ramificaciones se hacen despreciables en este tipo de sistemas. Esto hace que monómeros con grupos susceptibles a dar lugar a reacciones secundarias, como son ésteres cíclicos derivados del ácido málico o ácido glutámico o fosfatos cíclicos entre otros, sean capaces de polimerizar de una manera controlada utilizando dicha activación bifuncional. Gracias al control y selectividad que aportan estos sistemas, los catalizadores bifuncionales están siendo muy utilizados tanto para construir estructuras poliméricas complejas desde micelas a hidrogeles como para introducir grupos funcionales en ellas. Estas ventajas junto con la fácil eliminación del catalizador del polímero final, ha potenciado la síntesis de sistemas poliméricos biodegradables para aplicaciones biomédicas utilizando la organocatálisis. Por citar unos ejemplos, el grupo de Dove sintetizó hidrogeles de policarbonato biodegradables con grupos morfolina en su estructura utilizando DBU/tiourea. Estos hidrogeles se hinchan en el agua atrapando metales pesados tipo plomo o mercurio que se puedan encontrar en el medio ambiente.³⁷ Igualmente, utilizando DBU/tiourea, el grupo de Hedrick es pionero en la síntesis de policarbonatos biodegradables cuaternizados con carácter antimicrobiano. Estos sistemas con carácter anfílico, forman micelas en agua y debido a la cuaternización de la amina, son capaces de eliminar un amplio rango de bacterias (Figura 8).³⁸ Este

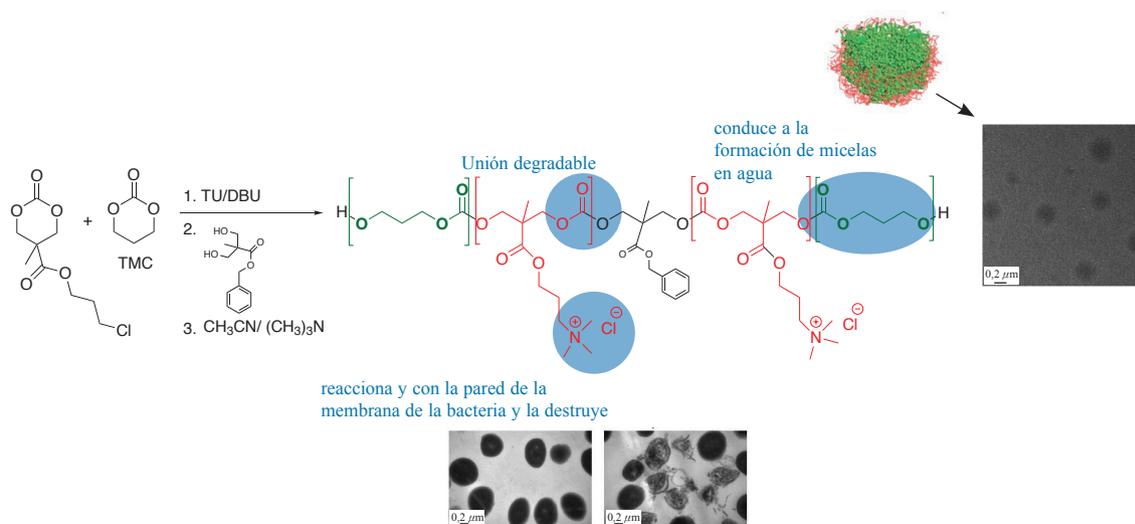


Figura 8. Síntesis y formación de micelas de policarbonatos catiónicos anfílicos con propiedades antimicrobianas.³⁸

descubrimiento puede minimizar el problema que existe con las bacterias resistentes a antibióticos ya que estos materiales destruyen la bacteria desde la raíz sin permitir que evolucione y pueda ser inmune a futuros tratamientos.

También dentro del campo de la biomedicina es importante destacar el trabajo del grupo de Hedrick en la liberación controlada de fármacos. Uno de los problemas de los fármacos para tratar el cáncer es su toxicidad para las células sanas. El ser capaz de generar un sistema que libere estos fármacos de una manera controlada en el cuerpo es todavía un reto. El grupo de Hedrick ha demostrado que los grupos urea adecuadamente distribuidos en un policarbonato biodegradable, permiten la secuestro de fármacos como la doxorubicina liberándolos de una manera eficaz en células cancerígenas.³⁹

1.b) Polimerización por transferencia de grupo o GTP (“Group transfer polymerization”)

La polimerización por transferencia de grupo o GTP es un método de polimerización pseudo-aniónica viva o controlada para la obtención de acrilatos y metacrilatos. Aunque su descubrimiento data de 1983, su renacimiento se produjo cuando los grupos de Hedrick y de Gnanou demostraron que algunos catalizadores orgánicos eran capaces de llevar a cabo este tipo de polimerización⁴⁰⁻⁴¹ y que eran además capaces de superar las limitaciones de la GTP convencional en cuanto al control de la polimerización y la imposibilidad de polimerizar una amplia gama de monómeros. Esto hace que hoy en día el uso de catalizadores orgánicos en reacciones de GTP pueda competir con métodos más conocidos como pueden ser la ATRP (“*atom transfer polymerization*”) o la RAFT (“*reversible addition-fragmentation polymerization*”). Aunque los resultados obtenidos son prometedores, los estudios en los que la organocatálisis se utiliza para la polimerización de transferencia de grupo no abundan. Durante estos años se han conseguido ampliar los monómeros polimerizables mediante GTP utilizando todas las familias de catalizadores.⁴² El grupo de Zhang consiguió copolimerizar ϵ -caprolactona y metacrilato de metilo combinando la polimerización por apertura de anillo y polimerización por transferencia de grupo utilizando bases de tipo fosfazeno para la síntesis de polímeros funcionales degradables.⁴³ El grupo de Chen demostró que también utilizando fosfazenos se pueden obtener polímeros tipo estrella mediante GTP ya que en este tipo de polimerización en cadena, la especie propagante es neutra lo que hace que no se den terminaciones intramoleculares como puede ocurrir en las polimerizaciones tipo ATRP o

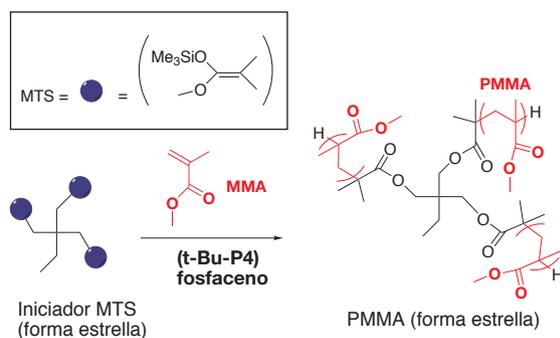


Figura 9. Síntesis de estrellas de 3 brazos de poli metacrilato de metilo (PMMA) mediante GTP.⁴⁴

RAFT.⁴⁴⁻⁴⁵ La Figura 9 muestra cómo se pueden generar poli metacrilato de metilo (PMMA) con estructura de estrella utilizando este tipo de polimerización.

2. Polimerización por etapas (“Step-grow polymerization”)

La organocatálisis está teniendo un gran impacto en procesos de polimerización en etapas como la síntesis de poliuretanos, procesos de polimerización y despolimerización de poliésteres o en la síntesis de nuevos polímeros como las polibenzoinas. Probablemente este tipo de polimerizaciones es el actual foco de interés de la organocatálisis en cuanto a desarrollo industrial.

En la polimerización por etapas, cadenas de diferentes tamaños reaccionan generalmente por condensación entre sí para formar en cada reacción moléculas de mayor peso molecular. En este caso solo se alcanzan pesos moleculares elevados a altas conversiones y en estrictas condiciones de estequiometría. Hay un gran número de polímeros que se sintetizan y producen industrialmente mediante este tipo de polimerización de los que cabe destacar los poliuretanos, poliésteres como el PET, policarbonatos o poliureas. En este apartado hablaremos principalmente de la despolimerización del PET, que es quizá el ejemplo de aplicación más significativo de la organocatálisis.

2.a) Despolimerización y reciclado químico del PET

El reciclado de materiales plásticos tiene un papel importante en la reducción de la contaminación y el ahorro de los recursos provenientes del petróleo. El PET es el poliéster más utilizados en aplicaciones como fibras de ropa, tejidos, películas de embalaje, contenedores de alimentos, y botellas de bebidas. Tradicionalmente el PET se sintetiza utilizando catalizadores organometálicos (Sn, Ti) y se recicla mediante un proceso mecánico.⁴⁶⁻⁴⁷ Los residuos metálicos procedentes del catalizador permanecen activos en el polímero durante el reciclado mecánico y hacen que propiedades físicas como la transparencia o la viscosidad intrínseca se vean drásticamente afectadas. Es por esto que el PET reciclado o de segunda generación, no posee las mismas propiedades que el de partida y no se puede reutilizar para la fabricación de botellas nuevas.⁴⁶ Generalmente este PET de segunda generación se utiliza para fabricar productos como fibras de alfombra o se convierte en un material inservible y termina en el vertedero.

El grupo de Hedrick ya había publicado en 2002 el uso de carbenos en reacciones de transesterificación y por lo tanto la posibilidad de obtener PET libre de metales. En 2010, es cuando demostraron el uso de carbenos heterocíclicos en la despolimerización de éste PET y empezaron a pensar en una nueva idea para su reciclado.⁹ Siguiendo este camino recientemente han investigado la capacidad de una base fuerte como la TBD de despolimerizar el PET convirtiéndolo en su monómero de partida demostrando que pueden recuperar hasta un 90 % de tereftalato de bis-hidroxietilo (BHET).⁴⁸ Esto permite que se pueda generar materiales con idénticas propiedades ya que estos materiales están exentos de catalizadores metálicos lo que supone un nuevo avance en el reciclado químico de materiales plásticos.

Ampliando las posibilidades de esta reacción utilizado diaminas en vez de dioles en la despolimerización del PET, se han obtenido compuestos cristalinos de tereftalamidas⁴⁹ con propiedades térmicas y mecánicas óptimas para aplicaciones de alta ingeniería.

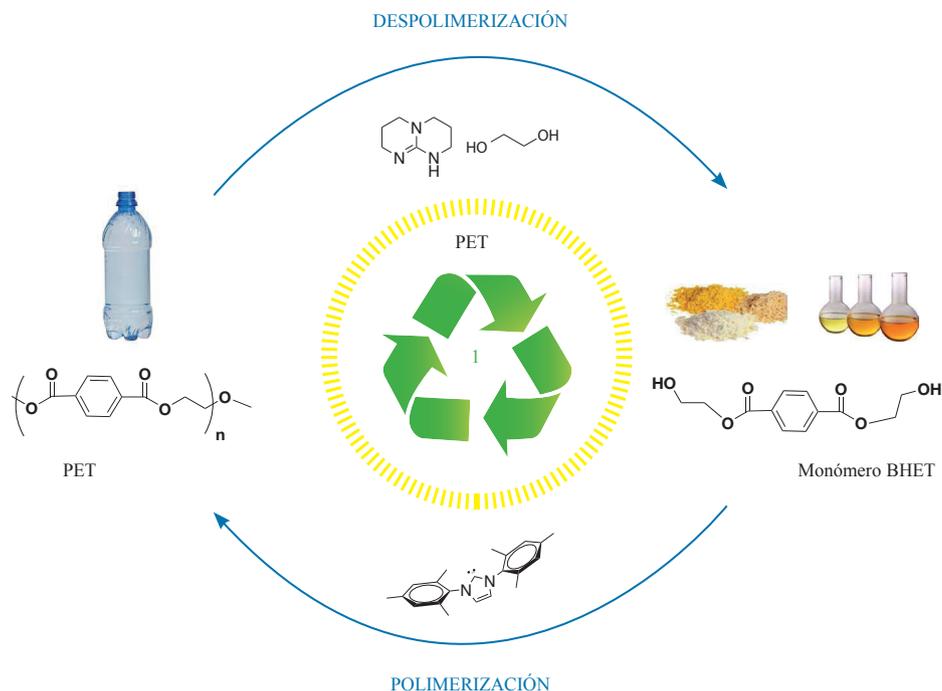


Figura 10. Reciclado químico del PET mediante catalizadores orgánicos.

2.b) Síntesis de poliuretanos

Los poliuretanos constituyen el 5% de la producción mundial de polímeros ya que debido a su versatilidad son utilizados en numerosas aplicaciones como espumas, adhesivos, recubrimientos, fibras, etc.

Los poliuretanos se preparan generalmente a partir de la adición de polioles y poliisocianatos en presencia de un catalizador utilizando casi en su totalidad catalizadores de estaño.⁵⁰

Un estudio realizado por el grupo de Taton reveló que los carbenos heterocíclicos pueden catalizar la reacción pero con limitaciones en el peso molecular del poliuretano final.⁵¹ Sin embargo, el grupo de Cramail ha conseguido recientemente obtener poliuretanos a través del uso de diferentes guanidinas cíclicas⁵ obteniendo elevados pesos moleculares en tiempos de reacción competitivos con el tradicional catalizador de estaño comercial (Figura 11).

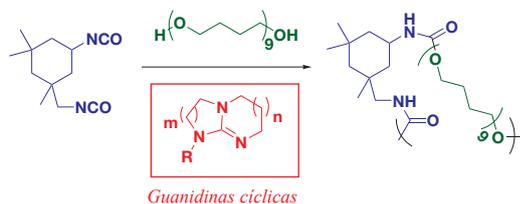


Figura 11. Síntesis de poliuretanos utilizando guanidinas cíclicas como catalizadores.⁵

2.c) Policondensación de benzoínas

Las polibenzoínas se pueden obtener utilizando catalizadores orgánicos a partir de la policondensación de dialdehídos.⁵² Tradicionalmente se obtenían utilizando iones cianuro extremadamente tóxicos. Recientemente el grupo de Taton y Gnanou han demostrado que los NHCson eficaces para

dicha reacción dando lugar a polibenzoínas amorfas.⁵³ Una de las últimas aplicaciones del uso de la organocatálisis en reacciones de condensación de benzoínas es la preparación de materiales porosos para membranas de separación de gases. De este modo se han utilizado catalizadores ácidos para condensar diferentes aldehídos aromáticos sin generar productos secundarios y libres de metales⁶ lo cual ha permitido generar materiales en los que el catalizador no genere ningún desperfecto. En la Figura 12 se muestra el esquema del proceso de polimerización así como el material obtenido.

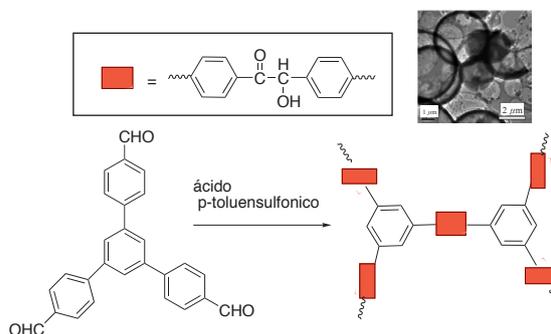


Figura 12. Preparación de polímeros microporosos a través de la condensación catalizada por ácidos de la benzoína.⁶

Conclusiones y perspectivas

En este trabajo hemos presentado la organocatálisis como alternativa a otro tipo de catálisis tanto en polimerizaciones en cadena como por etapas y se ha aportado una visión global de las nuevas posibilidades que brinda el uso de catalizadores orgánicos dentro del campo de síntesis de polímeros. Gracias

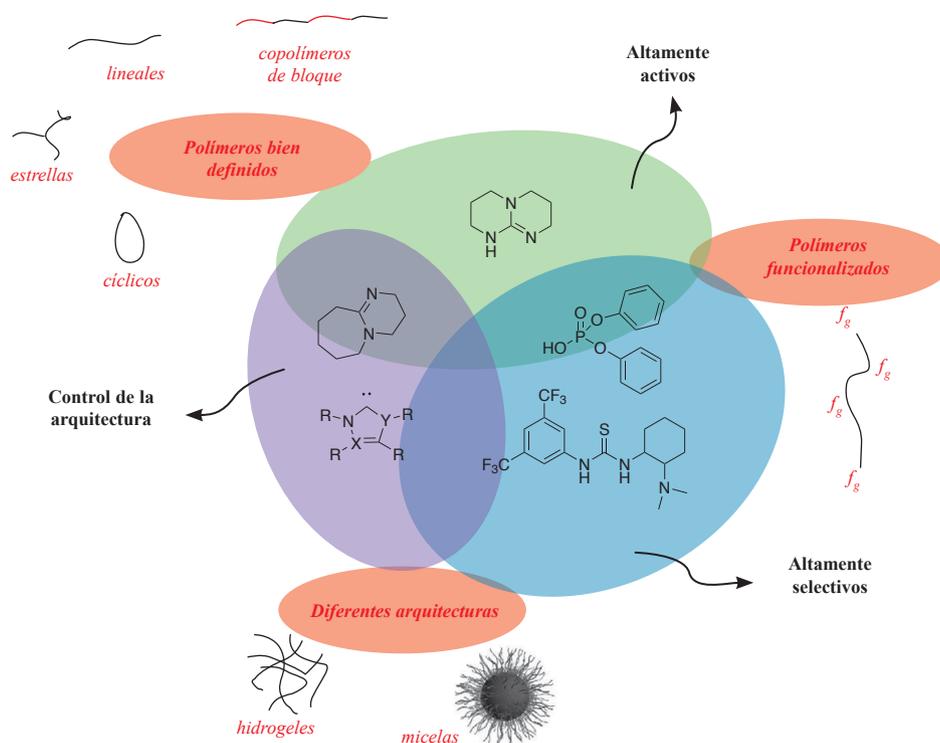


Figura 13. Actividad, conveniencia y selectividad de la organocatálisis en la síntesis de polímeros.

a la excelente actividad, selectividad, conveniencia, y reactividad de los catalizadores orgánicos somos capaces de obtener polímeros bien definidos de forma controlada (Figura 13). El mayor impacto que ha causado el uso de catalizadores orgánicos ha sido sin duda en reacciones de polimerización por apertura de anillo de ésteres y carbonatos cíclicos a través de la cual se obtienen estructuras poliméricas complejas, biodegradables y perfectas para aplicaciones biomédicas. Sin embargo como hemos visto, los resultados obtenidos para otro tipo de polimerizaciones son prometedores e interesantes para continuar siendo investigadas.

El principal reto de la organocatálisis en los últimos años ha sido el sintetizar polímeros comerciales superando las prestaciones de los catalizadores organometálicos, haciendo procesos más rápidos, sostenibles y baratos. En este sentido, un gran avance sería el poder sintetizar polímeros como poliésteres o poliuretanos en medio acuoso que en la actualidad no es posible. Sin embargo, de cara al futuro, el gran reto es el desarrollar nuevos polímeros que no se pueden sintetizar a día de hoy con los catalizadores actuales. En este sentido, las polibenzoínas son un primer ejemplo de un nuevo tipo de polímero que ha surgido gracias a la organocatálisis. El gran reto incluye el diseñar catalizadores orgánicos que permitan el estereoccontrol de la polimerización y generar nuevos materiales estereoregulares y con una arquitectura macromolecular controlada.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Universidad del País Vasco UPV/EHU (UF111/56) y MINECO (MAT2011-27993). Haritz Sardon agradece al Gobierno Vasco la ayuda postdoctoral (DKR) concedida.

Bibliografía

- V. C. Gibson, E. L. Marshall en *Comprehensive Coordination Chemistry II, Vol. 9* (Eds.: J. A. Mc Cleverty, T. J. Meyer), Pergamon, **2003**, 1–74.
- R. A. Gross, M. Ganesh, W. Lu, *Trends Biotechnol.* **2010**, *28*, 435–443.
- F. Nederberg, E. F. Connor, M. Möller, T. Glauser, J. L. Hedrick, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2001**, *40*, 2712–2715.
- M. K. Kiesewetter, E. J. Shin, J. L. Hedrick, R. M. Waymouth, *Macromolecules* **2010**, *43*, 2093–2107.
- J. Alsarraf, Y. A. Ammar, F. Robert, E. Cloutet, H. Cramail, Y. Landais, *Macromolecules* **2012**, *45*, 2249–2256.
- Y.-C. Zhao, T. Wang, L.-M. Zhang, Y. Cui, B.-H. Han, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2012**, *4*, 6975–6981.
- G. W. Nyce, J. A. Lamboy, E. F. Connor, R. M. Waymouth, J. L. Hedrick, *Org. Lett.* **2002**, *4*, 3587–3590.
- P. U. Naik, K. Refes, F. Sadaka, C.-H. Brachais, G. Boni, J.-P. Couvercelle, M. Picquet, L. Plasseraud, *Polym. Chem.* **2012**, *3*, 1475–1480.
- N. E. Kamber, Y. Tsujii, K. Keets, R. M. Waymouth, R. C. Pratt, G. W. Nyce, J. L. Hedrick, *J. Chem. Educ.* **2010**, *87*, 519–521.
- A. P. Dove, *ACS Macro Lett.* **2012**, *1*, 1409–1412.
- N. Susperregui, D. Delcroix, B. Martin-Vaca, D. Bourissou, L. Maron, *J. Org. Chem.* **2010**, *75*, 6581–6587.
- D. Bourissou, B. Martin-Vaca, A. Dumitrescu, M. Graullier, F. Lacombe, *Macromolecules* **2005**, *38*, 9993–9998.
- D. Delcroix, A. Couffin, N. Susperregui, C. Navarro, L. Maron, B. Martin-Vaca, D. Bourissou, *Polym. Chem.* **2011**, *2*, 2249–2256.
- D. J. Coady, H. W. Horn, G. O. Jones, H. Sardon, A. C. Engler, R. M. Waymouth, J. E. Rice, Y. Y. Yang, J. L. Hedrick, *ACS Macro Lett.* **2013**, *2*, 306–312.

15. D. J. Coady, H. W. Horn, G. O. Jones, H. Sardon, A. C. Engler, R. M. Waymouth, J. E. Rice, Y. Y. Yang, J. L. Hedrick, *ACS Macro Lett.* **2013**, *2*, 306–312.
16. A. C. Engler, J. M. W. Chan, D. J. Coady, J. M. O'Brien, H. Sardon, A. Nelson, D. P. Sanders, Y. Y. Yang, J. L. Hedrick, *Macromolecules* **2013**, *46*, 1283–1290.
17. A. Pascual, J. R. Leiza, D. Mecerreyes, *Eur. Polym. J.* **2013**, *49*, 1601–1609.
18. M. Fevre, J. Pinaud, Y. Gnanou, J. Vignolle, D. Taton, *Chem. Soc. Rev.* **2013**, *42*, 2142–2172.
19. E. F. Connor, G. W. Nyce, M. Myers, A. Möck, J. L. Hedrick, *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *124*, 914–915.
20. G. W. Nyce, T. Glauser, E. F. Connor, A. Möck, R. M. Waymouth, J. L. Hedrick, *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 3046–3056.
21. B. G. G. Lohmeijer, G. Dubois, F. Leibfarth, R. C. Pratt, F. Nederberg, A. Nelson, R. M. Waymouth, C. Wade, J. L. Hedrick, *Org. Lett.* **2006**, *8*, 4683–4686.
22. J. Raynaud, C. Absalon, Y. Gnanou, D. Taton, *Macromolecules* **2010**, *43*, 2814–2823.
23. M. Fèvre, J. Pinaud, A. Leteneur, Y. Gnanou, J. Vignolle, D. Taton, K. Miqueu, J.-M. Sotiropoulos, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 6776–6784.
24. E. Brule, V. Guerineau, P. Vermaut, F. Prima, J. Balogh, L. Maron, A. M. Z. Slawin, S. P. Nolan, C. M. Thomas, *Polym. Chem.* **2013**, *4*, 2414–2423.
25. D. J. Coady, K. Fukushima, H. W. Horn, J. E. Rice, J. L. Hedrick, *Chem. Commun.* **2011**, *47*, 3105–3107.
26. F. Suriano, O. Coulembier, P. Dubois, *React. Funct. Polym.* **2010**, *70*, 747–754.
27. J. Xu, F. Prifti, J. Song, *Macromolecules* **2011**, *44*, 2660–2667.
28. G. L. Fiore, F. Jing, J. V. G. Young, C. J. Cramer, M. A. Hillmyer, *Polym. Chem.* **2010**, *1*, 870–877.
29. F. Jing, M. A. Hillmyer, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 13826–13827.
30. Y. Iwasaki, E. Yamaguchi, *Macromolecules* **2010**, *43*, 2664–2666.
31. S. Zhang, A. Li, J. Zou, L. Y. Lin, K. L. Wooley, *ACS Macro Lett.* **2012**, *1*, 328–333.
32. M. Bouyahyi, M. P. F. Pepels, A. Heise, R. Duchateau, *Macromolecules* **2012**, *45*, 3356–3366.
33. M. T. Martello, A. Burns, M. Hillmyer, *ACS Macro Lett.* **2011**, *1*, 131–135.
34. H. Kim, J. V. Olsson, J. L. Hedrick, R. M. Waymouth, *ACS Macro Lett.* **2012**, *1*, 845–847.
35. A. P. Dove, R. C. Pratt, B. G. G. Lohmeijer, R. M. Waymouth, J. L. Hedrick, *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 13798–13799.
36. R. C. Pratt, B. G. G. Lohmeijer, D. A. Long, P. N. P. Lundberg, A. P. Dove, H. Li, C. G. Wade, R. M. Waymouth, J. L. Hedrick, *Macromolecules* **2006**, *39*, 7863–7871.
37. M. Kawalec, A. P. Dove, L. Mespouille, P. Dubois, *Polym. Chem.* **2013**, *4*, 1260–1270.
38. F. Nederberg, Y. Zhang, J. P. K. Tan, K. Xu, H. Wang, C. Yang, S. Gao, X. D. Guo, K. Fukushima, L. Li, J. L. Hedrick, Y.-Y. Yang, *Nature Chem.* **2011**, *3*, 409–414.
39. J. P. K. Tan, S. H. Kim, F. Nederberg, K. Fukushima, D. J. Coady, A. Nelson, Y. Y. Yang, J. L. Hedrick, *Macromol. Rapid Comm.* **2010**, *31*, 1187–1192.
40. J. Raynaud, A. Ciolino, A. Baceiredo, M. Destarac, F. Bonnette, T. Kato, Y. Gnanou, D. Taton, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 5390–5393.
41. M. D. Scholten, J. L. Hedrick, R. M. Waymouth, *Macromolecules* **2008**, *41*, 7399–7404.
42. K. Fuchise, Y. Chen, T. Satoh, T. Kakuchi, *Polym. Chem.* **2013**, *4*, 4278–4291.
43. H. Yang, J. Xu, S. Pispas, G. Zhang, *Macromolecules* **2012**, *45*, 3312–3317.
44. Y. Chen, K. Fuchise, A. Narumi, S. Kawaguchi, T. Satoh, T. Kakuchi, *Macromolecules* **2011**, *44*, 9091–9098.
45. J.-C. Hsu, Y. Chen, T. Kakuchi, W.-C. Chen, *Macromolecules* **2011**, *44*, 5168–5177.
46. A. Oromiehie, A. Mamizadeh, *Polym. Int.* **2004**, *53*, 728–732.
47. D. Paszun, T. Szychaj, *Ind. Eng. Chem. Res.* **1997**, *36*, 1373–1383.
48. K. Fukushima, D. J. Coady, G. O. Jones, H. A. Almegren, A. M. Alabdulrahman, F. D. Alsewilem, H. W. Horn, J. E. Rice, J. L. Hedrick, *J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem.* **2013**, *51*, 1606–1611.
49. K. Fukushima, J. M. Lecuyer, D. S. Wei, H. W. Horn, G. O. Jones, H. A. Al-Megren, A. M. Alabdulrahman, F. D. Alsewilem, M. A. McNeil, J. E. Rice, J. L. Hedrick, *Polym. Chem.* **2013**, *4*, 1610–1616.
50. H. Sardon, L. Irusta, M. J. Fernández-Berridi, *Prog. Org. Coat.* **2009**, *66*, 291–295.
51. O. Coutelier, M. El Ezzi, M. Destarac, F. Bonnette, T. Kato, A. Baceiredo, G. Sivasankarapillai, Y. Gnanou, D. Taton, *Polym. Chem.* **2012**, *3*, 605–608.
52. L. Baragwanath, C. A. Rose, K. Zeitler, S. J. Connon, *J. Org. Chem.* **2009**, *74*, 9214–9217.
53. J. Pinaud, K. Vijayakrishna, D. Taton, Y. Gnanou, *Macromolecules* **2009**, *42*, 4932–4936.

Efecto de la concentración de surfactante y de la temperatura en la biodegradación de naftaleno, antraceno y fenantreno por *Enterobacter* sp., *Pseudomonas* sp. y *Stenotrophomonas* sp. aislados de un consorcio degradador de HAP

Natalia González, Luis Fernando Bautista, Carmen Molina, Raquel Simarro, Carolina Vargas, Raquel Flores

Resumen: La contaminación ambiental por hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP) es actualmente un problema muy extendido. Los HAP son generados por la combustión incompleta de combustibles fósiles entre otros y, además de sus propiedades tóxicas, son poco solubles en agua. Para abordar este problema, se utilizan surfactantes ya que favorecen la solubilidad de dichos compuestos hidrófobos. La temperatura también influye en las propiedades de los HAP y en el metabolismo de los microorganismos involucrados en su degradación. *Enterobacter* sp., *Pseudomonas* sp. y *Stenotrophomonas* sp., tienen una capacidad degradadora de naftaleno, fenantreno y antraceno eficiente a 15 y 25 °C.

Palabras clave: Hidrocarburos aromáticos policíclicos, surfactantes, microorganismos.

Abstract: Environmental contamination by polycyclic aromatic hydrocarbons (PAH) is currently a widespread problem. PAHs are produced by incomplete combustion of fossil fuels and other materials. Moreover, PAHs are poorly soluble in water and they present toxic properties. In order to address this problem, surfactants are often used due to they favor the solubility of these hydrophobic compounds. Temperature influences both on the properties of PAHs and the metabolism of microorganisms involved in this process. *Enterobacter* sp., *Pseudomonas* sp. and *Stenotrophomonas* sp., have an efficient degrading capacity of naphthalene, phenanthrene and anthracene at 15 and 25 °C.

Keywords: Polycyclic aromatic hydrocarbons, surfactants, microorganisms.



N. González¹



L. F. Bautista²



C. Molina¹



R. Simarro³



C. Vargas²



R. Flores⁴

¹ Departamento de Biología y Geología, ESCET, Universidad Rey Juan Carlos, Móstoles (Madrid).
C-e: natalia.gonzalez@urjc.es, carmen.molina@urjc.es

² Departamento de Tecnología Química y Ambiental, ESCET, Universidad Rey Juan Carlos, Móstoles (Madrid).
C-e: fernando.bautista@urjc.es, carolina.vargas@urjc.es

³ Facultad de Ciencias Ambientales, Universidad Internacional SEK, Quito (Ecuador).
C-e: raquel.simarro@urjc.es

⁴ Departamento de Botánica, Facultad de Biología, Universidad de Valencia (España).
C-e: raquel.flores@uv.es

Recibido: 16/05/2013. Aceptado: 30/09/2013.

Introducción

La contaminación ambiental por hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP) es actualmente un problema muy extendido. Los HAP son generados por la combustión incompleta de combustibles fósiles y otros materiales orgánicos y, además de sus propiedades tóxicas, mutagénicas y carcinogénicas,¹ son muy poco solubles en agua.² Para abordar este problema en biorremediación y permitir una mayor biodisponibilidad a los microorganismos, se suelen utilizar agentes surfactantes debido a que favorecen la solubilidad de dichos compuestos hidrófobos.³ Sin embargo, hay resultados contradictorios acerca de los efectos del surfactante sobre el proceso de biodegradación.^{4,5} Hay muchos factores, tales como el tipo y la concentración del surfactante o la mezcla de sustrato y microorganismo implicado, que afectan a dicha biodegradación. Por ello se hace necesario un estudio de optimización previo en base a ciertos factores implicados en el proceso que permitirá obtener en mayor medida resultados positivos.

La temperatura es otro factor de gran influencia en las propiedades de los HAP y en el metabolismo de los microorganismos involucrados en este proceso. Aunque se ha demostrado que la biodegradación de HAP es posible a temperaturas bajas,⁶ con temperaturas moderadas (entre 20 °C y 30 °C), el proceso es más eficiente. También se conoce que a temperaturas por debajo de 20 °C, se ralentiza el crecimiento bacteriano debido al retraso en el metabolismo de las bacterias.⁷

Con el fin de eliminar estos contaminantes de suelos y entornos de agua, se han probado varias tecnologías de remediación diferentes demostrándose que la biorremediación es la práctica más eficaz, siendo la degradación bacteriana⁸ una de las más estudiadas y aplicadas. Diversos géneros

de bacterias gram-positivas y gram-negativas han sido aislados y caracterizados por su capacidad para degradar los HAP de 2 ó 3 anillos aromáticos, entre los cuales destacan: *Pseudomonas* sp.,⁹ *Mycobacterium* sp.,¹⁰ *Sphingomonas* sp.¹¹ y *Achromobacter* sp.¹² Sin embargo, hay otros géneros como *Enterobacter* sp.¹³ y *Stenotrophomonas* sp.¹⁴ mucho menos descritos en la bibliografía, que han demostrado un potencial papel degradador de hidrocarburos aromáticos policíclicos en un consorcio microbiano extraído de suelos contaminados. En este artículo se pretende analizar la capacidad degradadora de estas cepas de forma individual y la eficacia de un consorcio artificial formado por estas mismas cepas, ya que según las relaciones que se establecen entre las especies pueden tener efectos positivos o negativos en el proceso de biodegradación.

El objetivo del presente estudio consiste en examinar el efecto de la concentración del surfactante biodegradable no iónico Tween-80 (T80) y de la temperatura (15 y 25 °C) sobre la capacidad degradadora de tres cepas bacterianas, cuando éstas son inoculadas de forma independiente y cuando se forma un consorcio artificial con las mismas. Para el estudio del proceso de biodegradación, se seleccionaron tres HAP de bajo peso molecular (naftaleno, fenantreno y antraceno).

Diseño experimental

Para evaluar la influencia de la temperatura y de la concentración de surfactante en la capacidad degradadora de las cepas, se llevaron a cabo un total de 20 experimentos, cada uno por triplicado, en matraces erlenmeyer de 100 mL con un volumen total de 50 mL de BHB (Bushnell Haas Broth, composición: 0,2 g L⁻¹ MgSO₄ · 7H₂O, 0,02 g L⁻¹ CaCl₂ 2H₂O, 1 g L⁻¹ KH₂PO₄, 1 g L⁻¹ K₂HPO₄, 1 g L⁻¹ NH₄NO₃, 0,05 g L⁻¹ FeCl₃) con Tween-80 como surfactante en las concentraciones correspondientes a cada experimento (Tabla 1), naftaleno, fenantreno y antraceno (500 mg/L) como fuente de carbono y las cepas bacterianas de *Pseudomonas* sp., de *Enterobacter* sp. y de *Stenotrophomonas* sp. inoculadas individualmente o formando un consorcio (7,5 % v/v). Las réplicas se incubaron en un agitador orbital (Innova 40; New Brunswick Scientific; Edison, NJ, EE.UU.) a 150 rpm, bajo condiciones de oscuridad a 15 y 25 °C. Antes de inocular el consorcio, los erlenmeyers con el medio y los HAP se agitaron durante toda la noche para permitir la solubilización de la mayoría de los HAP.

Los factores utilizados para estudiar la capacidad de degradación de HAP de las cepas fueron, la temperatura (15 y 25 °C), la concentración del surfactante Tween-80 (0,015 mM, y 0,15 mM, teniendo en cuenta que la concentración micelar crítica (CMC) es 0,012 mM) y el tipo de inóculo (cepas por separado o cepas juntas). En el tratamiento con las tres cepas juntas se estudió el efecto de dos concentraciones de surfactante más (0,006 mM y 40,60 mM). El surfactante Tween-80 fue seleccionado en base a un artículo previo¹⁴ en el que se establecía este surfactante como óptimo para las condiciones establecidas. Las cepas bacterianas utilizadas en este estudio (de *Enterobacter* sp., de *Pseudomonas* sp. y de *Stenotrophomonas* sp.) se aislaron de un consorcio degradador de HAP (consorcio C2PL05)¹³ extraído de un suelo permanentemente contaminado de una refinería en Puertollano (Ciudad Real, España). Las condiciones de incubación de cada uno de los 20 experimentos se detallan en la Tabla 1.

Tabla 1. Condiciones experimentales.

Experimento	T(°C)	Concentración Tween-80 (mM)	Bacteria
1	25	0,015	<i>Pseudomonas</i> sp.
2	25	0,015	<i>Enterobacter</i> sp.
3	25	0,015	<i>Stenotrophomonas</i> sp.
4	25	0,015	<i>Pseudomonas</i> sp. <i>Enterobacter</i> sp. <i>Stenotrophomonas</i> sp.
5	25	0,15	<i>Pseudomonas</i> sp.
6	25	0,15	<i>Enterobacter</i> sp.
7	25	0,15	<i>Stenotrophomonas</i> sp.
8	25	0,15	<i>Pseudomonas</i> sp. <i>Enterobacter</i> sp. <i>Stenotrophomonas</i> sp.
9	25	0,006	<i>Pseudomonas</i> sp. <i>Enterobacter</i> sp. <i>Stenotrophomonas</i> sp.
10	25	40,60	<i>Pseudomonas</i> sp. <i>Enterobacter</i> sp. <i>Stenotrophomonas</i> sp.
11	15	0,015	<i>Pseudomonas</i> sp.
12	15	0,015	<i>Enterobacter</i> sp.
13	15	0,015	<i>Stenotrophomonas</i> sp.
14	15	0,015	<i>Pseudomonas</i> sp. <i>Enterobacter</i> sp. <i>Stenotrophomonas</i> sp.
15	15	0,15	<i>Pseudomonas</i> sp.
16	15	0,15	<i>Enterobacter</i> sp.
17	15	0,15	<i>Stenotrophomonas</i> sp.
18	15	0,15	<i>Pseudomonas</i> sp. <i>Enterobacter</i> sp. <i>Stenotrophomonas</i> sp.
19	15	0,006	<i>Pseudomonas</i> sp. <i>Enterobacter</i> sp. <i>Stenotrophomonas</i> sp.
20	15	40,60	<i>Pseudomonas</i> sp. <i>Enterobacter</i> sp. <i>Stenotrophomonas</i> sp.

Crecimiento de las células

La densidad bacteriana durante el proceso de degradación de HAP se determinó mediante cambios en la absorbancia de los cultivos por espectrofotometría a 600 nm (espectrofotómetro Spectronic Genesys TM). Las mediciones se realizaron a las 0, 24, 48, 72, 96 y 168 h del periodo de incubación.

Análisis de HAP

Las concentraciones de naftaleno, fenantreno y antraceno durante el proceso de biodegradación se analizaron mediante un sistema de HPLC ProStar 230 (Varian) con una columna de fase inversa C18 siguiendo el método descrito en un trabajo previo.¹⁴ La concentración de cada uno de ellos se calculó a partir de una curva patrón a longitud de onda de 254 nm.

La tasa de agotamiento de cada HAP ($-r_i$) durante los experimentos fue equiparada con un modelo de cinética de primer orden (Ecuación 1),

$$-r_i = dC_i/dt = K_{Ai} \cdot C_i + K_{Bi} \cdot C_i \quad (1)$$

donde C es la concentración de HAP medido por análisis de HPLC, K_A es la constante cinética aparente de primer orden debida a procesos abióticos, K_B es la constante cinética aparente de primer orden debida a procesos biológicos, t es el tiempo y el subíndice i corresponde a cada HAP. A partir de los experimentos de control realizados previamente, se observó que la degradación de los hidrocarburos de tres anillos no está asociada a ningún proceso abiótico.¹³ Sin embargo, en el caso de naftaleno se midió durante los controles un cierto grado de agotamiento abiótico ($K_A = 2,7 \cdot 10^{-3} \pm 7,0 \cdot 10^{-5} \text{ h}^{-1}$).

Análisis estadístico

Con el objetivo de analizar los efectos de los diferentes factores considerados sobre la K_B de cada uno de los tres HAP, se realizaron análisis multifactoriales de las varianzas (ANOVA). En los experimentos inoculados con las cepas por separado se evaluó la influencia en la K_B de la temperatura (15 °C y 25 °C), la concentración de surfactante (0,015 mM y 0,15 mM) y el tipo de cepa (de *Pseudomonas* sp., de *Enterobacter* sp. y de

Stenotrophomonas sp.). Cuando las cepas se inocularon en conjunto formando un consorcio artificial, sólo se evaluó la influencia de la temperatura (15 °C y 25 °C) y la concentración de surfactante (0,006 mM; 0,015 mM; 0,15 mM y 40,60 mM). La homogeneidad de las varianzas fue evaluada en cada caso mediante el test de Cochran, logaritmizando los datos en caso de que resultaran heterogéneos. Finalmente, los datos se consideraron estadísticamente significativos cuando la $p < 0,05$.

Resultados

Las curvas de crecimiento de las bacterias a diferentes concentraciones y temperaturas (Figura 1) mostraron fase de retardo, fase exponencial y en algunos casos, la parte inicial de la fase estacionaria. Cuando el proceso de biodegradación se desarrolló a 25 °C, en todas las cepas se alcanzó la fase exponencial, mientras que, a 15 °C la fase de retardo se extendió hasta el final de los experimentos (168 horas). A esta temperatura, sólo las cepas de *Pseudomonas* sp. alcanzaron la fase exponencial.

En los experimentos inoculados con las tres cepas formando un consorcio (Figura 1 C, F), tan sólo el experimento con una concentración de surfactante de 40,60 mM alcanzó la fase de crecimiento exponencial. El resto de los experimentos a ambas temperaturas, se mantuvieron en fase de retardo.

En la Figura 2, se muestra la influencia de la temperatura y de la concentración de surfactante Tween-80 en la K_B de las tres cepas individualmente. Para un mismo hidrocarburo, los valores de K_B son similares a ambas temperaturas. Sin embargo, los valores de K_B del naftaleno (Figura 1 A, D) fueron un orden de magnitud mayor, a ambas temperaturas y

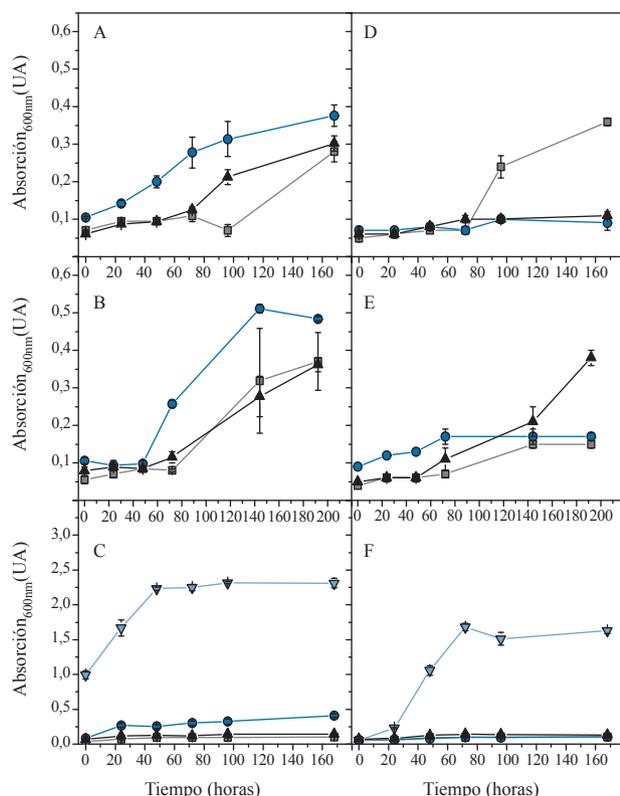


Figura 1. Absorbancia a 25 °C (A,B,C) y 15 °C (D,E,F) de los experimentos inoculados con las cepas por separado (de *Pseudomonas* (■), de *Enterobacter* (●) y de *Stenotrophomonas* (▲)) y concentración de surfactante 0,015 mM (A,B) y 0,15 mM (D,E). C y F muestran la absorbancia de los experimentos inoculados con las cepas formando un consorcio y las concentraciones de surfactante de 0,006 mM (■), 0,015 mM (●), 0,15 mM (▲) y 40,60 mM (▼).

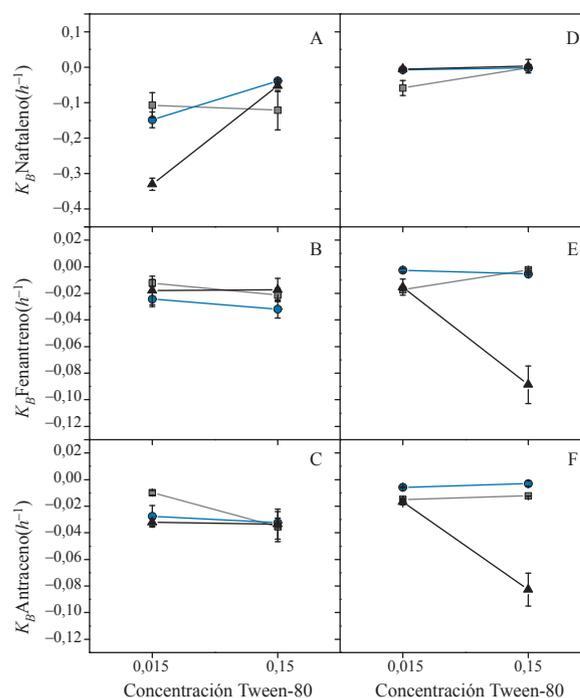


Figura 2. Influencia de la temperatura (25 °C: A, B, C; 15 °C: D, E, F) y de la concentración de surfactante en la K_B del naftaleno, fenantreno y antraceno de los experimentos inoculados con las cepas de *Pseudomonas* (■), de *Enterobacter* (●) y de *Stenotrophomonas* (▲) por separado.

concentraciones de surfactante, que los valores de K_B para el fenantreno y antraceno (Figura 1 B, E y C, F respectivamente). Cabe destacar que los valores obtenidos de K_B del naftaleno correspondientes a *Stenotrophomonas* sp. incubada a 25 °C (Figura 1 A) son mayores que los de *Enterobacter* sp. y *Pseudomonas* sp., cuando la concentración de surfactante es de 0,015 mM. Los patrones de K_B de fenantreno y antraceno son similares a ambas temperaturas y concentraciones de surfactante (Figura 2 B, C, E, F). Sin embargo, y a diferencia de lo que ocurre con el naftaleno, en el caso de *Stenotrophomonas* sp., la K_B es mayor cuando la concentración de surfactante es 0,015 mM y la temperatura 15 °C.

Tabla 2. Análisis estadístico de la K_B de naftaleno, fenantreno y antraceno en los experimentos donde las cepas fueron inoculadas por separado.

K_B Naftaleno				
Factor	<i>d.f.</i>	<i>M.S.</i>	<i>F</i>	<i>p</i>
Intercepción	1	89,04	1707,84	***
T	1	10,58	202,96	***
Conc. Tween-80	1	1,54	29,56	***
Cepa	2	0,71	13,76	***
T x Conc. Tween-80	1	0,17	3,44	<i>n.s.</i>
T x Cepa	2	0,31	6,09	**
Conc. Tween-80 x Cepa	2	1,41	27,10	***
T x Conc. Tween-80 x Cepa	2	2,36	45,27	***
Error	24	0,05		
K_B Fenantreno				
Intercepción	1	0,021	441,52	***
T	1	$1,9 \cdot 10^{-5}$	0,39	<i>n.s.</i>
Conc. Tween-80	1	$1,62 \cdot 10^{-3}$	33,25	***
Cepa	2	$3,13 \cdot 10^{-3}$	64,22	***
T x Conc. Tween-80	1	$8,73 \cdot 10^{-4}$	17,89	***
T x Cepa	2	$2,88 \cdot 10^{-3}$	59,02	***
Conc. Tween-80 x Cepa	2	$1,66 \cdot 10^{-6}$	34,11	***
T x Conc. Tween-80 x Cepa	2	$2,53 \cdot 10^{-3}$	51,84	***
Error	24	$4,9 \cdot 10^{-5}$		
K_B Antraceno				
Intercepción	1	0,023	189,64	***
T	1	$3,21 \cdot 10^{-4}$	2,54	<i>n.s.</i>
Conc. Tween-80	1	$2,16 \cdot 10^{-3}$	16,78	***
Cepa	2	$2,16 \cdot 10^{-3}$	17,14	***
T x Conc. Tween-80	1	$2,54 \cdot 10^{-4}$	2,02	<i>n.s.</i>
T x Cepa	2	$1,35 \cdot 10^{-3}$	10,72	***
Conc. Tween-80 x Cepa	2	$8,15 \cdot 10^{-4}$	6,47	**
T x Conc. Tween-80 x Cepa	2	$1,72 \cdot 10^{-3}$	13,7	***
Error	24	$1,26 \cdot 10^{-4}$		

* $p < 0,05$; ** $p < 0,01$; *** $p < 0,001$

El análisis estadístico de la influencia de los factores considerados (temperatura, concentración de surfactante y cepa) en la K_B de cada HAP (Tabla 2), muestra que la interacción entre los tres factores fue estadísticamente significativa para los tres HAP ($p < 0,001$; Tabla 2). Esto significa que los cambios en el valor de uno de estos factores, afectará de manera significativa a K_B . En el caso del naftaleno y antraceno, la temperatura de incubación no fue un factor significativamente influyente cuando es analizada individualmente.

En la Figura 3 se muestra la influencia de la temperatura y de la concentración de surfactante en la K_B de cada HAP en los experimentos inoculados con las tres cepas formando un consorcio. De forma generalizada se puede decir que los valores de K_B de los tres HAP a bajas concentraciones de Tween-80 (0,006; 0,015 mM) fueron mayores a 25 °C. Sin embargo, a concentraciones de surfactante más elevadas (0,15 mM y 40,60 mM) las K_B fueron ligeramente superiores a 15 °C. Para cada temperatura, salvo alguna excepción (Figura 2C, 15 °C), la K_B de los hidrocarburos disminuyó progresivamente conforme aumenta la concentración de Tween-80.

Los análisis estadísticos referentes al proceso de degradación con las tres cepas formando un consorcio, muestran que la interacción entre los dos factores (temperatura y concentración de Tween-80) fue estadísticamente significativa en el caso de los tres hidrocarburos ($p < 0,001$ en todos los casos). Esto significa que los cambios en el valor de uno de estos factores, afectará de manera significativa a K_B . Individualmente, la temperatura y la concentración de surfactante fueron factores significativamente influyentes en la K_B del naftaleno y fenantreno, no lo fue sin embargo la temperatura en la K_B del antraceno.

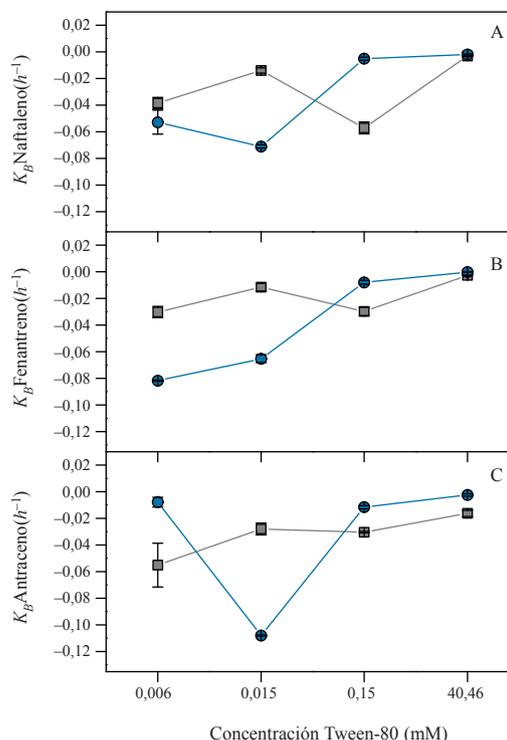


Figura 3. Influencia de la temperatura (25 °C (●) y 15 °C (■)) y de la concentración de surfactante en la K_B del naftaleno (A), fenantreno (B) y antraceno (C) de los experimentos inoculados con las tres cepas formando un consorcio.

Discusión

A pesar de que los factores estudiados en este trabajo han sido muy discutidos, hay muy pocos artículos¹⁵ que estudien la eficiencia del proceso teniendo en cuenta las interacciones entre los factores. Con este objetivo, se analizan estadísticamente los datos de K_B para obtener la influencia de los factores de forma individual y teniendo en cuenta su interacción. De acuerdo con un artículo previo,¹⁶ los resultados obtenidos demuestran que es importante considerar las interacciones entre factores en estudios de biorremediación previa aplicación, debido a que en el medio ambiente existen múltiples interacciones de factores bióticos y abióticos.

Los datos obtenidos sobre el porcentaje total de agotamiento, confirman que las tres cepas son capaces de degradar los HAP para todas las combinaciones de factores¹⁴ (porcentaje de agotamiento HAP > 99% en todos los experimentos). La temperatura es uno de los factores ambientales más determinantes en la biodegradación de HAP. Los resultados obtenidos en este estudio, sugieren de acuerdo a estudios previos¹⁶, que cuando las fluctuaciones en la temperatura son moderadas (en un rango de temperatura comprendido entre los 20-30 °C¹⁷), las tasas de crecimiento pueden verse afectadas pero no impide que la población sea capaz de degradar HAP eficientemente. Sin embargo, los análisis estadísticos muestran que la combinación de los tres factores conlleva ciertas diferencias significativas en la K_B .

Los surfactantes se utilizan comúnmente en la biorremediación para mejorar la solubilidad de HAP, sin embargo, su efecto para cada proceso depende de varios factores como son el tipo microorganismo, el tipo de sustrato o tipo y concentración del surfactante utilizado.³ Algunos autores defienden que los surfactantes tienen efectos negativos en la biorremediación debido a su toxicidad.¹⁴ Sin embargo, otros consideran que los surfactantes no iónicos no son nocivos y en concentraciones por encima de la CMC mejoran el proceso de biodegradación.¹⁸ En este sentido, en un estudio previo confirmamos que el surfactante Tween-80 es óptimo para el tipo de cepas y HAP utilizados en este trabajo¹⁴. Por otro lado, un aspecto negativo de este surfactante es que puede ser utilizado como fuente de carbono por algunos microorganismos,³ pero hemos probado que las cepas bacterianas utilizadas en este estudio también utilizan HAP como fuente de carbono.¹⁴ Este hecho, podría explicar que el mayor crecimiento celular se consigue con las mayores concentraciones de Tween-80 (0,15 mM y 40,60 mM).

Tal y como ya se ha comentado, todos los experimentos y combinaciones de factores resultaron efectivos en la degradación de HAP. Sin embargo, los análisis estadísticos confirmaron que la variación de alguno de los tres factores considerados cuando las cepas son inoculadas independientemente (temperatura, concentración de Tween-80 y cepa, Tabla 2) y la variación en alguno de los dos factores considerados con las cepas en consorcio (temperatura y concentración de Tween-80, Tabla 3), influye significativamente en la K_B de los tres HAP. De acuerdo con nuestros resultados, a 15 °C *Stenotrophomonas* sp. fue la cepa más eficiente en la biodegradación de los HAP de mayor peso molecular (antraceno y fenantreno), significativamente mejor cuando la concentración de Tween-80 fue 0,15 mM. Estos resultados, confirman estudios previos en los cuales la biodegradación a

bajas temperaturas (10 °C) se ve favorecida notablemente por la presencia de surfactante.¹⁷ Se ha encontrado que la solubilidad de los HAP aumenta proporcionalmente con el incremento de la concentración de surfactante por encima de la CMC, aumentando así la disponibilidad de los hidrocarburos por microorganismo.³ Son pocas las publicaciones que han identificado *Stenotrophomonas* sp. como bacteria degradadora³. Sin embargo, en un artículo previo, se ha encontrado que una cepa perteneciente al caldo tipo de *Stenotrophomonas maltophilia*¹⁴ fue capaz de degradar HAP de alto peso molecular en presencia de diferentes surfactantes no iónicos. Recientemente, se ha aislado una cepa de *Stenotrophomonas* sp. de un suelo contaminado, que fue capaz de degradar naftaleno, fenantreno y antraceno de forma más eficaz con Tween-80 como surfactante.¹⁴ Es importante destacar el hecho de que a 15 °C, la capacidad degradadora de *Stenotrophomonas* sp. es mayor que la de *Enterobacter* sp. o *Pseudomonas* sp. (Figura 2). Algunas publicaciones¹⁹ han identificado cepas de *Stenotrophomonas maltophilia* en aguas procedentes del deshielo de glaciares, clasificándola por tanto en el grupo de las bacterias psicrotolerantes y psicrófilas. La aceptable capacidad degradadora de HAP que muestran algunas cepas de *Stenotrophomonas* sp. junto con su capacidad para sobrevivir en ambientes fríos, goza de especial importancia desde el punto de vista aplicado en la biorremediación de ambientes fríos.

Cuando se realizó el proceso de biodegradación a 25 °C, los valores obtenidos de K_B para los tres HAP estudiados fueron superiores que los encontrados a 15 °C. De acuerdo con algunos autores,⁶ por debajo del rango óptimo de temperaturas (20-35 °C), se puede ralentizar la tasa de bio-

Tabla 3. Análisis estadístico de la K_B del naftaleno, fenantreno y antraceno de los experimentos inoculados con las cepas formando un consorcio.

K_B Naftaleno				
Factor	d.f	M.S	F	p
Intercepción	1	72,67	6052,96	***
T	1	0,92	77,45	***
Conc. Tween-80	3	0,80	67,28	***
T x Conc. Tween-80	3	0,78	65,40	***
Error	16	0,012		
K_B Fenantreno				
Intercepción	1	0,022	1949,60	***
T	1	$3 \cdot 10^{-3}$	283,31	***
Conc. Tween-80	3	$3 \cdot 10^{-3}$	333,99	***
T x Conc. Tween-80	3	$2 \cdot 10^{-3}$	240,43	***
Error	16	$1,2 \cdot 10^{-5}$		
K_B Antraceno				
Intercepción	1	0,022	210,11	***
T	1	$1 \cdot 10^{-3}$	1,25	n.s
Conc. Tween-80	3	$2 \cdot 10^{-3}$	21,37	***
T x Conc. Tween-80	3	$3 \cdot 10^{-3}$	28,46	***
Error	16	$1 \cdot 10^{-4}$		

* $p < 0,05$; ** $p < 0,01$; *** $p < 0,001$

degradación. Nuestros resultados muestran que a 25 °C, *Pseudomonas* sp. fue la cepa bacteriana más efectiva en la degradación de naftaleno, con una concentración de Tween-80 de 0,015 mM de forma óptima. La capacidad de género *Pseudomonas* sp. (*Pseudomonas fluorescens*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Pseudomonas putida*) para degradar los HAP a temperaturas moderadas, ha sido ampliamente estudiada y descrita por numerosos autores.^{3,4,20} Muchas especies de este género, como *Pseudomonas aeruginosa* son capaces de producir biosurfactantes.^{20,21} Esto explica que *Pseudomonas* sp. sea mucho más eficiente con la menor concentración de Tween-80 0,015 mM que el resto de las cepas utilizadas. A esta temperatura, es importante destacar que la cepa de *Enterobacter* sp. tiene un comportamiento de degradación similar a las cepas de las otras dos especies, confirmando por tanto, resultados de estudios previos^{13,22} que describen que la cepa de *Enterobacter* sp. es capaz de degradar naftaleno, fenantreno y antraceno tanto o más eficientemente que *Pseudomonas* sp. y *Stenotrophomonas* sp.

Conclusiones

En ocasiones se sugiere que las tasas de biodegradación son muy altas cuando en el medio contaminado se inocula un consorcio degradador natural extraído de un suelo permanentemente contaminado, en lugar de cepas independientes. Sin embargo y de acuerdo con los resultados aquí presentados, la biodegradación no se ve favorecida cuando el consorcio se forma artificialmente a partir de cepas procedentes de un suelo contaminado (Figura 2). De acuerdo con estos resultados y apoyándonos en publicaciones previas,²³ es posible que la asociación de especies, haya generado relaciones de competencia entre ellas, afectando negativamente a las tasas de biodegradación.

A la vista de los resultados obtenidos se puede concluir que *Pseudomonas* sp., *Enterobacter* sp. y *Stenotrophomonas* sp., cepas utilizadas en este trabajo, tienen una capacidad degradadora de naftaleno, fenantreno y antraceno eficiente a 15 y 25 °C. Sin embargo, a 25 °C la constante de degradación biótica fue mayor, independientemente de la concentración de Tween-80. Es importante destacar que *Stenotrophomonas* sp. fue el género que mostró una mayor tasa de degradación cuando el proceso de biodegradación se desarrolló a 15 °C, por lo que su actividad podría ser apropiada en el medio ambiente con temperaturas por debajo del rango óptimo. Además en este trabajo se confirma de nuevo la capacidad del género *Enterobacter* sp., perteneciente habitualmente a la flora intestinal en el tracto digestivo de los mamíferos, para degradar los HAP.

Bibliografía

1. I. S. Kim, J. S. Park, K. W. Kim, *Appl. Geochem.* **2001**, *16*, 1419–1428.
2. D. J. Luning Prak, P. H. Pritchard, *Water Res.* **2002**, *36*, 3463–3472.
3. S. Boochan, M. L. Britz, G. A. Stanley *Biotechn. Bioengin.* **1998**, *59*, 482–494.
4. D. Jin, J. Xia, J. Xin, Z. Ou, *J. Hazard. Mater.* **2007**, *144*, 215–221.
5. S. Laha, R. G. Luthy, *Biotechn. Bioengin.* **1992**, *40*, 1367–1380.
6. W. Mohn, R. G. Stewart, *Soil Biol. Biochem.* **2000**, *32*, 1161–1172.
7. M. Ericksson, K. Jong, W. Mohn, *Appl. Environ. Microbiol.* **2001**, *67*, 5107–5112.
8. W. Ulric, H. J. Rehm, G. Reed, A. Pühler, P. Stadler, *Biotechnology: Environmental Process II*, Wiley-VCH, **2000**, Vol. 11 b, 5–42.
9. Y. Prabhu, P. S. Phale, *Appl. Microbiol. Biotechn.* **2003**, *61*, 342–351.
10. C. D. Miller, K. Hall, Y. N. Liang, K. Nieman, D. Sorensen, B. Issa, A. J. Anderson, R. C. Sims, *Microbial Ecology* **2004**, *48*, 230–238.
11. Y. Xia, H. Min, G. Rao, J. Liu, Y. F. Ye, X. J. Duan, *Biodegradation* **2005**, *16*, 393–402.
12. A. Chauhan, J. Fazlurrahman, J. G. Oakeshot, R. K. Jain, *Indian J. Microbiol.* **2008**, *48*, 95–113.
13. M. C. Molina, N. González, L. F. Bautista, R. Sanz, R. Simarro, I. Sánchez, L. Sanz, *Biodegradation* **2009**, *20*, 789–800.
14. L. F. Bautista, R. Sanz, M. C. Molina, N. González, D. Sánchez, *International Biodeterioration Biodegradation* **2009**, *63*, 913–922.
15. J. Chen, M. H. Wong, N. Tam, *Marine Pollution Bulletin* **2008**, *57*, 695–702.
16. R. Simarro, N. González, L. F. Bautista, M. C. Molina, *Water Air Soil Pollution* **2012**, *223*, 3437–3444.
17. C. Sartoros, L. Yerushalmi, L. Berón, S. Guiot, *Chemosphere* **2005**, *61*, 1042–1050.
18. F. Volkering, A. M. Breure, J. G. van Andel, W. H. Rulkens, *Appl. Environ. Microbiol.* **1995**, *61*, 1699–1705.
19. Y. Liu, T. Yao, N. Jiao, S. Kang, S. Huang, Q. Li, K. Wang, X. Liu, *Extremophiles* **2009**, *13*, 89–99.
20. M. Dhote, A. Juwarhar, A. Kumar, G. S. Kanade, T. Chakrabarti *World J. Microbiol. Biotechnol.* **2010**, *26*, 329–335.
21. S. Lladó, N. Jiménez, M. Viñas, A. M. Solanas, *Biodegradation* **2009**, *20*, 593–601.
22. F. L. Toledo, C. Calvo, B. Rodelas, J. González-López, *System Appl. Microbiol.* **2006**, *29*, 244–252.
23. N. González, R. Simarro, M. C. Molina, L. F. Bautista, L. Delgado, J.A. Villa, *Bioresource Technol.* **2011**, *102*, 9438–9446.

Bohr: cien años de estados estacionarios

César Tomé-López

Resumen: En julio de 1913 Niels Bohr publicaba el primero de una serie de artículos sobre un nuevo modelo de átomo basado en la hipótesis cuántica. No fue el primer modelo cuántico, como suele creerse, sino una síntesis de ideas dispersas y la introducción de una nueva hipótesis clave que daba sentido a todo: la existencia de distintos estados estacionarios para el electrón dentro del átomo.

Palabras clave: Modelo de Bohr, teoría cuántica, estados estacionarios, espectroscopia, historia.

Abstract: In July 1913 Niels Bohr published the first of a series of articles about a new model of the atom based on the quantum hypothesis. It was not the first quantum model, as it is usually believed, but a synthesis of separate ideas and the introduction of a key new hypothesis that made sense of them all: namely the existence of different stationary states for the electron within the atom.

Keywords: Bohr model, quantum theory, stationary states, spectroscopy, history.

En el número 151 (julio de 1913) del prestigioso *journal Philosophical Magazine* apareció un artículo titulado “On the Constitution of Atoms and Molecules” (Sobre la constitución de átomos y moléculas) remitido por Ernest Rutherford, de Manchester, y firmado por un físico desconocido, Niels Bohr de Copenhague (Figura 1).¹ El autor anunciaba que era el primero de una serie que trataría sobre una teoría de la constitución de átomos y moléculas sobre la base del modelo atómico del profesor Rutherford y el cuanto de acción elemental del profesor Planck. Al final de la introducción aparecía la principal consecuencia práctica de su teoría: “*Se mostrará que es posible desde el punto de vista tomado dar cuenta de una forma sencilla de la ley del espectro lineal del hidrógeno*”.

El modelo atómico de Bohr, del que ahora celebramos el centenario, supuso la introducción de una idea fundamental en el desarrollo y aplicación de la física cuántica. Pero esta idea no fue la aplicación de la teoría cuántica al átomo (Haas, 1910),² ni la explicación de la emisión espectral como debida a transiciones de los electrones (Stark, 1908),³ ni siquiera la determinación de las dimensiones atómicas (el mal llamado radio de Bohr) en función del cuanto de acción (Haas, 1910).

Exploraremos en este artículo los antecedentes en los que se basó Bohr, directa o indirectamente, para adoptar estos aspectos en su modelo. La principal aportación original de Bohr fue admitir la teoría cuántica como única justificación de la existencia de estados estacionarios, y las energías asociadas para

el electrón, y el construir un modelo atómico basado en ellas capaz de explicar las líneas espectrales del hidrógeno.

Entre los antecesores del modelo de Bohr, los gigantes a cuyos hombros se subió, hay algunos muy conocidos, como Thomson o Rutherford y sus colaboradores (Moseley, Geiger, Marsden, Hevesy, Darwin, etc.), que suelen aparecer en los libros de texto, y otros poco o nada conocidos pero que realizaron contribuciones fundamentales a un nivel, digamos, local. Así, tenemos a Stark, Haas, van den Broek, Schidlof, Hasenöhlrl o Nicholson que la necesidad de simplificar y el



C. Tomé-López

Cuaderno de Cultura Científica (UPV/EHU)
C-e: cesar_tome@yahoo.es

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

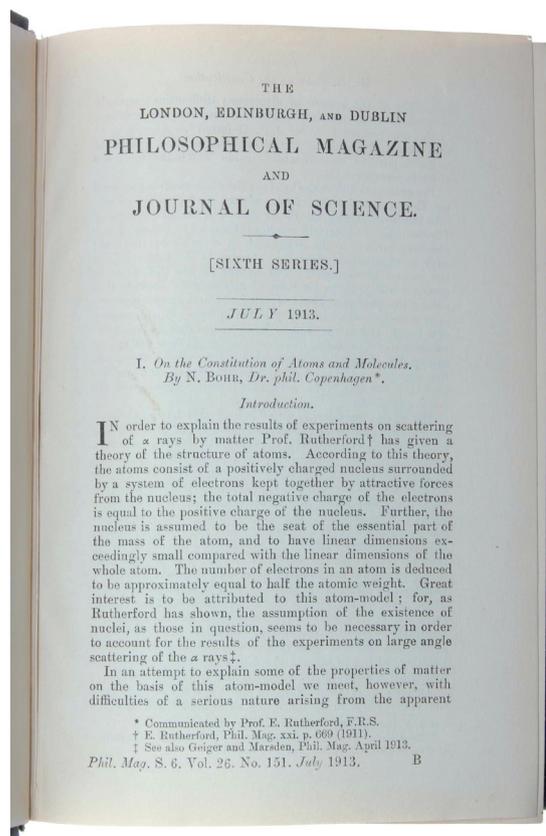


Figura 1. Primera página del artículo de Niels Bohr en 1913.¹

propio éxito del modelo de Bohr han hecho que prácticamente caigan en el olvido. Entre todos ellos hay que destacar a uno cuya influencia permitió, gracias a dos intervenciones públicas en 1911 y a una vasta correspondencia, que toda una generación de físicos cambiase de mentalidad en lo que respecta al papel del cuanto de acción en el futuro de la física y la química y que la comunidad científica estuviese preparada en 1913 para recibir adecuadamente las ideas de Bohr: Arnold Sommerfeld.

1904: El modelo clásico de Thomson

En 1897 el físico J. J. Thomson (Figura 2) descubrió el electrón en una serie de experimentos diseñados para estudiar la naturaleza de las descargas eléctricas en los tubos de rayos catódicos de alto vacío, algo bastante de moda en la época. Thomson interpretó el desvío de los rayos por placas cargadas eléctricamente y por imanes como pruebas de la existencia de “*cuerpos mucho menores que los átomos*” con una relación carga/masa muy grande. Posteriormente terminaría estimando el valor de la carga.



Figura 2. Thomson (1856-1940). Fuente: Wikipedia.

En marzo de 1904 en *Philosophical Magazine* el mismo Thomson proponía un modelo del átomo, no matemático, puramente descriptivo, consistente en una esfera de materia positiva en la que los electrones estarían posicionados por cargas electrostáticas. En palabras del propio Thomson: “...*los átomos de los elementos consisten en un número de corpúsculos electrificados negativamente encerrados en una esfera de electrificación positiva uniforme...*”

En este modelo, los electrones tenían libertad para rotar dentro de la nube de sustancia positiva. Estas órbitas se estabilizaban en el modelo por el hecho de que cuando el electrón se alejaba del centro de la nube positiva existía una mayor fuerza que lo atraía hacia el interior ya que había más material de la carga opuesta dentro de su órbita. Además los electrones podían orbitar en anillos que se veían estabilizados además por las interacciones entre los electrones; los espectros podrían explicarse por las diferencias de energía entre órbitas anulares. Thomson intentó, de hecho, explicar las líneas espectrales más importantes conocidas de algunos elementos con su modelo, pero no obtuvo demasiado éxito.

Los experimentos de 1909 dirigidos por Ernest Rutherford y realizados por Hans Geiger y Ernest Marsden con el bombardeo de partículas alfa de panes de oro probaron que el modelo no encajaba de forma fundamental con la realidad física. Con todo, Gilbert N. Lewis e Irving Langmuir fueron capaces de encontrar una explicación de los enlaces químicos y de las estructuras moleculares usando el modelo de Thomson. No sólo eso, como veremos más adelante, el modelo era suficiente para determinar el valor correcto del radio de Bohr si se combinaba con la hipótesis cuántica.

1908: Stark y el origen de los espectros

Los espectros atómicos, tanto de líneas como de bandas, suponían uno de los grandes retos a los que se enfrentaban los físicos teóricos del finales del XIX y principios del XX. Como acabamos de mencionar, Thomson intentó usar su modelo atómico para explicarlos sin demasiado éxito. Sin embargo, Johannes Stark encontró una posible explicación que, luego veremos, sería la que utilizase Bohr tomada directamente de él.

Johannes Stark era un físico experimental extraordinariamente dotado y con una riquísima imaginación. Lamentablemente no se sentía nada cómodo con las ideas matemáticas que cada vez imperaban más en la física teórica de principios del XX. A pesar de ello, su intuición le decía que la hipótesis cuántica era correcta y en 1907 ya listaba una serie de hechos experimentales que, en su opinión, la apoyaban. Démonos cuenta que esto era completamente inusual para la época. La aplicación del cuanto de acción al efecto fotoeléctrico que había realizado Einstein era sólo una idea osada que no se confirmaría experimentalmente hasta 1914.

En 1908 Stark proponía la “*hipótesis fundamental... de que la acción química directa de la luz consiste en la liberación de los electrones de valencia de su anclaje como resultado, según la ley cuántica, de la absorción de más luz por los electrones de valencia individuales que la cantidad de energía de anclaje de estos electrones de valencia*”. Max von Laue en su “*Historia de la física*” atribuiría esta idea erróneamente a Einstein.⁴

Pero la obsesión de Stark era la estructura atómica. Ya en 1906 había buscado pistas a este respecto en la influencia de los campos eléctricos en las líneas espectrales (esto sería la base para su descubrimiento en 1913 del efecto que lleva su nombre (y por el que, entre otras cosas, recibiría el premio Nobel en 1919). Basándose en el modelo de Thomson, consideraba que los “*electrones internos o anulares*” del átomo eran los responsables de las series espectrales, si bien consideraba que sólo los iones emitían espectros. Su análisis de los espectros de bandas le llevó a la conclusión en 1908 de que, con respecto al átomo, el electrón podría no estar tan sólo en un estado normal (lo que hoy llamaríamos fundamental) o en un estado de separación total, sino que también podría haber separaciones parciales. Sería en la recombinación de estos electrones separados total o parcialmente que se liberaría la energía que correspondería a las líneas espectrales.

Sin embargo, Stark, dado sus limitadas matemáticas, fue incapaz de proporcionar los valores de esas energías de recombinación. Lo que quería demostrar, pero que se quedó en descripción verbal, es que las pérdidas de energía del elec-

trón serían cada vez menores en el camino de vuelta al estado fundamental del electrón. Estas ideas, revisadas en el tomo segundo de su *Prinzipien der Atomdynamik* (1911),⁵ fructificaron en 1913 tras la lectura que hizo Niels Bohr a principios de 1913 de precisamente ese libro.

1910: El modelo cuántico de Haas

Arthur Erich Haas fue el primero en intentar aplicar el cuanto de acción de Planck a la constitución del átomo. En su artículo de febrero de 1910 Haas explicaba:² “*Se examinará el modelo de Thomson del átomo de hidrógeno como un caso especial de resonador óptico [...] El presente estudio intentará ofrecer una interpretación electrodinámica del elemento de acción de Planck. Su objetivo será el desarrollo de una ecuación que relacione la constante h con las magnitudes fundamentales de la teoría electrónica [...]*”.

El objetivo de Haas, como vemos, era relacionar el cuanto de acción con la estructura fundamental del átomo, esto es, derivar la expresión $E = hv$ a partir de principios conocidos. Su idea de partida es que el cuanto de acción es una consecuencia de la estructura atómica. Habría que esperar a Sommerfeld para que esta idea errónea fuese sustituida por la contraria. Con todo, el resultado buscado por Haas no era otro que “[...] *ofrecer la base para una evaluación más exacta del radio del átomo de hidrógeno*”.

A pesar de partir de una hipótesis errónea y del modelo equivocado, Haas tuvo éxito en su objetivo: determinó exactamente el valor de lo que hoy conocemos como radio de Bohr (a). Sin embargo, su tratamiento del problema fue puramente clásico, lo que supuso que el empleo del modelo de Thomson en vez de el de Rutherford no supusiese un problema, ya que, desde un punto de vista de la distribución de la carga positiva, el modelo de Rutherford no es más que un caso particular del de Thomson.

Haas había introducido como hipótesis que, como la energía potencial del electrón en el átomo de hidrógeno era del mismo orden de magnitud que la cantidad hv entonces, *la energía potencial es hv* . Significativamente, el desarrollo de Haas se aplica sólo al estado fundamental del átomo. Por ello obtiene el valor correcto del radio de Bohr, a pesar de no escribirlo explícitamente, ya que su objetivo era obtener h en función de a y no al revés.

A pesar de que no recoge ni la existencia de los estados estacionarios excitados ni las transiciones entre ellos, que son la esencia del modelo de Bohr y los que, combinados con los datos espectroscópicos, llevaron a un éxito que marcó una época, el trabajo de Haas contenía ideas y resultados realmente significativos. Desafortunadamente pasaron casi desapercibidos para los investigadores posteriores a Bohr; pero fueron decisivos en el primer Congreso Solvay en 1911, como veremos más adelante.⁶

1911: La extensión de Schidlof del modelo de Haas a los espectros atómicos

A comienzos de 1911 Arthur Schidlof intentó extender el modelo de Haas a la emisión y a la absorción de la luz. Su intento estaba condenado al fracaso, ya que al no disponer del concepto de estados internos del átomo (la gran contribución

de Bohr) se vio obligado a establecer una relación causal entre la emisión y la absorción de la luz con la absorción y emisión de electrones.⁷ Schidlof consideró la emisión de luz como la absorción de electrones con energía cinética nula y la radiación del incremento en energía potencial. Hoy vemos como evidente que un mecanismo como este no puede incorporarse a un sistema cuántico con éxito.

1911: La estructura cuántica del átomo de Hasenöhl como fuente de las bandas espectrales

Friedrich Hasenöhl estaba en el tribunal que desestimó como ridícula la tesis en la que se incluía la hipótesis de Haas en 1910. Sin embargo, para mediados de 1911 había reconsiderado su posición y llegó a ser el protagonista del intento probablemente más cercano en tener éxito a la hora de explicar los espectros atómicos basándose en un modelo cuántico del átomo, antes de Bohr. Su idea original era muy ambiciosa, nada menos que explicar las leyes empíricas de Deslandres de las bandas espectroscópicas moleculares y la fórmula de Balmer de las series espectrales. Su modelo consistía en considerar un oscilador para describir el comportamiento del átomo en su conjunto. Este oscilador sería un sistema mecanocuántico en el que “...*es mejor mantener la visión de Planck y dividir el espacio de fase en regiones elementales iguales h limitadas por curvas de energía constante*”.⁸

El intento de Hasenöhl podría haber fructificado con un tratamiento sistemático de la cuestión. Al igual que Schidlof, no obtuvo los resultados buscados porque no tuvo la intuición de reconocer las ecuaciones empíricas de Deslandres y Balmer como las diferencias de términos correspondientes a estados atómicos.

1911: El modelo clásico de Rutherford

Como apuntábamos anteriormente, el modelo de Thomson de 1904 incluía una esfera uniforme de una sustancia cargada positivamente en la que un gran número de electrones orbitaba en circunferencias. La disposición geométrica de los electrones en éstas impedían el colapso radiativo. Por otra parte, la estabilidad mecánica implicaba la existencia de restricciones en el número de electrones en los anillos sucesivos. Thomson reconocía en estas restricciones la periodicidad química de los elementos (los elementos sucesivos se diferenciarían por la adición de un electrón). Sin embargo, para 1906 los datos obtenidos de la dispersión de rayos X y β obligaron a Thomson a reducir el número de electrones hasta el número atómico. Pero esta solución tenía un problema asociado: hacía más evidente el colapso radiativo. Además no había suficientes electrones para explicar todas las líneas espectrales en términos de perturbaciones de la configuración normal del átomo. Finalmente Thomson se uniría a Philipp Lenard y, como ya hemos mencionado, a Johannes Stark, al admitir que las distintas series espectrales se emitían durante la recombinación de los electrones en los átomos ionizados.

Si a lo anterior unimos los resultados de Geiger y Marsden sobre la dispersión de las partículas alfa por panes de



Figura 3. Rutherford (1871-1937). Fuente: Wikipedia.

oro, Ernest Rutherford (Figura 3) tenía todos los elementos para concluir que la carga positiva del átomo estaba concentrada en un “núcleo” muy pequeño. Ignorando conscientemente todos los problemas de estabilidad, propuso que los átomos estaban hechos de electrones que orbitaban alrededor del núcleo.

Este modelo, de entrada, atrajo poca atención salvo en los propios círculos de Rutherford en Manchester. A pesar de ello, todo era propicio ya para que se diese el paso de incorporar de tal forma la teoría cuántica a la teoría atómica que permitiese explicar algunos de los extraños datos experimentales que se habían ido acumulando. De hecho, fue en el entorno de Rutherford donde se conseguiría el avance tras varios intentos fracasados. Sólo era necesario llevar la teoría cuántica al centro del escenario y cambiar el enfoque del problema. De preparar el escenario se encargó Walther Nernst, con el apoyo de Planck. Arnold Sommerfeld asumiría el papel protagonista.

1911: La Conferencia Solvay

El hecho de que la teoría cuántica ganase adeptos durante los años 1910 y 1911 y que se convirtiese en un tema habitual en las discusiones de físicos y químico-físicos se debe en no poca medida al trabajo de Nernst. Su papel de dinamizador queda claramente demostrado por la concepción y organización de una reunión internacional sobre el problema cuántico que incluyese a todos los líderes en este campo. Esta reunión, apoyada por Planck y con la financiación del industrial belga Ernest Solvay, se llamaría Primera Conferencia Solvay (Figura 4) y, como años más tarde el quinto (1927), fue un hito en el desarrollo de la física cuántica, tal y como Nernst previó y pretendió.⁶

Un aspecto fundamental de la conferencia fue el sociológico, esto es, convencer a científicos de enorme prestigio e influencia de la importancia y significación de la teoría cuántica. Entre ellos estaba el grupo francés, encabezado por Henri Poincaré. Y fue precisamente en este aspecto en el que Arnold Sommerfeld brilló. Léon Brillouin, por ejemplo, describió la profunda impresión que Sommerfeld causó en los tres teóricos franceses presentes: Poincaré, Marcel Brillouin y Paul Langevin (también estaba presente Marie Curie, experimental): “*Estaban tremendamente impresionados con esta discusión de Sommerfeld... y*



Figura 4. Asistentes a la Primera Conferencia Solvay. Fuente: Wikipedia.

esa fue una de las razones por las que me decidí a ir a Múnich [donde Sommerfeld era profesor]”.

Pero Sommerfeld no sólo convenció. Tras la discusión sobre la aproximaciones de Haas, Schidlof y demás, propuso un cambio conceptual que después resultaría clave para la formación de las ideas de Bohr: la constante h es una constante fundamental, no derivable de las dimensiones del átomo. En sus propias palabras: “*Pero no quiero ir tan lejos como interpretar esta relación entre el cuanto de acción h y el tamaño molecular como el origen propiamente dicho de h , como Haas y probablemente Lorentz se inclinan a hacer... Aparte de la incertidumbre de nuestro conocimiento de las dimensiones moleculares, me parece a mí que un punto de vista como ese no hace justicia a la significación universal de h . Me inclinaria a dar preferencia al punto de vista opuesto: no explicar h sobre la base de las dimensiones moleculares sino más bien ver la existencia de la molécula como función y resultado de la existencia de un cuanto de acción elemental”.*

1912-13: Bohr

Niels Bohr (Figura 5) llegó al laboratorio de Ernest Rutherford en Manchester, procedente de una mala experiencia en Cambridge con Thomson, a mediados de marzo de 1912 y permaneció allí hasta finales de julio de ese año. En este breve lapso de tiempo llegó a convencerse de la valía del modelo planetario del átomo, un modelo que se conocía poco



Figura 5. Bohr (1885-1962). Fuente: Wikipedia.

fuera de Manchester. Pero si se acepta el modelo atómico de Rutherford debe preocuparle su estabilidad. Antes de su partida de Manchester en julio, Bohr ya estaba convencido de que, de alguna manera, la solución estaba en la hipótesis cuántica según la interpretación que Sommerfeld había hecho pública en varios lugares pero, especialmente, en la conferencia Solvay, a la que había asistido Rutherford.

En este punto podría plantearse si el tratamiento de Haas influyó de alguna manera en las ideas de Bohr. De hecho, el trabajo de Haas donde exponía su tratamiento cuántico del átomo de Thomson y en el que daba un valor, para lo que después se llamaría radio de Bohr, apareció referenciado en la bibliografía del artículo de julio de 1913. Bohr en entrevistas posteriores afirmó que no, que había encontrado el artículo de Haas en una búsqueda bibliográfica posterior. En cualquier caso, el trabajo de Haas hizo cambiar las ideas de Sommerfeld y Sommerfeld influyó en todos los presentes en Bruselas, por lo que la influencia, al menos, es indirecta. Bohr no le menciona por su nombre pero sí a la Conferencia Solvay de Bruselas.

Algo que hoy día puede parecernos una obviedad pero que en 1912 no lo era en absoluto, fue otra de las conclusiones a las que llegó Bohr en este periodo: la existencia de un átomo con un sólo electrón más allá del propio modelo, es decir, que existía en la realidad un átomo con un sólo electrón y que este átomo era el de hidrógeno. En 1911 el astrónomo John William Nicholson había propuesto también un modelo de átomo planetario basado en la hipótesis cuántica (Nicholson sí nombra a Sommerfeld) pero para él, por ejemplo, la existencia de un átomo con un sólo electrón era inconcebible por inestable. Bohr fue un paso más allá y desarrolló independientemente la asociación entre número atómico y número de electrones en el átomo. Fue precisamente cotejando sus ideas a finales de 1912 con las de Nicholson, que Bohr llegó a la clave que daría éxito a su modelo: la existencia de estados estacionarios de diferente energía dentro del átomo. En enero de 1913, Bohr ya está en disposición de hacer un resumen de sus ideas para Rutherford, aún a falta del elemento de cierre de su visión del átomo, la guinda del pastel. En resumidas cuentas Bohr decía:

- a. El modelo planetario del átomo es válido
- b. Pueden asignarse modelos de un electrón, dos electrones,... a los distintos elementos
- c. Los fenómenos atómicos son una cosa y los nucleares otra
- d. El recurso a la constante de Planck a la Sommerfeld puede dar estabilidad al sistema
- e. No merece la pena pararse a pensar demasiado por qué la constante de Planck “funciona”.

Hasta aquí todo muy bien, pero el modelo no tenía ligazón experimental. Era una pura elucubración teórica.

Algo ocurrió en febrero de 1913, en Copenhague, que dio sentido a todo. En palabras de Bohr: “*Los espectros eran un problema muy difícil. Había dos escuelas: los de Inglaterra, y la escuela de los espectroscopistas [...] Y yo lo descubrí, ve usted. Otras personas lo sabían, pero yo lo descubrí por mi mismo. Y encontré el espectro del hidrógeno. Estaba leyendo el libro de Stark, y en ese momento sentí que ahora veríamos cómo aparece el espectro [...] tan pronto como vi la fórmula de Balmer todo estuvo claro para mí*”.

Con toda la información en su poder, Bohr derivó la energía de un estado estacionario de forma que explicase el espectro del hidrógeno. Esta fórmula, la última que derivó, es la que abre su artículo de julio de 1913.

Agradecimientos

Mi más sincero agradecimiento al Dr. Bernardo Herradón, editor de esta revista, por su entusiasmo, apoyo y disponibilidad y a D. Daniel Torregrosa por su colaboración y comentarios al manuscrito.

Referencias generales

- A. Herman (trad. C.W. Nash), *The Genesis of Quantum Theory (1899-1913)*, The MIT Press, Cambridge, **1971**.
- S. Seth, *Crafting the Quantum*, The MIT Press, Cambridge, **2010**.
- H. Kragh, *Niels Bohr and the Quantum Atom*, Oxford University Press, Oxford, **2012**.
- J. M. Sánchez-Ron, *Historia de la física cuántica, I*, Crítica, Barcelona, **2001**.
- J. Heilbron, *Nature* **2013**, 498, 27–30
- O. Darrigol, *Studies Hist. Phil. Modern Phys.* **2009**, 40, 151–166.
- J. Mehra, *The Golden Age of Theoretical Physics, vol. 1*, World Scientific Publishing, Singapur, **2001**.
- N. Bohr, *The Theory of Spectra and Atomic Constitution*, Cambridge University Press, Cambridge, **1922**.

Bibliografía

1. N. Bohr, *Philosophical Magazine*, **1913**, 26 (151), 1–25.
2. A. E. Hass, *Sitzungsberichte der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften Wien*, **1910**, Abt. IIa 119, 119–144.
3. J. Stark, *Physicalische Zeitschrift*, **1908**, 9, vol. 9, 86.
4. M. von Laue, *History of Physics*, Academic Press, **1950**.
5. J. Stark, *Prinzipien der Atomdynamik*, Vol 2, S. Hirzel, **1911**.
6. P. Langevin, M. de Broglie (Eds.), *La théorie du rayonnement et les quanta*, Eucken, Paris, **1912** (Conferencia Solvay 1911).
7. A. Schidlof, *Annalen Physik*, **1911**, 35, 93.
8. F. Hasenöhr, *Physicalische Zeitschrift*, **1911**, 12, 933.

La teoría de Ostwald-de Izaguirre sobre adsorción en disolución.

Parte 1. Génesis y presentación de la teoría

Juan M. D. Tascón

Resumen: Se inicia un breve recorrido histórico alrededor de la teoría formulada en 1922 por Wolfgang Ostwald y Ramón de Izaguirre para la adsorción en disolución, examinando las circunstancias en que la misma se gestó. Tras exponer los datos biográficos de los autores anteriores a la elaboración de la teoría, se hace una breve exposición de sus contenidos y se identifican las publicaciones posteriores de los autores en el campo de la adsorción.

Palabras clave: Historia de la química, ciencia de superficies, adsorción, JAE, teoría de Ostwald-de Izaguirre.

Abstract: A brief historical account on the theory proposed in 1922 by Wolfgang Ostwald and Ramón de Izaguirre for adsorption from solution is initiated with an examination of the circumstances under which that work was generated. After providing some biographic data of the authors prior to their formulation of the theory, a concise overview of the theory is presented. This is followed by an identification of further publications from both authors in the field of adsorption.

Keywords: History of chemistry, surface science, adsorption, JAE, Ostwald-de Izaguirre theory.

Introducción

Han transcurrido poco más de 90 años desde la publicación de un artículo¹ de singular relevancia en el campo de la adsorción y la química de superficies en general, uno de cuyos autores fue español. En el presente trabajo haremos un recorrido histórico alrededor de la teoría allí propuesta, comenzando en esta primera parte con una exposición de los antecedentes, tanto científicos como biográficos. Ello va seguido de una presentación de los aspectos esenciales de dicha teoría. En la segunda parte del trabajo añadiremos datos biográficos posteriores a la formulación de la teoría de Ostwald-de Izaguirre y analizaremos el impacto y repercusión de la propia teoría o de partes de la misma.

La aparición de esta teoría tuvo lugar en una época de especial brillantez para la química de superficies (y para la ciencia en general) en la que se recogían los frutos de la inusitada actividad científica que tuvo lugar en las tres últimas décadas del siglo XIX y la primera del XX. En dicho período se produjo una verdadera revolución en el conocimiento del átomo y de la radiación electromagnética a través de descubrimientos tales como los rayos catódicos, el efecto fotoeléctrico, los rayos X, la radiactividad, los principios de la mecánica cuántica o los modelos atómicos de Rutherford y Bohr.



J. M. D. Tascón

Instituto Nacional del Carbón, INCAR-CSIC
Apartado 73, 33080 Oviedo
C-e: tascon@incarcsic.es

Recibido: 01/07/2013. Aceptado: 15/08/2013.

La química de superficies en la segunda década del siglo XX

Ramón y Cajal² identificó en su día determinados períodos en los que se realizan en serie, y como por generación espontánea, grandes progresos científicos, y ponía como ejemplos la época del Renacimiento y los (entonces recientes) descubrimientos del argón, los rayos X y la radiactividad. Más recientemente, Lifshin³ ha señalado que los descubrimientos de aquel intenso período de inicios del siglo XX proporcionaron los fundamentos físicos de la mayoría de los instrumentos y metodologías que utilizamos hoy en día, que tan sólo era necesario implementar y/o perfeccionar. No obstante, esto último aún requirió su tiempo, y un buen ejemplo lo constituye la espectroscopia de fotoelectrones de rayos X (XPS), que hoy nos puede parecer muy actual pero cuyo fundamento, el efecto fotoeléctrico, fue descubierto por Hertz ya en 1887.

La química de superficies no se podía sustraer al efecto beneficioso de aquel torrente de ideas, y la teoría de Langmuir, uno de los grandes hitos en esta rama de la ciencia, está datada de modo preciso en 1918, año en el que Irving Langmuir (1881-1957) publica su famoso trabajo sobre la adsorción de gases en superficies planas de vidrio, mica y platino.⁴ Es bien sabido que Langmuir dedujo su conocida ecuación cinéticamente (posteriormente llegaría la derivación termodinámico-estadística). Poco después vendrían el desarrollo del modelo cinético de Langmuir-Hinshelwood en 1927, la concesión del premio Nóbel de Química a Langmuir en 1932 y la formulación en 1938, como extensión de las hipótesis de su teoría, de la omnipresente ecuación de Brunauer, Emmett y Teller (BET).⁵

Es inevitable en este punto mencionar la ecuación propuesta por Herbert Freundlich (1880-1941), que muchos datan en los años 20, fecha de la publicación de un famoso libro de dicho autor.⁶ Sin embargo, Freundlich utilizaba ya al menos 15 años antes^{7,8} ese tipo de ecuaciones potenciales que tan bien describen la adsorción por los sólidos reales. La ecuación de Freundlich (denostada a menudo en comparación con la de

Langmuir por su origen empírico) se ajusta muy bien a la imperfección de los sólidos reales y es útil, entre otras muchas cosas, para la determinación del área superficial,⁹ que, a fin de cuentas, suele ser la aplicación más buscada de las medidas de adsorción.

Otro hito relacionado con la ciencia de superficies en aquellos años fue la concesión, en un breve margen de tiempo, de dos premios Nobel en el área de la catálisis: el de 1909 a Wilhelm Ostwald (1853-1932) y el de 1918 a Fritz Haber (1868-1934). El primero desarrolló la mayor parte de su labor en la Universidad de Leipzig (Alemania) y, como es bien conocido, su campo de actuación no se limitó a la catálisis sino que cubrió otras áreas de aquello que a partir de él se llamaría química física: equilibrio químico, cinética, electroquímica, etc. Por su parte, Fritz Haber, cuyo nombre ha quedado inevitablemente ligado a la síntesis catalítica del amoníaco, vivió una vida plena de realizaciones, aunque con numerosos altibajos. En 1911 le fue encomendada la dirección de un importante centro de investigación situado en Berlín, el *Kaiser Wilhelm Institut für physikalische Chemie und Elektrochemie*, en el que, durante los años 20, acogió a científicos a quienes, al menos en teoría, concedía completa libertad de líneas de trabajo. Dos de estos científicos directores de sección del Instituto fueron el ya citado Freundlich y otro famoso nombre en la ciencia de superficies, Michael Polanyi (1891-1976), primer autor de apellido húngaro con quien nos topamos y de quien volveremos a hablar porque, entre otras cosas, desarrolló una teoría sobre adsorción en disolución que ha representado una alternativa clásica a la tratada en el presente trabajo.

Para completar la puesta en escena, diremos que la situación científica en España en 1922 pasaba aproximadamente por el ecuador del periodo denominado *Edad de Plata de la Cultura española*.^{10,11} La concesión a Ramón y Cajal del premio Nóbel en 1906 propició la creación, al año siguiente, de la *Junta para Ampliación de Estudios e Investigaciones Científicas* (JAE), en cuyo marco se fundó en 1910 el *Laboratorio de Investigaciones Físicas*.¹² Resulta reconfortante leer algunas bien motivadas resoluciones producidas en dicha época, como aquella¹³ en la que años después se adjudican varios cargos del entonces denominado *Instituto Nacional de Física y Química* a los profesores Enrique Moles, Julio Palacios, Miguel A. Catalán y Julio Guzmán, justificándose sus nombramientos con la publicación (¡en la propia *Gaceta de Madrid*!) de extractos de sus respectivos currículos científicos, en los que se aportan argumentos de calidad muy actuales basados, por ejemplo, en las citas recibidas por sus publicaciones. Una de las políticas de la JAE era promover las estancias de investigadores españoles en centros extranjeros de renombre mediante la concesión de lo que entonces se conocía como pensiones.¹⁴ Una de esas pensiones, concedida al recién doctor Ramón de Izaguirre y Porset a comienzos de 1921, posibilitaría su estancia en Leipzig con Wolfgang Ostwald y, por ende, la publicación al año siguiente del artículo¹ que constituye el *leit motiv* del presente trabajo.

La figura de Wolfgang Ostwald

Para evitar posibles confusiones nos adelantaremos a señalar que el coautor alemán de la publicación no fue el antes aludido Wilhelm Ostwald, sino su hijo, (Carl Wilhelm) Wolfgang Ostwald (1883-1943) (Figura 1). Haciendo un

juego de palabras, podríamos decir que los expertos en ciencia coloidal consideran a Ostwald hijo como uno de los *padres* de esta especialidad, al igual que Ostwald padre lo fue de la química física moderna. Wolfgang Ostwald aparece frecuentemente aludido en la literatura como *Wo. Ostwald* para diferenciarle de su padre (*Wi. Ostwald*), con quien comparte no sólo apellido e inicial del nombre, sino también centro de trabajo, ya que ambos profesaron en la Universidad de Leipzig. De hecho, en el año de publicación del artículo aquí objeto de análisis *Wi. Ostwald* llevaba ya oficialmente jubilado 16 años, aunque había seguido activo en ciencia; precisamente en 1922 cesa como editor del *Zeitschrift für physikalische Chemie*¹⁵ que él mismo había fundado 35 años antes con sus colegas Svante August Arrhenius y Jacobus Henricus van't Hoff.



Figura 1. Retrato de Wolfgang Ostwald (reproducida de la ref. 21, con permiso de *American Chemical Society*).

Existió una vinculación española con aquel centro previa a la estancia en el mismo de R. de Izaguirre, ya que su director de tesis, Enrique Moles, había estado pensionado en 1909-10 por la JAE^{16,17} en Leipzig, trabajando en el laboratorio fundado por *Wi. Ostwald* sobre la solubilidad de gases en disoluciones acuosas de glicerina y ácido isobutírico.¹⁸

La gran labor desarrollada por *Wo. Ostwald* en química de superficies hace que no necesite mucha presentación, sobre todo para los especialistas en coloides. Pero se hace necesario aportar algunos datos para diferenciarle claramente de *Wi. Ostwald*, figura abrumadora por el peso y la calidad de sus realizaciones. Nacido, como su padre, en Riga, ciudad que entonces (1883) formaba parte del Imperio Ruso, recibió su educación en Leipzig, a donde *Wi. Ostwald* se había trasladado como profesor en 1886. El ambiente científico en que se desarrolló su infancia y juventud propició desde muy pronto su interés por la ciencia, habiendo publicado su primer artículo¹⁹ a la tempranísima edad de 15 años.

Tras graduarse en zoología en Leipzig, *Wo. Ostwald* realizó un postdoctorado en Berkeley (1904-06), donde trabajó en el campo de la fisiología animal. Se considera²⁰ que su evolución hacia el campo de los coloides se produjo en Berkeley, y que ello se materializó a su vuelta a Leipzig en 1906; de hecho, ese mismo año inicia su larga andadura editorial al frente del *Zeitschrift für Chemie und Industrie der Kolloide*. Por tanto, y aunque en la esfera familiar pudiese

recibir mucha formación químico-física, el joven Ostwald debió llegar a la ciencia de los coloides desde el ámbito de la biología animal. Quizá ello propiciase el que, tal como su biógrafo Ernst A. Hauser puntualizó en su día,²¹ el campo que cultivó Wo. Ostwald no fue precisamente el de la química física coloidal, ni tan siquiera el de la química coloidal, sino el de la *ciencia coloidal*, disciplina más amplia que abarca las implicaciones de este estado de la materia en otros campos, en particular el de las ciencias de la vida. Este concepto fue acuñado por Ostwald en su conocido libro²² sobre lo que él denominó *El mundo de las dimensiones despreciables*. Es interesante observar cómo, casi un siglo después, permanece vivo el concepto de la ciencia coloidal como ciencia transversal que constituye un punto de encuentro de la física, la química, la biología y la tecnología.²³ También permanecen inmutables los límites que Wo. Ostwald fijó en su día para el dominio coloidal (1-100 nm), devenidos actualmente en límites del dominio de la nanociencia, a la que, quizá por esa razón, algunos autores²⁴ consideran no como una ciencia nueva sino simplemente como una etapa más de un continuo en la historia de la ciencia, anclada en aquella ciencia coloidal desarrollada de modo independiente por Wo. Ostwald y Richard Zsigmondy.

El 8 de abril de 1924, el diario *ABC* anunciaba un ciclo de 5 conferencias de Wo. Ostwald sobre varios aspectos de la ciencia de los coloides (tanto de tipo fundamental como aplicada a alimentos), que se iniciaban aquel mismo día y se impartirían a lo largo de casi todo un mes en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Madrid. Poco antes (27 de enero de 1924), el mismo periódico había publicado una reseña sobre una conferencia impartida por R. de Izaguirre en el Colegio de Farmacéuticos de Madrid sobre *Temas de coloide-química*. Por la proximidad de fechas parece que la de R. de Izaguirre serviría como introducción al ciclo de conferencias de Wo. Ostwald.

Glick²⁵ ha mencionado las disertaciones de Wo. Ostwald en 1925 (sic) en el marco de una serie de frecuentes encuentros, a mediados de los años 20, de la comunidad científica española con científicos extranjeros del calibre más elevado, particularmente alemanes e italianos; disertaciones que, en palabras de dicho autor, “se sumaron simplemente a la recientemente adquirida pátina de respetabilidad científica internacional, por medio de la cual Madrid y Barcelona se habían convertido en paradas del circuito internacional de conferencias”. Debieron ser varias las visitas de Wo. Ostwald a nuestro país, porque Oesper,²⁰ en su semblanza biográfica de este investigador, coloca a España en primer lugar en la lista de países a los que repetidamente viajó en su afán de sembrar conocimientos sobre la ciencia coloidal.

Ramón de Izaguirre. Datos biográficos anteriores a 1922

S. Arribas²⁶ aporta varios datos sobre la vida de R. de Izaguirre, ilustrados con una fotografía equivalente a la que presentamos en la Figura 2 [tomada de la orla de la promoción de 1940 de la Facultad de Ciencias (Sección de Químicas) de la Universidad de Oviedo]. Según dicho autor, R. de Izaguirre se licenció en la Universidad de Oviedo, hizo su doctorado en Madrid con E. Moles y fue director de la fábrica de amoníaco

sintético de la Sociedad Ibérica del Nitrógeno en Langreo (Asturias). El que hiciera los estudios de licenciatura en química en la Universidad de Oviedo es verosímil aunque algo ajustado en el tiempo, ya que se incorporó al doctorado en Madrid en el curso 1918-19 (ver párrafo siguiente) mientras que los estudios de licenciatura en la Sección de Químicas no fueron creados como tales en Oviedo hasta 1913,²⁷ tras la restauración en 1895 de la Facultad de Ciencias (Sección de Físico-Matemáticas).^{28,29} En cualquier caso, en el prólogo a su discurso de apertura del curso 1940-41 de la misma Universidad,³⁰ R. de Izaguirre afirma haber sido alumno, primero del Instituto Nacional, y después de la propia Universidad (que en aquella época compartían el edificio histórico de la calle San Francisco de Oviedo), lo que no nos deja lugar a dudas sobre cuál fue su *alma mater*.



Figura 2. Fotografía de Ramón de Izaguirre, tomada de la orla de la promoción de 1940 de la Facultad de Ciencias (Sección de Químicas) de la Universidad de Oviedo.

Las Memorias de la JAE arrojan datos sobre la etapa de R. de Izaguirre como doctorando en Madrid, desarrollada en el *Laboratorio de Investigaciones Físicas* antes aludido, que dirigía Blas Cabrera y Felipe (1878-1945) y cuya Sección de Química Física estaba a cargo de Enrique Moles y Ormella (1883-1953). En los años que nos competen (alrededor de 1920), este laboratorio estaba situado en el entonces denominado *Palacio de la Industria y Bellas Artes*, amplio edificio del paseo de la Castellana hoy compartido por el Museo Nacional de Ciencias Naturales y la ETS de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid;¹² y allí debió permanecer hasta su traslado en 1932, con el nuevo nombre de *Instituto Nacional de Física y Química*, al llamante *edificio Rockefeller* (hoy sede del Instituto de Química Física “Rocasolano” del CSIC). La memoria correspondiente a 1918-1919 indica³¹ que R. de Izaguirre inició su labor en Madrid participando en lo que se denominaban Prácticas de Químico-Física, así como en las de Electroanálisis y Electroquímica y el inicio de un trabajo de investigación sobre complejos cianurados mediante medidas fisicoquímicas que arrojaban información sobre los equilibrios químicos y complejos formados en función de la temperatura. La siguiente Memoria de la JAE, correspondiente a 1920-21,³² ya indica que dicho trabajo había sido completado y presentado por su autor como tesis de doctorado en la Facultad de Ciencias

(huelga decir que de la Universidad Central, única facultada en aquellos años para otorgar grados de doctor en España).

Los resultados de la tesis de R. de Izaguirre fueron publicados en los *Anales de la Sociedad Española de Física y Química* (en adelante, *Anales*), en un extenso artículo³³ de 61 páginas. El objetivo era poner orden en el estado de conocimientos entonces disponible sobre los compuestos cianurados de Cu(II), ya que si bien los compuestos equivalentes de Cu(I) estaban bien caracterizados, en el caso de Cu(II) la literatura mostraba datos escasos y contradictorios. En el planteamiento del trabajo se expone con meridiana claridad la necesidad de estudiar este tipo de compuestos (inestables y/o lábiles) por métodos fisicoquímicos y no simplemente químicos debido a la multiplicidad de posibles equilibrios y las consiguientes variaciones de composición. También fueron múltiples las técnicas fisicoquímicas utilizadas en aquel trabajo: crioscopías, medidas de potenciales, puntos de congelación, densidades, viscosidades, calores de reacción, coeficientes de temperatura de la conductividad y efectos de la temperatura sobre los puntos de congelación y los potenciales. Las conclusiones, también muy claramente expuestas, apuntan a la importancia de utilizar reactivos muy puros, mostrando que parte del estado de confusión anterior era debido a que se habían utilizado mezclas de varios productos en lugar de las tres especies identificadas en ese trabajo: $K_2[Cu(CN)_4]$, $CuK_2[Cu_2(CN)_8]$ y $Cu[Cu(CN)_4]$. El artículo va firmado por E. Moles y R. de Izaguirre con fecha de diciembre de 1920, y su tema se aparta bastante de las demás líneas de trabajo del grupo investigador de Moles.¹⁶ De hecho, las numerosas relaciones de publicaciones, tanto del propio Moles^{16,34} como del *Laboratorio de Investigaciones Físicas*,³⁵ contienen un único trabajo publicado conjuntamente por ambos autores, que es el antes aludido. De igual modo, el tema de trabajo postdoctoral de R. de Izaguirre tanto en Alemania como a su vuelta a Madrid se aleja de las líneas típicas de su maestro, quien probablemente quiso encomendarle el desarrollo de una nueva línea de trabajo sobre química de superficies y coloides en el *Laboratorio de Investigaciones Físicas*.

La tesis de R. de Izaguirre obtuvo el premio extraordinario del grado de doctor, tal como lo recoge una reseña publicada en *ABC* el 2 de octubre de 1921, de acuerdo con la cual el día anterior habían sido entregados por Alfonso XIII una serie de premios de doctorado concedidos, entre otros, a E. Moles (Sección de Ciencias Químicas) y a R. de Izaguirre (Sección de Ciencias Naturales). Esa sorprendente concesión simultánea a maestro y discípulo de premios del mismo nivel se justifica porque en el caso de E. Moles se trataba del cuarto doctorado que conseguía, éste en Ciencias Químicas por la Universidad Central (1920); los anteriores¹⁶ lo eran en Farmacia, Universidad Central (1906); Ciencias Químicas, Universidad de Leipzig (2010);^{36,37} y Ciencias Físicas, Universidad de Ginebra (1916).³⁸ No nos resistimos a indicar, aun saliéndonos del tema, que en aquella misma reseña de premiados por la Universidad Central aparecen otros nombres ilustres: Manuel Lora Tamayo (a quien se concedía el premio de la Fundación docente Rodríguez Cala a favor de la Facultad de Ciencias), y Joaquín Garrigues y Díaz-Cañabate (entonces ganador del premio extraordinario de licenciatura en la Facultad de Derecho).

A comienzos de 1921, la JAE concede a R. de Izaguirre una pensión para el extranjero que comenzaría a disfrutar el día 28 de marzo de 1921.³⁹ Las proliferas memorias de la JAE constituyen una valiosa fuente de información sobre la actividad de R. de Izaguirre en Leipzig, pero antes merece la pena pararnos un momento a reflexionar sobre el bagaje científico que el joven doctor debía aportar, ya que en el plazo de sólo un año aparece publicada la teoría generalizada sobre la adsorción en disolución.¹ Pues bien, R. de Izaguirre aportaría experiencia en una amplia serie de métodos experimentales de investigación fisicoquímica así como detallados conocimientos sobre equilibrios de formación de complejos de coordinación y reacciones redox; pero nada en la extensa publicación derivada de su tesis³³ sugiere que el nuevo doctor poseyera formación específica en el campo de la adsorción. Lo que sí es muy probable es que aportara una sólida formación metodológica adquirida en aquel ejemplar *Laboratorio de Investigaciones Físicas*.

Volviendo a Wo. Ostwald, un repaso de sus publicaciones anteriores a esa fecha muestra que tampoco él poseía un amplio currículum previo en el campo de la adsorción: su primera publicación en este campo (concretamente, sobre electroadsorción)⁴⁰ aparece precisamente en 1922. Todas sus publicaciones anteriores versaban sobre biología animal o sobre coloides, por lo que resulta sorprendente la elaboración, en tan poco tiempo, de una teoría generalizada y con una razonable repercusión posterior (siendo, de hecho, el quinto artículo más citado de Wo. Ostwald de su producción de más de 200 artículos).

La teoría de Ostwald-de Izaguirre

El artículo aquí objeto de interés¹ fue publicado en *Kolloid Zeitschrift*, revista así denominada entre 1913 y 1961, habiendo cambiado de nombre a lo largo de la historia casi tantas veces como nuestros *Anales*. Así, desde su fundación en 1906 (por Wo. Ostwald, como antes dijimos) hasta 1913 se la había denominado *Zeitschrift für Chemie und Industrie der Kolloide*. Muy posteriormente, de 1962 a 1973, el nombre cambió a *Kolloid-Zeitschrift & Zeitschrift für Polymere*. Y, desde 1974 hasta la actualidad, se trata de la conocida revista *Colloid & Polymer Science*.

El artículo parte de una clasificación de las curvas experimentales de adsorción, según sus formas, en los ocho tipos que se presentan en la Figura 3. En todos los casos se representa la diferencia de concentraciones entre la disolución original y la de equilibrio frente a esta última. Se considera como *normal* el tipo de isoterma descrito con el número 1 (correspondiente, por ejemplo, a la adsorción sobre carbón de ácidos orgánicos en disoluciones acuosas diluidas), del que el tipo 2 sería un caso particular correspondiente a la zona de validez de la ley de Henry. Los demás tipos se consideran como anómalos. Los tipos 3 y 4 difieren entre sí en la curvatura convexa hacia el eje de abscisas mostrado por el tipo 4. Los 5 y 6 se caracterizan por el corte con el eje de abscisas y la prolongación hacia una zona de adsorción *negativa*, que en el caso de la curva tipo 7 muestra una posterior tendencia ascendente, mientras que el tipo 8 es lineal y con adsorciones *negativas* en todo el intervalo de concentraciones.

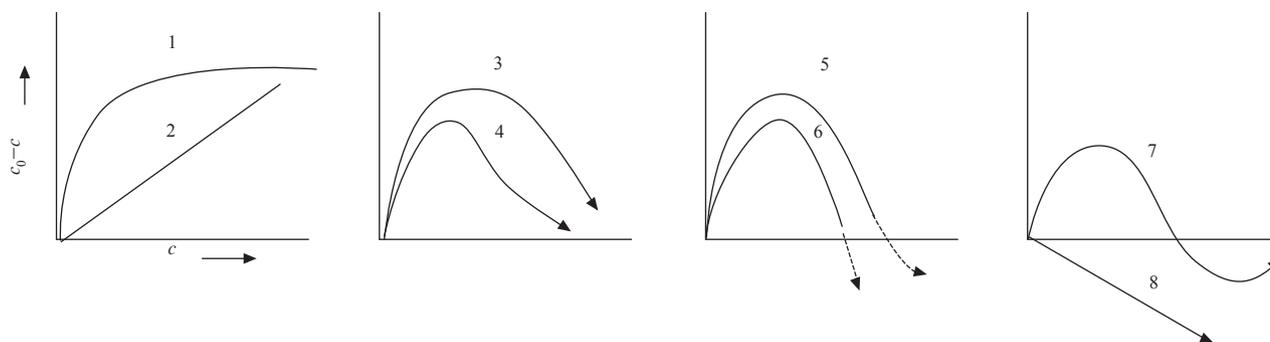


Figura 3. Los ocho tipos de isothermas de adsorción en disolución identificados por Ostwald y de Izaguirre (adaptada de la ref. 1).

Este inicio del artículo guarda un curioso paralelismo con el planteamiento de otro artículo que 18 años más tarde conduciría a la más famosa clasificación de isothermas de adsorción de gases en sólidos, la de Brunauer, Deming, Deming y Teller (BDDT)⁴¹. En ambos casos, los autores identifican de manera muy breve y esquemática las formas de las isothermas e indican ejemplos de sistemas reales en los que cada una de ellas se da. Ambos trabajos han dado lugar a clasificaciones de isothermas con larga pervivencia, y sin, embargo, la parte dedicada a la clasificación es muy breve, mientras que el grueso de ambos artículos está en el desarrollo de ecuaciones aplicables a un conjunto lo más amplio posible de situaciones (en suma, el concepto de teoría).

En la siguiente sección del artículo, Ostwald y de Izaguirre analizan las ecuaciones matemáticas que habían sido propuestas con anterioridad para describir estas curvas. Los autores señalan como propósito el no limitarse a elaborar un mero listado de las mismas, sino realizar un estudio crítico de las ecuaciones existentes. Parten de una ecuación propuesta por Boedecker en 1859, que en esencia no es otra cosa que la después conocida como ecuación de Freundlich, y describen el desarrollo posterior de relaciones cuantitativas entre cantidad adsorbida y concentración, considerando tres factores principales: el efecto de la masa de adsorbente, el comportamiento para concentraciones muy elevadas de soluto y la adsorción simultánea del disolvente.*

Tras la exposición de antecedentes viene lo que es quizá la aportación más original de Ostwald y de Izaguirre: su hipótesis de considerar que, cuando un adsorbente se pone en contacto con una disolución, una parte de la propia disolución se fijará en la superficie del adsorbato. Ello excluye la adsorción *seca* y exclusiva del soluto (que era lo que consideraban hasta entonces la mayoría de los investigadores). Los autores llegan a proponer que se hable de adsorción *de* disolución en lugar del término habitual de adsorción *en* disolución. La disolución que se encuentra en estado adsorbido tendrá una concentración diferente de la del resto del líquido, por lo que la teoría desarrollada presenta la adsorción como un proceso de separación de

* En mezclas de dos líquidos completamente miscibles y con un intervalo amplio de proporciones relativas puede tener poco sentido hablar de soluto y disolvente. Utilizaremos esta terminología por compromiso con lo establecido en la bibliografía relativa a este tema, donde se denomina soluto al que inicialmente se encuentra en menor concentración.

la disolución en dos *capas* líquidas, aunque los autores no se pronuncian en cuanto a si se las puede considerar o no como dos fases distintas en el sentido estrictamente termodinámico.

Ostwald y de Izaguirre proponen dos métodos diferentes para establecer relaciones cuantitativas para la *separación en dos capas* de la disolución que se pone en contacto con un adsorbente. Comienzan presentando el método que consideran más sencillo e intuitivo, aunque menos riguroso, consistente en ensayar de modo sistemático series de números ficticios que conduzcan a los tipos de curvas indicados en la Figura 3. Los autores llegan a una serie de curvas hipotéticas que se presentan en la Figura 4, que utiliza las mismas coordenadas que la Figura 3. El tipo I correspondería al caso en que no se adsorbiese nada de disolvente, sino tan solo el soluto, y ello siguiendo una función logarítmica. La cantidad adsorbida, medida como diferencia entre las concentraciones inicial y de equilibrio, pasa por un máximo a concentraciones intermedias, disminuyendo para llegar a cero a la máxima concentración. En los tipos del II en adelante se suponen cantidades crecientes de disolvente adsorbidas, con lo que van apareciendo tramos en la zona negativa respecto al eje de ordenadas. El tipo V, con un máximo y un mínimo bien definidos, se correspondería con el tipo 7 de la Figura 3. Finalmente, en el tipo VI es la adsorción del disolvente la que domina el proceso.

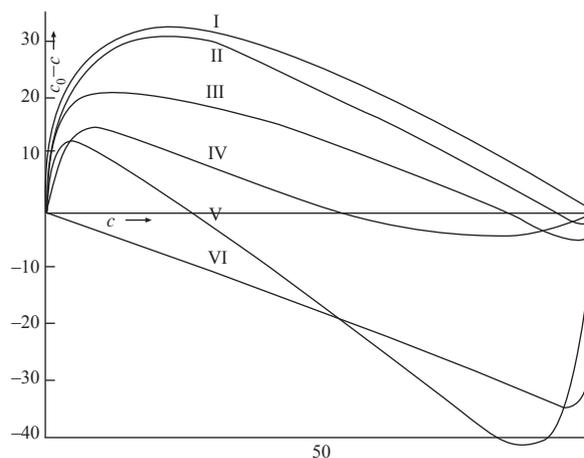


Figura 4. Isothermas hipotéticas obtenidas por cálculo mediante series numéricas (tipos I-VI: ver texto) (adaptada de la ref. 1).

De esta parte del trabajo, los autores deducen que mediane las series de números ficticios se pueden construir todos los tipos experimentales de isothermas sin más que suponer que la adsorción tanto del soluto como del disolvente sigue una función logarítmica. También concluyen que el tipo normal de curva será el de una *S* tendida sobre el eje de abscisas (por ejemplo, los tipos II al V de la Figura 4); que, aun en ausencia de adsorción del disolvente, aparecerá un máximo simplemente por razones aritméticas, y que se observarán adsorciones *negativas* sólo en el caso de adsorción simultánea del disolvente. Por último, indican que la diferencia entre las concentraciones inicial y de equilibrio sólo proporciona una medida fiable de la cantidad de soluto adsorbido en casos realmente extremos (bajas concentraciones, adsorción del disolvente despreciable).

Como alternativa al anterior, el método riguroso seguido por Ostwald y de Izaguirre para establecer relaciones cuantitativas en adsorción fue la deducción racional de las ecuaciones que rigen este fenómeno. Partiendo de considerar el caso sencillo de que (i) únicamente se adsorba la sustancia disuelta, los autores van añadiendo un grado creciente de complejidad suponiendo (ii) la adsorción directa de una cierta cantidad del disolvente, o bien (iii) que este último sea arrastrado por solvatación del soluto, o (iv) que se dé una combinación de los dos últimos fenómenos, o finalmente (v) que sólo se adsorba el disolvente y no la sustancia disuelta. Los autores van deduciendo las ecuaciones correspondientes a cada uno de estos cinco casos, que son, respectivamente, las que se presentan a continuación como ecuaciones (1) a (5):

$$\frac{N}{m}(c_0 - c) = k c^n (100 - c) \quad (1)$$

$$\frac{N}{m}(c_0 - c) = k c^n (100 - c) - l(100 - c)^\alpha c \quad (2)$$

$$\frac{N}{m}(c_0 - c) = k c^n \left[100 - c \left(1 + s(100 - c)^\beta \right) \right] \quad (3)$$

(4)

$$\frac{N}{m}(c_0 - c) = k c^n \left[100 - c \left(1 + s(100 - c)^\beta \right) \right] - l(100 - c)^\alpha c \quad (5)$$

$$\frac{N}{m}(c_0 - c) = -l(100 - c)^\alpha c \quad (5)$$

donde *N*: masa inicial de disolución; *m*: masa de adsorbente; *c*₀: concentración inicial; *c*: concentración de equilibrio; *k*, *n*, *l*, *s*, *α*, *β*: constantes. De estas ecuaciones ha pervivido especialmente la (2), con el nombre de *ecuación de Ostwald-de Izaguirre*, como más adelante veremos.

Finalmente, los autores comprueban el cumplimiento de estas ecuaciones aplicándolas al ajuste de tres conjuntos de datos experimentales fiables y que cubriesen amplios intervalos de concentración: carbón-ácido acético-agua (datos de Schmidt-Walter), carbón-ácido acético-agua (datos de Williams) y carbón-fenol-etanol (datos de Gustafson). En los tres casos se conocía la existencia de

adsorción parcial del disolvente, por lo que las ecuaciones aplicables serían las (2), (3) y eventualmente la (4). El resultado es que se encuentran buenos ajustes a la ecuación (2) para el sistema carbón-ácido acético-agua en todo el intervalo de concentraciones para los datos de Schmidt-Walter, y en un intervalo más estrecho (entre el 2 y el 90% de ácido acético) para los de Williams. Finalmente, los datos de Gustafson para el sistema carbón-fenol-etanol se ajustaron a la misma ecuación, aunque con irregularidades atribuidas por los autores a la menor *calidad* de los resultados experimentales utilizados.

A modo de compendio, la teoría desarrollada por Ostwald y de Izaguirre para la adsorción a partir de disoluciones se resume en los siguientes puntos:

1. Se identifican y agrupan en clases los tipos principales de curvas experimentales (primera clasificación de isothermas de adsorción).
2. Se propone la adsorción como un proceso de separación en dos disoluciones, una más concentrada (la adsorbida) y otra, la de equilibrio, que queda libre.
3. Se supone que la adsorción de la sustancia disuelta sigue la fórmula logarítmica de Boedecker.
4. Las series de números ficticios, admitiendo la adsorción simultánea del disolvente, reproducen todos los tipos de curvas de adsorción entonces conocidos.
5. Se deducen las ecuaciones (1) a (5) para las relaciones cuantitativas entre concentración en la disolución inicial y concentración de equilibrio, proponiéndose métodos gráficos sencillos para la determinación de las seis constantes que aparecen en las ecuaciones.
6. Se observa que los tres conjuntos de datos experimentales de adsorción analizados se ajustan esencialmente a lo predicho por la ecuación (2).

Otras publicaciones de los mismos autores en el campo de la adsorción

La memoria de la JAE publicada en 1925⁴² es la que más abunda en referencias a R. de Izaguirre. Se explica en bastante detalle su trabajo en Leipzig sobre *coloides y teoría de las soluciones* (sic), que duró algo menos de 18 meses. En dicha memoria se enumeran los trabajos ya publicados y los que se encontraban en preparación, a saber:

- El trabajo aquí objeto de análisis,¹ en el que se desarrolla la teoría generalizada de la adsorción en disolución. Se indica *Leipzig, Physikalische-chemisches Institut der Universität* como dirección común a ambos autores.
- Un trabajo posterior (1924), también firmado conjuntamente con Wo. Ostwald sin especificar ninguna dirección.⁴³ Fue publicado en respuesta a una crítica de Gustaver.⁴⁴ Comentaremos esta polémica al analizar el impacto de la teoría de Ostwald-de Izaguirre.

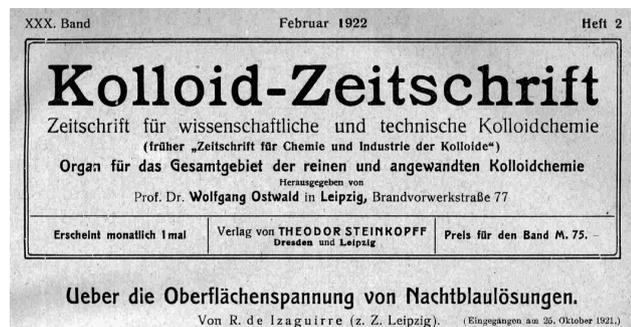


Figura 5. Sello editorial de la revista *Kolloid-Zeitschrift* y encabezamiento de uno de los artículos citados (adaptada de la ref. 45).

Y otros cuatro trabajos firmados por R. de Izaguirre sin coautor:

- Uno publicado en *Kolloid-Zeitschrift* sobre la tensión superficial de las disoluciones de un colorante derivado del trifenilmetano denominado *azul noche*.⁴⁵ Se indica únicamente *Leipzig* como dirección. La Figura 5, que corresponde al encabezamiento de esta publicación, muestra el sello editorial de la revista, que incluye el nombre de su editor, Wo. Ostwald.
- Otro artículo en la misma revista sobre el balance gelatina-ácido clorhídrico.⁴⁶ También figura tan sólo *Leipzig* como dirección.
- Otro más en *Kolloid-Zeitschrift* acerca del efecto del tiempo sobre las características fisicoquímicas de disoluciones de gelatina,⁴⁷ éste firmado en *Madrid*.
- Y uno con título (y contenido) idéntico a este último, en español, publicado en los *Anales*⁴⁸ y firmado sin embargo en *Leipzig, Physikalisch-chemisches Institut*.

En dicha memoria⁴¹ de la JAE no se enumera un trabajo más que hemos encontrado en nuestra búsqueda. Fue publicado en los *Anales*⁴⁹ en 1922, y constituye una mera traducción al español del artículo original sobre la teoría generalizada de la adsorción en disolución, que había sido publicado en alemán en el mismo año.¹ El artículo va firmado por W. Ostwald y R. de Izaguirre en *Leipzig, Physikalisch-chemisches Institut der Universität*.

No tenemos constancia de trabajos posteriores de R. de Izaguirre en el campo concreto de la adsorción, aunque trabajó en el de la química coloidal aplicada a la clarificación de las aguas residuales de los lavaderos de carbón.⁵⁰ Tampoco con posterioridad trabajó mucho Wo. Ostwald sobre adsorción, ya que, entre sus más de 200 artículos,⁵¹ todo lo que publicó en este campo (él solo o con otros autores) se limita a un artículo sobre cálculos con isoterma de forma sigmoidal,⁵² otro sobre anomalías en las isoterma⁵³ y otros dos, muy posteriores, sobre la relación entre adsorción de electrolitos y coeficiente de actividad.^{54,55} Aprovechamos para concluir en este punto la presentación de datos bio/bibliográficos sobre Wo. Ostwald, ya que, al tratarse de una figura razonablemente bien conocida, existen varias reseñas biográficas cuyas fáciles de consultar.^{20,21,50} Además, lo esencial de su filosofía, conceptos y aportaciones ha sido recogido por R. Hidalgo Álvarez en una reciente monografía.²³

Esto es, pues, todo lo que los autores publicarían en el campo de la adsorción una vez formulada su teoría, hecho sorprendente si tenemos en cuenta el considerable impacto de la misma, que examinaremos en la segunda parte de este trabajo.⁵⁶

Conclusiones

La teoría desarrollada por Wolfgang Ostwald y Ramón de Izaguirre en la Universidad de Leipzig (Alemania) para la adsorción en disolución surgió en un momento (segunda década del siglo XX) de particular brillantez para la química de superficies. El conocido papel de la JAE como organismo promotor de la Ciencia en España en aquellos años se ve refrendado una vez más, ya que su patrocinio hizo posible la estancia en Leipzig de Ramón de Izaguirre, y por tanto el desarrollo de la teoría. Sorprendentemente, ninguno de los dos autores parecía aportar experiencia concreta en el campo de la adsorción en la fecha (1922) en la que formularon su teoría. Ésta parte de una sencilla clasificación de isoterma de adsorción de acuerdo con sus formas, y, basándose en una serie de hipótesis deducidas del análisis crítico de los antecedentes, desarrolla una serie de cinco ecuaciones que permiten separar las contribuciones del soluto y el disolvente al fenómeno de adsorción en disolución. Un examen de las publicaciones posteriores de Wo. Ostwald y R. de Izaguirre muestra que su trabajo en este campo se vio interrumpido muy pronto, lo que contrasta con el fuerte impacto que esta teoría ha tenido en el área de la ciencia de superficies.

Agradecimientos

A la Prof. Dra. Krisztina László, de la Universidad de Tecnología y Economía de Budapest, por haber suscitado en el autor el interés en la ecuación de Ostwald-de Izaguirre.

Bibliografía

1. Wo. Ostwald, R. de Izaguirre, *Koll.-Zeits.* **1922**, *30*, 279–306.
2. S. Ramón y Cajal, *Reglas y consejos sobre investigación científica. Los tónicos de la voluntad*, CSIC, Madrid, **2008**, 33–34.
3. E. Lifshin, en: *Concise Encyclopedia of Materials Characterization* (Eds.: R.W. Cahn, E. Lifshin), Pergamon Press, Oxford, **1993**, pp. xix–xxviii.
4. I. Langmuir, *J. Am. Chem. Soc.* **1918**, *40*, 1361–1403.
5. S. Brunauer, P. H. Emmett, E. Teller, *J. Am. Chem. Soc.* **1938**, *60*, 309–319.
6. H. Freundlich, *Colloid and Capillary Chemistry*, E. P. Dutton & Co., New York, **1923**.
7. H. Freundlich, *Z. Phys. Chem.* **1906**, *57*, 385–470.
8. H. Freundlich, W. Neumann, *Z. Phys. Chem.* **1909**, *67*, 538–550.
9. M. A. Martín, J. M. D. Tascón, J. L. García Fierro, J. A. Pajares, L. González Tejuca, *J. Catal.* **1981**, *71*, 201–204.
10. C. Magallón Portolés, *Anales Quím.* **2007**, *107*, 94–101.
11. J. C. Mainer, *La Edad de Plata (1902-1939): ensayo de interpretación de un proceso cultural*, Cátedra, Madrid, **1986**.
12. J. M. Sánchez Ron, en *Física y Química en la Colina de los Chopos. 75 años de investigación en el edificio Rockefeller del CSIC (1932-2007)* (Eds.: C. González Ibáñez, A. Santamaría García), CSIC, Madrid, **2009**, 49–84.
13. Real Orden de 15 de julio de 1930, *Gaceta de Madrid* de 24 de julio.

14. J. Formentín Ibáñez, M. J. Villegas, en *Tiempos de investigación. JAE-CSIC, cien años de ciencia en España* (Ed.: M. A. Puig-Samper Mulero), CSIC, Madrid, **2007**, 95–101.
15. W. Ostwald, *Z. Phys. Chem.* **1922**, *100*, 1–8.
16. R. Berrojo Jario, *Enrique Moles y su obra*, Tesis Doctoral, Facultad de Farmacia, Universidad de Barcelona, **1980**, 17–26.
17. *Junta para Ampliación de Estudios e Investigaciones Científicas. Memoria correspondiente a los años 1910 y 1911*, Madrid, **1912**, 75–76.
18. K. Drucker, E. Moles, *Z. Phys. Chem.* **1910**, *75*, 405–436.
19. W. Ostwald, *Zeitschrift für Naturwissenschaften* **1898**, *72*, 49–86.
20. R. E. Oesper, *J. Chem. Educ.* **1945**, *22*, 263–4.
21. E. A. Hauser, *J. Chem. Educ.* **1955**, *32*, 2–9.
22. W. Ostwald, *Die Welt der vernachlässigten Dimensionen*, Th. Steinkopff, Dresden & Leipzig, **1927**.
23. R. Hidalgo Álvarez, *Discurso para el acto de su recepción como académico numerario en la Academia de Ciencias Matemáticas, Físico-Químicas y Naturales de Granada*, Granada, **2012**.
24. A. Woyke, *Ber. Wissenschaftsgeschichte*, **2008**, *31*, 58–67.
25. T. Glick, *Einstein y los españoles. Ciencia y sociedad en la España de Entreguerras*, CSIC, Madrid, **2005**, 48.
26. S. Arribas Jimeno, *La Facultad de Ciencias de la Universidad de Oviedo (estudio histórico)*, Universidad de Oviedo, Oviedo, **1984**, 31–32.
27. Real Orden de 11 de enero de 1913, *Gaceta de Madrid* de 16 de enero.
28. Real Orden de 9 de julio de 1895, *Gaceta de Madrid* de 20 de julio.
29. F. Canella Secades, *Historia de la Universidad de Oviedo*, 2ª ed., 1903-04. Reproducción facsímil, Servicio de Publicaciones de la Universidad de Oviedo, Oviedo, 1985.
30. R. de Izaguirre Porset, *Discurso leído en la solemne apertura del curso de 1940 a 1941. Universidad de Oviedo*. Imprenta “La Cruz”, Oviedo, **1940**.
31. *Junta para Ampliación de Estudios e Investigaciones Científicas. Memoria correspondiente a los años 1918 y 1919*, Madrid, **1920**, 138, 140 y 142.
32. *Junta para Ampliación de Estudios e Investigaciones Científicas. Memoria correspondiente a los años 1920 y 1921*, Madrid, **1922**, 146, 147 y 149.
33. E. Moles, R. de Izaguirre, *Anales Soc. Esp. Fis. Quím.* **1921**, *19*, 33–93.
34. Lista de publicaciones del Profesor Moles, en: *Enrique Moles: La vida y la obra de un químico español* (Coordinador: A. Pérez-Vitoria), CSIC, Madrid, **1985**, 163–180.
35. Instituto Nacional de Física y Química (folleto inaugural), en: *Física y Química en la Colina de los Chopos. 75 años de investigación en el edificio Rockefeller del CSIC (1932-2007)* (Eds.: C. González Ibáñez, A. Santamaría García), CSIC, Madrid, **2009**, 143–161.
36. F. González de Posada, *Anal. Real Acad. Nac. Farm.* **2005**, *71*, 673–702.
37. Exposición *Enrique Moles: Farmacéutico, químico y artista*, Real Academia Nacional de Farmacia, Madrid, **2005**, 33.
38. J. M. Sánchez Ron, en: *Tiempos de investigación. JAE-CSIC, cien años de ciencia en España* (Ed.: M.A. Puig-Samper Mulero), CSIC, Madrid, **2007**, 103–113.
39. *Junta para Ampliación de Estudios e Investigaciones Científicas. Memoria correspondiente a los años 1920 y 1921*, Madrid, **1922**, 65.
40. W. Ostwald, *Koll.-Zeits.* **1922**, *30*, 254–260.
41. S. Brunauer, L. S. Deming, W. E. Deming, E. Teller, *J. Am. Chem. Soc.* **1940**, *62*, 1723–1732.
42. *Junta para Ampliación de Estudios e Investigaciones Científicas. Memoria correspondiente a los cursos 1922-3 y 1923-4*, Madrid, **1925**, 49, 173, 181, 182, 185–8, 192, 200 y 417.
43. W. Ostwald, R. de Izaguirre, *Koll.-Zeits.* **1923**, *32*, 57–64.
44. B. Gustaver, *Koll.-Zeits.* **1922**, *31*, 358–362.
45. R. de Izaguirre, *Koll.-Zeits.* **1922**, *30*, 81–8.
46. R. de Izaguirre, *Koll.-Zeits.* **1923**, *32*, 47–51.
47. R. de Izaguirre, *Koll.-Zeits.* **1923**, *33*, 337–347.
48. R. de Izaguirre, *Anales Soc. Esp. Fis. Quím.* **1923**, *21*, 330–354.
49. W. Ostwald, R. de Izaguirre, *Anales Soc. Esp. Fis. Quím.* **1922**, *20*, 283–340.
50. R. de Izaguirre, *Anales Real Soc. Esp. Fis. Quím.* **1933**, *31*, 760–775.
51. U. Messow, *Mitteilungen der Wilhelm-Ostwald-Gesellschaft zu Grossbothen e.V.* **2007**, *44*, 9–26.
52. W. Ostwald, H. Schulze, *Koll.-Zeits.* **1925**, *36*, 289–300.
53. W. Ostwald, *Koll.-Zeits.* **1927**, *43*, 268–276.
54. W. Ostwald, *Koll.-Zeits.* **1938**, *87*, 128–149.
55. W. Ostwald, *Koll.-Zeits.* **1938**, *87*, 284–296.
56. J. M. D. Tascón, Parte 2 de este trabajo, enviada para su publicación en *Anales Quím.* **2013**, *109*, núm. 3, 201–208.

La teoría de Ostwald-de Izaguirre sobre adsorción en disolución.

Parte 2. Impacto y repercusiones

Juan M. D. Tascón

Resumen: En este trabajo se completa la presentación desde la perspectiva histórica de la teoría formulada en 1922 por Wolfgang Ostwald y Ramón de Izaguirre para la adsorción en disolución. Tras examinar la biografía de uno de los autores posterior a la formulación de la teoría, se presenta un examen de las repercusiones de la misma, tanto en su conjunto como a través de la clasificación de isothermas de adsorción de una ecuación que describe la adsorción en sólidos de mezclas de líquidos miscibles.

Palabras clave: Historia de la química, ciencia de superficies, adsorción, clasificación de isothermas, ecuación de Ostwald-de Izaguirre.

Abstract: This work completes the historical presentation of the theory proposed in 1922 by Wolfgang Ostwald and Ramón de Izaguirre for adsorption from solution. After examining biographic data for one of the authors following the formulation of the theory, the impact of the latter is examined either as a whole or through a classification of adsorption isotherms or an equation that describes adsorption of mixtures of miscible liquids by solids.

Keywords: History of chemistry, surface science, adsorption, classification of isotherms, Ostwald-de Izaguirre equation.

Introducción

La primera parte de este trabajo¹ se inició presentando el marco histórico y los datos biográficos de Wo. Ostwald y R. de Izaguirre anteriores a la formulación en 1922 de su teoría sobre la adsorción de mezclas de líquidos en superficies sólidas. Una vez expuestos estos antecedentes (favorables desde el punto de vista del estado de desarrollo de la química de superficies, si bien los autores no aportaban demasiada experiencia previa sobre la adsorción), se expusieron los aspectos más esenciales de dicha teoría² y se identificó el resto de las publicaciones de ambos autores en el campo de la adsorción, encontrándonos con una sorprendente escasez de trabajos posteriores de uno y otro autor en dicho campo.

En esta segunda parte desarrollaremos la evolución histórica post-teoría, comenzando con una presentación de los datos biográficos del autor español de la teoría (R. de Izaguirre) posteriores a 1922. A continuación se exponen las repercusiones, tanto de la propia teoría en su conjunto como a través de sus dos herencias principales: una clasificación de isothermas y una ecuación, ambas denominadas, al igual que la teoría, mediante los nombres de los dos investigadores que las desarrollaron.



J. M. D. Tascón

Instituto Nacional del Carbón, INCAR-CSIC
Apartado 73, 33080 Oviedo
C-e: tascon@incar.csic.es

Recibido: 01/07/2013. Aceptado: 15/08/2013.

Ramón de Izaguirre: biografía post-teoría

La Memoria de la *Junta para Ampliación de Estudios e Investigaciones Científicas* (JAE) publicada en 1925³ indica que, desde octubre de 1922 hasta el término de la pensión que disfrutaba, R. de Izaguirre se trasladó de la Universidad de Leipzig al *Kaiser Wilhelm Institut für physikalische Chemie und Elektrochemie* de Berlín-Dahlem, para trabajar bajo la dirección de los profesores F. Haber y H. Freundlich, estudiando el influjo de las absorciones (sic) mediante carbón de sangre, sulfuro de cobre y negro de platino, así como varias reacciones químicas orgánicas (por ejemplo, la transformación de ácido maleico en ácido fumárico). Resulta un tanto sobrecogedora la referencia al carbón de sangre, que, al igual que el de huesos, hoy en día ya sólo aparece mencionado en textos antiguos.⁴ Al mismo tiempo, produce sana envidia imaginar a aquel pensionado eligiendo libremente cambiar de centro (lo que estaba permitido por las normas de la JAE) y terminar su estancia en Alemania en aquel fascinante Berlín de entreguerras, donde uno se debatiría entre vagar por *Alexanderplatz* o trabajar en lo que con el tiempo ha devenido en el hoy archiconocido *Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft*. No hemos detectado ninguna publicación de R. de Izaguirre conjuntamente con Freundlich ni con Haber. En el peor de los casos, parece que la estancia en Alemania estaba ya bien rentabilizada científicamente con las publicaciones generadas en Leipzig, con o sin Wo. Ostwald como coautor.

A su vuelta de Alemania, R. de Izaguirre aparece ya en el organigrama del *Instituto Nacional de Ciencias* en el grupo de directores y encargados de los trabajos organizados por la JAE.³ En el área de Física y Química-Física su nombre aparece entre los *grandes*: B. Cabrera, T. Batuecas, A. del Campo, M. Catalán, R. de Izaguirre, E. Moles, J. Palacios, S. Piña. Más concretamente, figura como auxiliar de E. Moles para las prácticas de Química-Física, Electroquímica y Electroanálisis, y también como único responsable del Curso Práctico de Coloidequímica, inspirado en las enseñanzas que entonces se impartían en Leipzig y del que dice textualmente

la Memoria: “Este cursillo ha constituido uno de los mayores éxitos del laboratorio...”. Parecería que nuestro biografiado se encuentra en un momento álgido de su carrera investigadora. Sin embargo, la siguiente Memoria de la JAE⁵ no hace la menor mención al trabajo investigador desarrollado por R. de Izaguirre, limitándose a consignar la existencia de su pensión (de un montante de 270 pesetas mensuales) “...para proseguir sus estudios sobre coloides en el Laboratorio de Investigaciones Físicas...”, pensión que se interrumpe (sin indicar el motivo) el 31 de julio de 1924.

No volvemos a encontrar datos sobre R. de Izaguirre hasta 1930, cuando, en los que habían pasado a llamarse *Anales de la Real Sociedad Española de Física y Química*, se da cuenta de la constitución⁶ y de las dos primeras sesiones⁷ de la Sección Asturiana* de dicha sociedad, figurando entre los vocales elegidos para la directiva local un tal D. Ramón de Izaguirre (Felguera) (sic). Es el primero de los indicios que, como iremos viendo, apuntan a que su desaparición de las memorias de la JAE a partir del verano de 1924 se debiese a que pasó a trabajar en la Sociedad Ibérica del Nitrógeno, ubicada en La Felguera (Asturias). Ello produciría un corte irreversible en su carrera investigadora aunque no en la docente, ya que en 1934 gana unas oposiciones a cátedra de la Universidad de Oviedo, que desempeñaría hasta su fallecimiento en 1952 simultaneando la enseñanza con la labor industrial.⁸ La bien documentada tesis de R. Berrojo,⁹ que por tratar sobre la figura del Prof. Moles arroja indirectamente algunos datos sobre sus discípulos, recoge los nombres de los miembros del tribunal y de los aprobados en aquellas oposiciones a cuatro cátedras de Química Teórica o Física¹⁰ de las Universidades de Madrid, Granada, Oviedo y Salamanca.

Parece interesante en este punto examinar la inflexión que se produce en la denominación oficial del área de conocimiento en aquellos años. Un cambio sustancial en los planes de estudios producido en 1922¹¹ había incorporado las asignaturas de (i) Química Técnica, (ii) Química Teórica o Química-Física y (iii) Electroquímica a las Secciones de Químicas de las Facultades de Ciencias. En los primeros años de implantación de este plan de estudios, las nuevas asignaturas fueron acumuladas a profesores de materias próximas a ellas. Y en algunas universidades tal orden de cosas debió subsistir hasta la convocatoria (¡once años después, a finales de 1933 en el caso de Oviedo!) de la cátedra conseguida por R. de Izaguirre, ya que, de acuerdo con S. Arribas,¹² nuestro biografiado fue el primer catedrático de Química Teórica y Electroquímica (sic) de aquella Facultad. Resulta paradójico que en aquellos años se denominara como *teórica* en España a una disciplina que había sido cultivada en nuestro país con carácter eminentemente experimental, a diferencia de aquello en lo que ha devenido en las últimas décadas, en que tanto abundan los trabajos de tipo teórico y donde, particularizando al tema de la adsorción y los fenómenos de superficie, son principalmente químicos inorgánicos y algunos ingenieros químicos quienes se ocupan de los trabajos de tipo experimental.

En un análisis de las investigaciones en física y química en España en el período 1898-1936, Vian Ortuño¹³ menciona a R. de Izaguirre como especialista en química coloidal de

sustancias orgánicas en la Universidad de Oviedo. Entre las escasas evidencias sobre su labor en los años de la Segunda República está un trabajo sobre la clarificación de aguas residuales de los lavaderos de carbón utilizando métodos propios de la química coloidal.¹⁴ En 1937 figura como conferenciante en un cursillo de la Universidad de Oviedo impartido en Luarca.¹⁵ En ese mismo año, el gobierno con sede en Burgos le nombra Vicerrector de la Universidad de Oviedo (para asistir a quien meses antes había sido nombrado Rector, S. Álvarez Gendín, ver Figura 1), cargo en el que cesaría en 1941; vemos, pues, que corrió suerte opuesta a la de su mentor E. Moles, despojado de laboratorio y cátedra e incluso enviado a prisión durante años. En 1940, imparte la conferencia de apertura del curso 1940-41 de la Universidad de Oviedo, sobre el tema “Relaciones entre la agricultura y la industria”.¹⁶ En ese mismo año figura como ponente en el “I Curso de Verano de la Universidad de Oviedo” con el tema “Los abonos químicos”, más específicamente relacionado con su puesto como Director de la Sociedad Ibérica del Nitrógeno que, de acuerdo con el programa del curso,¹⁷ compatibilizaba con el de Vicerrector. Finalmente, el catedrático de literatura J. M. Martínez Cachero¹⁸ le ha identificado como uno de los personajes pintorescos del Oviedo de aquellos años caricaturizados en la novela “Cerca de Oviedo” (1945), de F. García Pavón.



Figura 1. Fotografías de profesores tomadas de la orla de la promoción de 1947 de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Oviedo. De arriba abajo y, en cada fila, de izquierda a derecha: Sabino Álvarez Gendín, Enrique Eguren, Lucas Rodríguez Pire, Ramón de Izaguirre, Carlos del Fresno, Antonio Espurz, Siro Arribas, M.ª Rosario Álvarez-Buylla y Francisco Javier Rubio.

* La de Asturias fue la tercera sección territorial en constituirse, después de las de Barcelona y Sevilla.



Figura 2. Fotografía del tramo accesible de la calle Ramón Izaguirre, en Langreo, Asturias (la parte edificada más alta corresponde a la antigua torre de refrigeración de la Sociedad Ibérica del Nitrógeno).

La Facultad de Ciencias de Oviedo contaba en aquellos años 40 con dos catedráticos ex-compañeros de R. de Izaguirre en el doctorado en Madrid: uno de la misma promoción, C. del Fresno¹⁹ (Química Inorgánica) y otro de la siguiente, L. Rodríguez Pire²⁰ (Química Técnica); ambos aparecen fotografiados en la Figura 1, lo mismo que R. de Izaguirre. Con el segundo, incluso había compartido director de tesis; y con el primero traduciría del alemán en 1942 la *Química Física* de A. Eucken,²¹ voluminoso librote que posiblemente muchos estudiantes no se podrían pagar en aquellos difíciles años. Ello pudo contribuir al éxito como alternativa de unos apuntes primorosamente elaborados por una tal Pili Pérez, que constituyeron el *texto oficioso* de Química Física en la Universidad de Oviedo,²² incluso en el amplio período transcurrido desde el fallecimiento de R. de Izaguirre en 1952 hasta la toma de posesión del siguiente catedrático de *Química Física 1º y 2º* y *Electroquímica* (nueva denominación oficial), casi una década después.

A título de curiosidad señalaremos que en el municipio asturiano de Langreo ha quedado para la posteridad una callecita que lleva el nombre de nuestro biografiado (ver Figura 2). La parte transitable de la calle es tan corta (unos 10 metros), que quizá no cabría en ella el nombre completo del homenajeado y por eso aparece en el callejero como Ramón Izaguirre a secas, sin la preposición *de*, que él siempre hizo figurar en sus publicaciones. Situada entre los núcleos de La Felguera y Barros, se trata de una travesía que parte de la antigua carretera general a Oviedo y en unos pocos metros se estrella contra una verja (visible en la fotografía) más allá de la cual se encuentra lo que queda de la fábrica de la Sociedad Ibérica del Nitrógeno o Factoría de Nitrastur, antiguo complejo industrial conocido popularmente como *El Nitrógeno*. Este gran recinto (3,5 hectáreas de superficie), hoy día abandonado, tiene interés para la arqueología industrial porque algunos de sus edificios (en particular, la torre de refrigeración que asoma al fondo de la Figura 2) están considerados entre las mejores muestras del denominado *Movimiento Moderno* en Asturias.²³

Ahora bien, el gran complejo de *El Nitrógeno* fue puesto en funcionamiento en 1953,²⁴ fecha tan próxima a la del fallecimiento de R. de Izaguirre (1952) que sugiere que la dedicatoria de la calle sería un homenaje, quizá póstumo, a quien



Figura 3. Fotografía de los vestigios de la antigua fábrica de la Sociedad Ibérica del Nitrógeno (barrio de Vega, La Felguera, Langreo, Asturias). Fotografía proporcionada por D^a Mónica García Cuetos, del MUSI, Langreo, Asturias.

dirigía la fábrica en las fechas de traslado a su nuevo emplazamiento. Por tanto, para buscar la huella de dónde trabajó R. de Izaguirre habría que ir al lugar donde la fábrica había estado situada anteriormente: el barrio de Vega, en La Felguera, a la vera de la Sociedad Metalúrgica Duro Felguera, donde, en tan sólo unas 146 áreas, se había instalado la Sociedad Ibérica del Nitrógeno para sintetizar amoníaco por el método Claude²⁵ a partir del hidrógeno, subproducto de los hornos de coque de la *Duro*. Tal como señala Aladino Fernández,²⁴ dicha fábrica, que además de amoníaco producía ácido nítrico, ácido sulfúrico y sulfato amónico, fue instalada entre 1923 y 1925. Este período de puesta en funcionamiento coincide con la desaparición de R. de Izaguirre, en el verano de 1924, de la nómina del *Laboratorio de Investigaciones Físicas*. La Figura 3 muestra los últimos vestigios de esa antigua fábrica de la Sociedad Ibérica del Nitrógeno: una pequeña torre de refrigeración, derruida en años muy recientes, y, en segundo plano y pintado en color salmón, el *chalet de los ingenieros*, recién rehabilitado, donde en su día pudo trabajar o residir R. de Izaguirre.

Es inevitable en este punto reconocer las coincidencias entre la labor industrial del biografiado, el descubrimiento por parte de F. Haber de la síntesis del amoníaco y el de Wilhelm Ostwald de la producción de ácido nítrico por oxidación del amoníaco, que propició la producción en masa de fertilizantes por Alemania durante la Primera Guerra Mundial. Es probable que el poseer información de primera mano sobre estas

tecnologías del amoníaco y contactos personales con quienes las habían puesto en marcha propiciase la temprana desaparición de R. de Izaguirre de la escena investigadora por traslado a la actividad industrial.

El impacto de la teoría de Ostwald-de Izaguirre

En este apartado analizaremos las repercusiones de la teoría de Ostwald-de Izaguirre en el campo de la adsorción en disolución. En lugar de examinar de modo exhaustivo las citas recibidas, parece más interesante destacar los reconocimientos explícitos o las referencias sistemáticas a esta teoría o a partes de ella.

Tal como lo anunciamos anteriormente,¹ la primera reacción documentada fue la del investigador sueco B. Gustaver. Publica un artículo en la misma revista y año (*Kolloid-Zeitschrift*, 1922), motivado sin duda *por alusiones*, ya que Ostwald y de Izaguirre no habían sido nada diplomáticos en sus críticas a los resultados e interpretaciones del autor sueco y de otros investigadores reconocidos en aquella época como Gurwitsch²⁶ o Williams.^{27,28} Gustaver²⁹ argumentó, por ejemplo, que Ostwald y de Izaguirre habían elaborado su teoría en base a resultados experimentales ajenos y que las ecuaciones que desarrollaban no eran realmente nuevas, sino variantes de la antes desarrollada por Williams. En respuesta, Ostwald y de Izaguirre publican en 1923 un nuevo artículo³⁰ refutando esas afirmaciones, artículo que tiene un título muy similar al de la publicación original de la teoría, con el que no hay que confundir. Dicha polémica parece haberse resuelto a favor de los investigadores de Leipzig quienes se reafirman en que las ecuaciones desarrolladas por ellos son diferentes de la de Williams, la cual, en disoluciones muy diluidas, predice que la adsorción del soluto no empieza en cero sino en $-\infty$. También argumentan que la adsorción de partículas coloidales no conduce a una monocapa de moléculas sino de micelas, por lo que el espesor de la capa adsorbida debe variar en lugar de ser fijo como pretendía Gustaver.

Cinco años después de ser formulada, la teoría de Ostwald-de Izaguirre ya se ve incluida entre las de tipo *teórico* en la revisión de ecuaciones de adsorción hecha por Swan y Urquhart,³¹ quienes presentan las hipótesis de la teoría que nos concierne sin tomar partido. En 1933, esta teoría es mencionada en un largo estudio de L. de Brouckère,³² como una contribución significativa a considerar los efectos de la adsorción del disolvente, lo que había pasado desapercibido en la mayoría de los trabajos y teorías anteriores.

En los casi 20 años que siguen al último trabajo mencionado, la repercusión de la teoría de Ostwald-de Izaguirre es escasa en cuanto a número de citas recibidas, quizá porque, tal como lo señalan Kipling y Tester,³³ los efectos de la adsorción del disolvente habían caído progresivamente en el olvido durante aquellos años. Pero alrededor de 1950 surge un renovado interés en ese tema, y en un trabajo de revisión sobre adsorción en disolución, el británico Kipling³⁴ califica la teoría de Ostwald-de Izaguirre como “un interesante análisis aritmético”, lo que podría parecer peyorativo, si bien este autor la desarrolla muy pormenorizadamente tanto en lo relativo a hipótesis como presentando la deducción por separado de las cinco ecuaciones fundamentales propuestas por Ostwald y de Izaguirre para describir el proceso de adsorción en función de las proporciones de soluto y disolvente adsorbidas. Por lo prolijo de la descripción

es uno de los mayores reconocimientos explícitos al trabajo aquí objeto de análisis, aunque en un momento dado Kipling expresa la necesidad de desarrollar una nueva aproximación; lo que parece un anuncio de su propuesta, poco después, de utilizar la ecuación de Langmuir reemplazando a la función logarítmica utilizada por Ostwald-de Izaguirre (y poco después por Bartell y Sloan³⁵). Huelga decir que estamos en la época en que la ecuación de Langmuir gozaba de mucho mayor predicamento que la de Freundlich. Kipling y Tester encuentran una gran divergencia entre el uso de ambas ecuaciones, que no pueden justificar,³³ y se limitan a consignar el resultado, sin la menor explicación al mismo (¡en una carta publicada en *Nature!*). En un trabajo posterior más completo³⁶ concluyen que ninguna de ambas ecuaciones es adecuada y proponen recurrir a resultados experimentales de medidas de la adsorción por separado de los vapores del soluto y del disolvente.

En esos mismos años, otro británico, Elton³⁷ propone un cálculo de las isothermas individuales de los dos componentes de la disolución suponiendo que la adsorción de uno de ellos debe estar acompañada forzosamente de la desorción del otro (a diferencia de la adsorción simultánea de ambos componentes, supuesta primero por Ostwald-de Izaguirre y después por Kipling). Esta propuesta parece haber tenido poca repercusión posterior.

También en la transición entre los años 40 y 50, los norteamericanos Hansen y Bartell³⁸ hacen uso circunstancial de una ecuación similar a la de Ostwald-de Izaguirre en su intento de extender a disoluciones líquidas binarias la idea de la adsorción en multicapas propuesta por Brunauer, Emmett y Teller para gases una década antes.³⁹ Es interesante señalar que el propio Bartell, autor de un trabajo de 1929 en el que afirmaba haber desarrollado una ecuación equivalente a la de Ostwald-de Izaguirre (aunque siete años después), y pese a que algunos autores indicarían que el desarrollo de ambas ecuaciones había sido independiente,³⁶ denomina en este trabajo a la ecuación como “de Ostwald-de Izaguirre”; quizá admitiendo que es como se la conocía de modo generalizado en el mundo de la adsorción en disolución.

Poco después, Hansen y Fackler⁴⁰ consideran a la teoría de Ostwald-de Izaguirre como uno de los tres únicos intentos de desarrollar teorías generales para la adsorción en disolución (los otros dos eran el de Polanyi,⁴¹ antes aludido, y el recién mencionado de Kipling y Tester). Curiosamente, califican a la teoría de Ostwald-de Izaguirre de fuertemente empírica cuando años antes había sido clasificada entre las ecuaciones teóricas,³¹ y consideran que Kipling y Tester habían expuesto de modo excelente sus limitaciones. Hansen y Fackler optan por centrar sus esfuerzos en generalizar la teoría de Polanyi de la adsorción en disolución, que su autor había desarrollado partiendo de su propia teoría del potencial de adsorción para gases individuales,⁴² la cual a su vez ganaba reconocimiento en aquellos años tras varias décadas de rechazo.⁴³ Posteriormente, Hansen y Hansen⁴⁴ pasan a criticar el tratamiento de Kipling y Tester (que utilizaba la ecuación de Langmuir, adoptando la hipótesis de Elton:³⁷ la superficie del adsorbente está cubierta en todo momento por una capa monomolecular de adsorbato). A esas alturas ya empezaba a estar claro que la adsorción en sólidos carbonosos no tiene lugar por formación de una monocapa, sino por llenado volumétrico de los microporos, y que podría coincidir la forma de las isothermas, pero no los principios que rigen el fenómeno de adsorción.

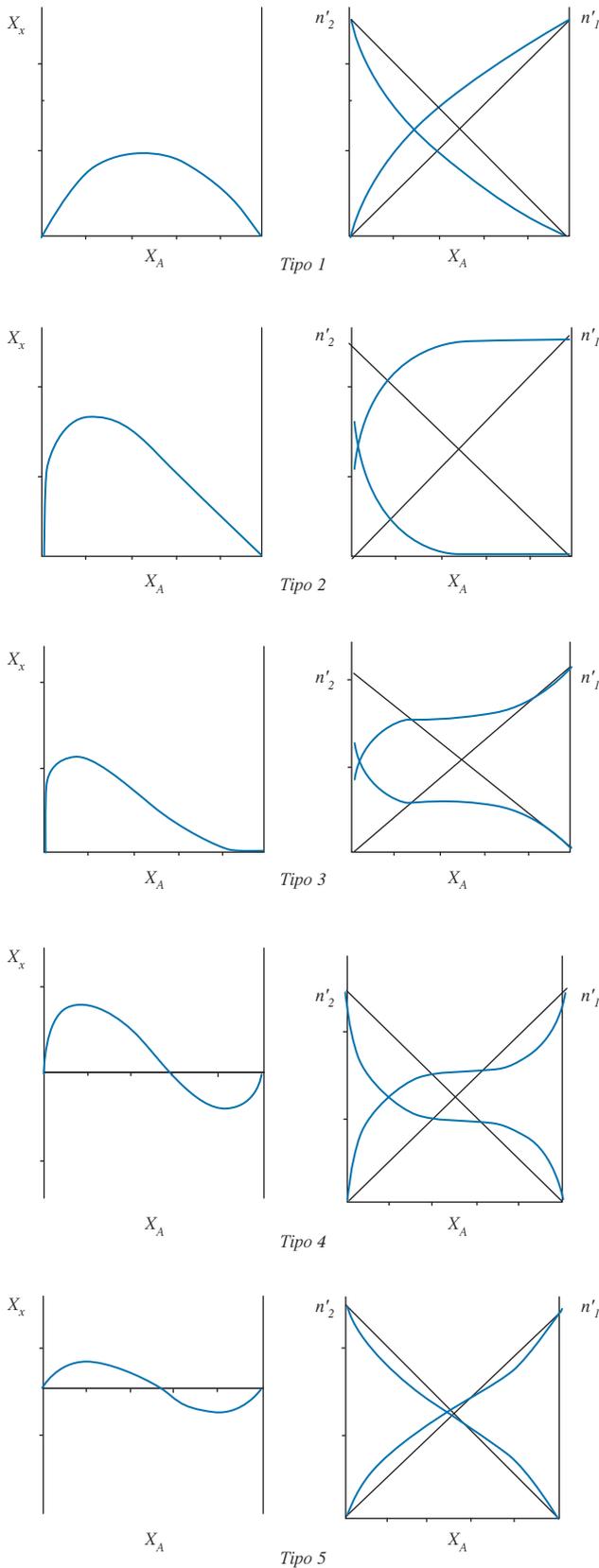


Figura 4. Clasificación denominada de Schay-Nagy de isothermas de adsorción de mezclas líquidas (adaptada de la ref. 45).

El impacto de la clasificación de isothermas de Ostwald-de Izaguirre

Los trabajos de la década de 1950 marcaron una cierta inflexión en cuanto al impacto de la teoría de Ostwald-de Izaguirre como compendio de su visión del fenómeno de adsorción en la interfase sólido/disolución. A partir de ahí se menciona cada vez menos a la propia teoría y se pasa a considerar por separado dos aspectos concretos de la misma: la clasificación de isothermas y la denominada ecuación de Ostwald-de Izaguirre (ver más adelante). Hacia 1960, la escuela húngara de adsorción inicia una larga andadura en la que hace frecuente uso de ambas.^{45,46} Schay y Nagy⁴⁵⁻⁴⁷ proponen una clasificación de isothermas de adsorción de mezclas líquidas (Figura 4) que es muy reminiscente de la de Ostwald-de Izaguirre.¹

También en 1960, el trabajo de Giles y colaboradores⁴⁸ en el que se menciona que “posiblemente el primer intento de clasificación de las isothermas de adsorción sea el de Ostwald y de Izaguirre”, es curiosamente el que viene a *dar la puntilla* a esta clasificación. En este trabajo se propone la desde entonces denominada *clasificación de Giles*, donde las isothermas se agrupan en cuatro tipos (denominados S, L, H y C) de acuerdo con la forma de su porción inicial; cada uno de estos tipos se subdivide en cinco subgrupos (1-4 y mx) de acuerdo con el grado recubrimiento superficial y con la forma del tramo final de las isothermas. Esta clasificación, como podemos observar en la Figura 5, ya se parece muy poco a la de Ostwald-de Izaguirre,¹ siendo de alcance mucho más amplio. La clasificación de Giles ha sido dotada de una sólida base teórica que justifica los tipos de comportamiento identificados,⁴⁹ además de una amplia verificación experimental,⁵⁰ con lo que ha alcanzado un amplio respaldo de la comunidad científica desplazando a cualquier otra clasificación de las isothermas de adsorción en disolución.

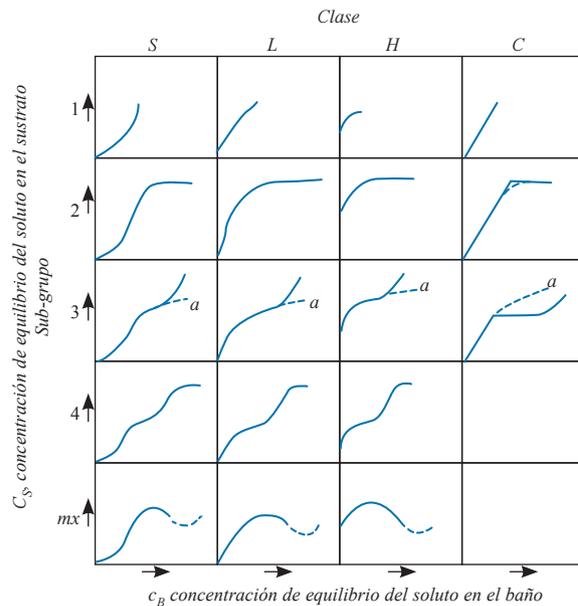


Figura 5. Clasificación de Giles de isothermas de adsorción en disolución (adaptada de la ref. 48).

Puede decirse que la clasificación de isothermas de Ostwald-de Izaguirre tiene hoy en día un interés exclusivamente histórico, aunque no debemos desdeñar el que esté generalmente considerada como el primer intento de sistematización de las isothermas de adsorción. Por ejemplo, es anterior en 18 años a la archiconocida clasificación BDDT de isothermas de adsorción de gases y vapores en sólidos,⁵¹ la única explícitamente mencionada como antecedente (aparte de la de Ostwald-de Izaguirre) en el muy reconocido artículo de Giles et al.⁴⁸

El impacto de la ecuación de Ostwald-de Izaguirre

Se denomina habitualmente como ecuación de Ostwald-de Izaguirre una de las deducidas por estos autores en la formulación de su teoría y que corresponde a una adsorción simultánea de soluto y disolvente no acompañada de fenómenos de solvatación. Se trata de la ecuación (2) de las presentadas en la primera parte de este trabajo.¹ Una manera alternativa de expresarla,³⁶ que muestra más claramente cómo utilizar esta ecuación para desglosar las contribuciones de los dos componentes de una mezcla de líquidos (1 y 2) al fenómeno de adsorción, es la siguiente:

$$\frac{n_0}{m}(x_0 - x) = n_1^s(1 - x) - n_2^s x \quad (1)$$

donde x_0 y x son las fracciones molares del componente 1 antes y después de la adsorción, respectivamente; n_1^s y n_2^s son los números de moles de los componentes 1 y 2 adsorbidos por gramo de adsorbente; m es la masa de adsorbente en gramos y n_0 es el número total de moles presentes en la disolución de partida.

A diferencia de la clasificación de Ostwald-de Izaguirre de isothermas, la ecuación (1) tiene una mayor pervivencia, habiendo sido frecuentemente utilizada por diferentes autores para ajustar resultados experimentales. Los investigadores de la escuela húngara antes mencionados han hecho amplio uso de ella por considerar⁴⁵ que, al derivar de un sencillo balance de materia, no hace suposiciones que limiten su uso; vemos, pues, que aquello que unos habían calificado de “análisis aritmético”³⁴ es para otros una ventaja. Además, los valores del área superficial obtenidos fueron equivalentes (con diferencias inferiores al 5%) a los obtenidos por el método BET por fisiorción de nitrógeno.⁴⁰ Tras su aplicación a la medida del área superficial de sólidos, la ecuación de Ostwald-de Izaguirre ha sido utilizada por la escuela húngara⁵²⁻⁵⁸ y por otros grupos^{59,60} en numerosos estudios de tipo termodinámico.

La escuela de Granada (quizá debiéramos decir mejor la escuela española, porque es desde aquella Universidad desde donde han irradiado originalmente los estudios sobre adsorción realizados en nuestro país) ha hecho uso de la ecuación de Ostwald-de Izaguirre para determinar las cantidades absolutas de soluto y disolvente retenidos en sólidos tales como carbones⁶¹ y vermiculitas.⁶² En este último trabajo, ese cálculo permitió identificar situaciones en las que la influencia del disolvente se puede considerar como despreciable, de modo que las isothermas experimentales coinciden con las reales de retención del soluto. Valenzuela⁶³ ha discutido los efectos

de la competencia entre disolvente y soluto por los mismos centros de adsorción así como la influencia de la volatilidad de uno y otro, recomendando para el cálculo de las isothermas individuales la combinación de la ecuación de Ostwald-de Izaguirre con las propuestas por otros autores (antes citados) como Williams y Elton.

Un posible criterio para valorar la validez y pervivencia del resultado de una investigación es que, pasado el tiempo, se encuentre incluido en libros para ser utilizado como ejemplo de referencia. No nos referimos simplemente a ser citado por una autoridad en la materia, cosa que puede ser muy rentable,⁶⁴ sino a que la cita en libros permanezca con el tiempo. En ese sentido, debemos indicar que la clasificación y la ecuación de Ostwald-de Izaguirre aparecen en libros sobre adsorbentes y sobre adsorción en general, algunos de ellos muy recientes. Así, Bansal y cols., en su libro sobre carbones activos,⁶⁵ incluyen un análisis detallado de la adsorción para concentraciones elevadas de soluto y presentan las gráficas de la Figura 6 con el cálculo de las isothermas individuales a partir de la isoterma obtenida experimentalmente para la disolución, atribuyendo tal figura a Ostwald y de Izaguirre aunque, en estricto sentido, ellos no proporcionaron dicha figura sino el método que hizo posible calcularla. La misma figura (aunque ya atribuida a Kipling³⁴) aparece en el texto de Adamson⁶⁶ para ilustrar la adsorción a partir de mezclas líquidas binarias. En su obra posterior, Bansal y Goyal⁶⁷ describen las propiedades de los carbones activados para la adsorción de diferentes especies en disolución de manera aún más pormenorizada, y como introducción teórica presentan la derivación completa de la isoterma *compuesta* tal como la realizó en su día Kipling.

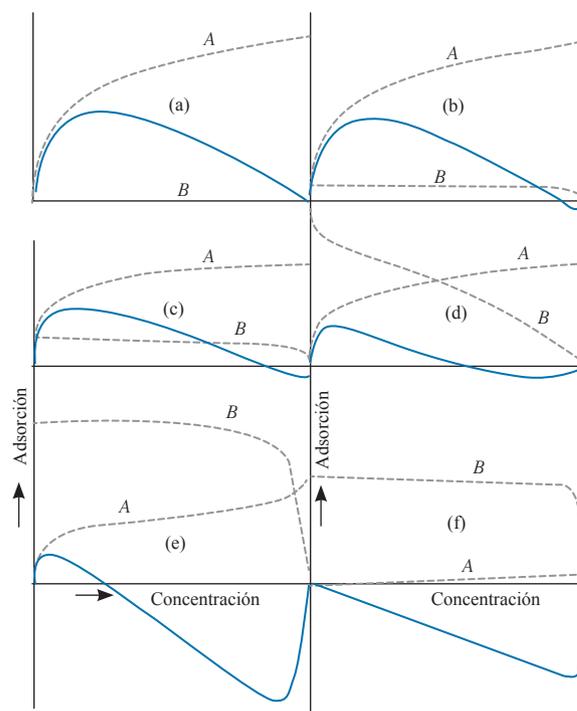


Figura 6. Desglose de isothermas de adsorción globales para disoluciones (línea continua) en las componentes (líneas discontinuas) debidas al soluto (A) y al disolvente (B) (adaptada de la ref. 34).

En este libro, la aportación del trabajo de Ostwald y de Izaguirre se ve más reflejada en la clasificación de isothermas que en el desarrollo de ecuaciones. Por su parte, Tóth⁶⁸ utiliza la ecuación de Ostwald-de Izaguirre en su derivación de la ecuación de Gibbs para adsorción en interfaces sólido/líquido; y, en otro capítulo del mismo libro, Dékany y Berger⁶⁹ hacen uso de la ecuación de Ostwald-de Izaguirre para la derivación termodinámica de ecuaciones que rigen la adsorción en sistemas constituidos por un adsorbente sólido y dos líquidos miscibles, y como punto de partida en la deducción de un nuevo método de determinación de la capacidad de adsorción basado en las isothermas de adsorción en exceso y las determinadas mediante medidas calorimétricas.

Terminamos indicando que, aparte de los anteriores libros, la ecuación de Ostwald-de Izaguirre sigue siendo citada en el siglo XXI en artículos publicados en revistas científicas. El goteo de citas incluye tanto trabajos teóricos sobre termodinámica de adsorción⁷⁰ como otros (por cierto, realizados en la Universidad de Leipzig en una curiosa vuelta a los orígenes) sobre funciones de distribución de energías de adsorción^{71,72} (funciones cuyo cálculo se resiste denodadamente a ser resuelto^{73,74}), o sobre sílices y carbonos mesoporosos ordenados,⁷⁵ sólidos que se encuentran actualmente entre los adsorbentes más novedosos.⁷⁶

Aunque era tentador presentar la evaluación con el tiempo del número de citas recibidas por el artículo de Ostwald-de Izaguirre,² hemos renunciado a ello para no incurrir en inexactitud por defecto, ya que hemos observado que en numerosos artículos se ha utilizado esta ecuación indicando los nombres de sus autores, pero omitiendo la referencia bibliográfica del artículo, quizá por considerarla de uso tan amplio que ya ha pasado a formar parte del conocimiento general. Ello nos lleva a concluir que, más allá de un cierto nivel, el número de citas recibidas se vuelve en parte irrelevante, y que algo que hace a un descubrimiento unánimemente reconocido es precisamente el que se nombre a su(s) autor(es) pero se considere innecesario dar la cita bibliográfica. Es algo parecido a cuando un dispositivo de laboratorio denominado según el nombre de su descubridor pasa a escribirse con minúscula, indicando que se ha convertido en un nombre común (dewar, erlenmeyer, quitasato, soxhlet...). El valor del trabajo de Ostwald-de Izaguirre, visto desde la perspectiva actual, quizá esté precisamente en haber trascendido los límites de lo cuantificable para pasar a ser patrimonio general de la química de superficies.

Conclusiones

La teoría desarrollada por Wolfgang Ostwald y Ramón de Izaguirre para la adsorción en disolución ha ejercido un impacto significativo en los estudios posteriores en ese campo. Sin embargo, no existió un desarrollo de ulteriores trabajos por parte de los autores de la teoría, ya que en los años sucesivos Wolfgang Ostwald trabajó en otros aspectos de la química coloidal, mientras que la carrera investigadora de Ramón de Izaguirre parece haberse visto truncada cuando pasó a trabajar en una fábrica de fertilizantes nitrogenados. De la teoría han quedado para la posteridad dos herencias concretas. Una es lo que se considera como el primer intento sistemático de clasificación de isothermas de adsorción, que hoy en día ya sólo ofrece interés histórico.

La otra es una ecuación, aún empleada en la actualidad, que permite desglosar las contribuciones de los dos componentes de una disolución a la adsorción sobre un sólido a partir de datos globales. La ecuación de Ostwald-de Izaguirre ha sido y es frecuentemente utilizada en trabajos posteriores sin necesidad de dar la correspondiente referencia bibliográfica, lo que es en sí mismo una prueba de su relevancia y pervivencia.

Agradecimientos

A la Prof. Dra. Krisztina László, de la Universidad de Tecnología y Economía de Budapest, por haber suscitado en el autor el interés en la ecuación de Ostwald-de Izaguirre. A D^a Mónica García Cuetos, del Museo de la Siderurgia (MUSI), Langreo, Asturias, por la fotografía de la Figura 3.

Bibliografía

1. J. M. D. Tascón, Parte 1 de este artículo, publicada en *Anales Quím.* **2013**, *109*, 193–200.
2. Wo. Ostwald, R. de Izaguirre, *Koll.-Zeits.* **1922**, *30*, 279–306.
3. *Junta para Ampliación de Estudios e Investigaciones Científicas. Memoria correspondiente a los cursos 1922-3 y 1923-4*, Madrid, **1925**, 49, 173, 181, 182, 185–8, 192, 200 y 417.
4. M. Smiseik, S. Cerný, *Active Carbon. Manufacture, Properties and Applications*, Elsevier, Amsterdam, **1970**, 3.
5. *Junta para Ampliación de Estudios e Investigaciones Científicas. Memoria correspondiente a los cursos 1924-5 y 1925-6*, Madrid, **1927**.
6. *Anales Real Soc. Esp. Fis. Quím.* **1930**, *28*, 117.
7. *Anales Real Soc. Esp. Fis. Quím.* **1930**, *28*, 199–203.
8. Orden de 7 de agosto de 1934, *Boletín Oficial del Ministerio de Instrucción Pública y Bellas Artes* del 23, nº 101, 403.
9. R. Berrojo Jario, *Enrique Moles y su obra*, Tesis Doctoral, Facultad de Farmacia, Universidad de Barcelona, **1980**, 17–26.
10. Orden de 11 de diciembre de 1933, *Gaceta de Madrid* del 12 de diciembre.
11. Real Decreto de 17 de diciembre de 1922, *Gaceta de Madrid* del 20 de diciembre.
12. S. Arribas Jimeno, *La Facultad de Ciencias de la Universidad de Oviedo (estudio histórico)*. Universidad de Oviedo, Oviedo, **1984**, 31–32.
13. A. Vian Ortuño, en: *La Edad de Plata de la Cultura Española, 1898-1936* (Ed.: P. Laín Entralgo), Espasa-Calpe, Madrid, **1993-94**, Tomo 39, Vol. 2, 428–472.
14. R. de Izaguirre, *Anales Real Soc. Esp. Fis. Quím.* **1933**, *31*, 760–775.
15. R. de Izaguirre Porset, *La industria química en España*. Extracto de las conferencias pronunciadas en agosto de 1937 en el cursillo celebrado en Luarca, y organizado por la Universidad de Oviedo. Establ. Tipogr. “La Cruz”, Oviedo, **1939**.
16. R. de Izaguirre Porset, *Discurso leído en la solemne apertura del curso de 1940 a 1941*. Universidad de Oviedo. Imprenta “La Cruz”, Oviedo, **1940**.
17. R. Anes Álvarez de Castrillón, en: *Inauguración del Aula Valdés Salas de Extensión Universitaria*. Universidad de Oviedo. Salas, Asturias, **2008**, 19–26.
18. J. M. Martínez Cachero, en: *Oviedo en el recuerdo*, Real Instituto de Estudios Asturianos, Oviedo, **1992**, 167–181.

19. *Junta para Ampliación de Estudios e Investigaciones Científicas. Memoria correspondiente a los años 1918 y 1919*, Madrid, **1920**, 138, 140 y 142.
20. *Junta para Ampliación de Estudios e Investigaciones Científicas. Memoria correspondiente a los años 1920 y 1921*, Madrid, **1922**, 146, 147 y 149.
21. A. Eucken, *Química Física*, Traducción española de la 4ª edición alemana. Manuel Marín, Barcelona, **1942**.
22. J. A. Pajares, comunicación personal.
23. C. García Braña, S. Landrove, A. Tostoes (Eds.), *La arquitectura de la industria, 1925–1965. Registro Docomomo Ibérico*. Fundación Docomomo Ibérico, Barcelona, **2005**.
24. A. Fernández García, *Langreo. Industria, población y desarrollo urbano*, Tesis Doctoral, Facultad de Letras, Universidad de Oviedo, **1980**.
25. A. Gómez de Mendoza, *El plan del nitrógeno (1939–61)*, Documento de trabajo N° 9709, Universidad Complutense de Madrid, 1979.
26. L. Gurwitsch, *Z. Phys. Chem.* **1914**, *87*, 323–332.
27. A. M. Williams, *Meddelanden från Kungliga Vetenskapsakademien Nobelinstitut* **1913**, *2*, No. 27.
28. A. M. Williams, *Trans. Faraday Soc.* **1914**, *10*, 155–159.
29. B. Gustaver, *Koll.-Zeits.* **1922**, *31*, 358–362.
30. W. Ostwald, R. de Izaguirre, *Koll.-Zeits.* **1923**, *32*, 57–64.
31. E. Swan, A. R. Urquhart, *J. Phys. Chem.* **1927**, *31*, 251–276.
32. L. de Brouckère, *Ann. Chim.* **1933**, *19*, 79–204.
33. J. J. Kipling, D. A. Tester, *Nature* **1951**, *167*, 612–612.
34. J. J. Kipling, *Quart. Rev.* **1951**, *5*, 60–74.
35. F. E. Bartell, C. K. Sloan, *J. Am. Chem. Soc.* **1929**, *51*, 1643–1656.
36. J. J. Kipling, D. A. Tester, *J. Chem. Soc.* **1952**, 4123–4133.
37. G. A. H. Elton, *J. Chem. Soc.* **1951**, 2958–2961.
38. R. S. Hansen, Y. Fu, F. E. Bartell, *J. Phys. Colloid Chem.* **1949**, *53*, 769–785.
39. S. Brunauer, P. H. Emmett, E. Teller, *J. Am. Chem. Soc.* **1938**, *60*, 309–319.
40. R. S. Hansen, W. V. Fackler, *J. Phys. Chem.* **1953**, *57*, 634–637.
41. M. Polanyi, *Z. Phys.* **1920**, *2*, 111–116.
42. M. Polanyi, *Trans. Faraday Soc.* **1932**, *28*, 316–332.
43. M. Polanyi, *Science* **1963**, *141*, 1010–1013.
44. R. D. Hansen, R. S. Hansen, *J. Colloid Sci.* **1954**, *9*, 1–6.
45. G. Schay, L. G. Nagy, T. Szekrényesi, *Period. Polyth. Chem. Eng.* **1960**, *4*, 95–117.
46. L. G. Nagy, G. Schay, *Magyar Kémiai Folyóirat* **1960**, *66*, 31–37.
47. G. Schay, L. Nagy, *J. Chim. Phys. & Chim. Phys. Biol.* **1961**, *58*, 149–158.
48. C. H. Giles, T. H. MacEwan, S. N. Nakhwa, D. Smith, *J. Chem. Soc.* **1960**, 3973–3993.
49. C. H. Giles, D. Smith, A. Huitson, *J. Colloid Interface Sci.* **1974**, *47*, 755–765.
50. C. H. Giles, A. P. D'Silva, I. A. Easton, *J. Colloid Interface Sci.* **1974**, *47*, 766–778.
51. S. Brunauer, L. S. Deming, W. E. Deming, E. Teller, *J. Am. Chem. Soc.* **1940**, *62*, 1723–1732.
52. L. G. Nagy, G. Schay, *Acta Chim. Hung.* **1963**, *39*, 365–389.
53. G. Schay, L. Nagy, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1966**, *50*, 207–223.
54. L. G. Nagy, G. Schay, T. Szekrényesi, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1967**, *53*, 145–168.
55. G. Schay, L. Nagy, *J. Colloid Interface Sci.* **1972**, *38*, 302–311.
56. J. Tóth, *J. Colloid Interface Sci.* **1974**, *46*, 38–45.
57. I. Dékány, Á. Zsednai, Z. Király, K. László, L. G. Nagy, *Coll. Surf.* **1986**, *19*, 47–66.
58. F. Berger, I. Dékány, *Coll. Polym. Sci.* **1997**, *275*, 876–882.
59. S. Y. Elovich, O. G. Larionov, *Izv. Akad. Nauk SSSR., Otd. Khim. Nauk* **1962**, *2*, 198–203 (English translation).
60. M. Jaroniec, J. Goworek, A. Dabrowski, *Coll. Polym. Sci.* **1985**, *263*, 771–777.
61. L. Gómez-Jiménez, A. García-Rodríguez, J. D. López-González, A. Navarrete-Guijosa, *J. Chem. Tech. Biotechnol.* **1987**, *38*, 1–13.
62. C. Valenzuela Calahorro, A. García Rodríguez, A. Bernalte García, *Anales Quím. Ser. B* **1985**, *81*, 166–171.
63. C. Valenzuela Calahorro, *Discurso leído en el acto de su recepción como académico numerario, Academia de Ciencias Matemáticas, Físico-Químicas y Naturales de Granada*, Granada, **2005**.
64. L. H. Sliwinka, B. H. Davis, *Ambix* **1987**, *34*, 81–88.
65. R. C. Bansal, J.-B. Donnet, F. Stoeckli, *Active Carbon*, Marcel Dekker, New York, **1988**, Ch. 4, 162–258.
66. A. W. Adamson, *Physical Chemistry of Surfaces*, Wiley, New York, **1990**, Ch. XI, 421–459.
67. R. C. Bansal, M. Goyal, *Activated Carbon Adsorption*, Taylor & Francis, Boca Raton, FL, **2005**, Ch. 3, 145–199.
68. J. Tóth, en: *Adsorption. Theory, modeling and analysis* (Ed.: J. Tóth), Marcel Dekker, New York, **2001**, Ch. 1, 1–103.
69. I. Dékány, F. Berger, en: *Adsorption. Theory, modeling and analysis* (Ed.: J. Tóth), Marcel Dekker, New York, **2001**, Ch. 10, 573–629.
70. J. Tóth, *J. Colloid Interface Sci.* **2003**, *262*, 25–31.
71. G. Kalies, P. Bräuer, M. V. Szombathely, *J. Colloid Interface Sci.* **2009**, *331*, 329–334.
72. S. Arnrich, G. Kalies, P. Bräuer, *Appl. Surf. Sci.* **2010**, *256*, 5198–5203.
73. E. J. Bottani, J. M. D. Tascón, en: *Chemistry and Physics of Carbon* (Ed.: L. R. Radovic), Vol. 29, Marcel Dekker, New York, **2004**, Ch. 3, 209–423.
74. E. J. Bottani, J. M. D. Tascón (Eds.), *Adsorption by Carbons*, Elsevier, Amsterdam, **2008**.
75. G. Kalies, R. Rockmann, D. Tuma, J. Gapke, *Appl. Surf. Sci.* **2010**, *256*, 5395–5398.
76. J. M. D. Tascón (Ed.), *Novel Carbon Adsorbents*, Elsevier, Amsterdam, **2012**.

A vueltas con el mol: estrategias para explicar e introducir el concepto en secundaria

Luis Ignacio García

Resumen: El mol es, de las siete unidades fundamentales del Sistema Internacional, la que podríamos considerar genuinamente química. No obstante, es bastante común una comprensión errónea del concepto. Tiende a confundirse con la masa “*un mol de ácido sulfúrico son 98 g de ácido sulfúrico*” o con un número “*un mol de agua son $6,022 \cdot 10^{23}$ moléculas de agua*”. Aun si comprendemos el verdadero significado de mol lo verdaderamente difícil puede ser intentar comunicárselo a nuestros estudiantes de ESO y bachillerato. ¿Cómo hacerlo? ¿Podemos esperar algún resultado de nuestro intento?

Palabras clave: Mol, Número de Avogadro, átomos y moléculas, enseñanza de la química, didáctica.

Abstract: The mole is one of the seven International System basic units, the one we could consider genuinely chemical. However, an erroneous understanding of this concept is quite common. It is usually mistaken with mass “*a mole of sulphuric acid equals 98 g of sulphuric acid*” or with a number “*a mole of water equals $6,022 \cdot 10^{23}$ molecules of water*”. Even if we do understand the true meaning of mole it can be very difficult to try to put it across to our secondary school students. How can we do it? Can we expect any results from our attempts?

Keywords: Mole, Avogadro Number, atoms and molecules, teaching chemistry, didactics.

Introducción

He de confesar que debo empezar este artículo reconociendo mi desconocimiento del origen de la pequeña historia que, con ligeros retoques, se narra a continuación. No puedo precisar dónde la he leído. Pido disculpas por ello, pero no me resisto a contarla.

Un hombre está en el centro de una plaza (llamémosla Plaza Estequiometría) (Figura 1) que tiene cuatro salidas. Debe de abandonarla con urgencia, pero todas las salidas están fuertemente custodiadas, y le han informado de que solamente podrá salir de allí si consigue identificar cuál de las cuatro personas que vigilan las puertas es un químico(a), para ello puede hacer una única pregunta (naturalmente se le prohíbe preguntar por los estudios o profesión de los guardianes).

Nuestro hombre respira aliviado ya que él mismo es químico y la pregunta le parece obvia, simplemente preguntará “¿podría usted decirme qué es un mol?”.

El mol,¹ una de las siete unidades fundamentales del Sistema Internacional es, probablemente, la unidad característica de la química. La magnitud correspondiente, la cantidad de sustancia,^{2,3} pertenece casi con exclusividad a este ámbito. La lógica, por tanto, nos lleva a pensar que ningún químico puede ignorar lo qué es un mol, así que felicitamos a nuestro hombre por haber resuelto su problema.... ¿De verdad que lo ha resuelto?...

En un estudio realizado por Strömdahl y otros^{4,5} (sobre el concepto de mol entre profesores arrojó el increíble resultado de que sólo un 10,7 % asociaba mol a unidad de cantidad de sustancia, siendo mayoritaria la opción que lo identificaba con el Número de Avogadro, (el 60,7 %) o con la masa (el 25%). No sé yo si existe una gran diferencia entre profesores de química y químicos, me temo que probablemente no.

Parece que nuestro hombre, contrariamente a nuestra impresión inicial, no tiene tan fácil escapar de la Plaza Estequiometría.



L. I. García

Dpto. de Física y Química.
I.E.S. La Magdalena. Avilés. Asturias.
C/ Leopoldo Alas, 1. Avilés. Asturias.
C-e: garlan2@telecable.es
<http://web.educastur.princast.es/proyectos/fisquiweb/index.htm>

Recibido: 01/04/2013. Aceptado: 10/04/2013.

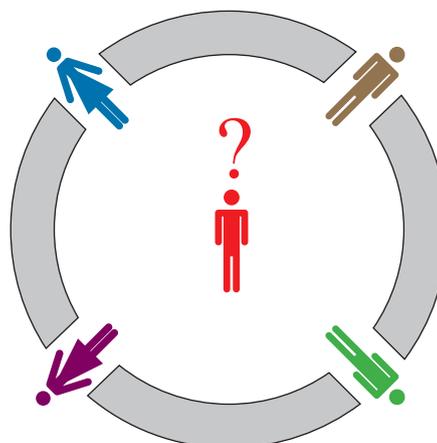


Figura 1. Plaza Estequiometría.

¿Podemos imaginarnos, si ocurre eso con los profesores, cuál será el nivel de (verdadero) conocimiento del concepto de mol entre los estudiantes de la ESO y del bachillerato?

¿Existe alguna posibilidad de éxito a la hora de intentar transmitir este concepto a nuestros alumnos? Seguro, aunque no es sencillo, sobre todo en los cursos inferiores (3º y 4º de ESO), pero aun ahí es necesario hablar de ello.⁶ El objetivo (sobre todo en 3º de ESO) es “*ir habituando el oído*”. En 4º de ESO habrá que repetirlo y usarlo en distintas situaciones. La esperanza es que en 1º de bachillerato la estrategia dé sus frutos y nuestros alumnos entiendan (realmente) el concepto.

El concepto de mol es algo íntimamente ligado a la teoría atómico-molecular de la materia y al Número de Avogadro.⁷ Es necesario, por tanto, tener una idea clara de lo que es un átomo o una molécula, de su tamaño y de cómo se miden sus masas.

Partiendo de que el concepto de mol no es algo sencillo de entender, se considera que se debe de empezar a hablar de moles una vez que nuestros alumnos sepan lo que es un átomo, una molécula o un ión, y justo en el momento en que vamos a iniciar el tema dedicado a las reacciones químicas y a los cálculos estequiométricos (no antes de 3º de ESO).

El Número de Avogadro, algo difícil de imaginar

Si ya hemos hablado de los átomos es natural que hayamos tenido que enfrentarnos con el problema de determinar su masa, y con el fin de poder medir una magnitud tan pequeña, habremos visto la necesidad de definir la **unidad de masa atómica o uma**.

$$1 \text{ uma} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

Pero la medida de la masa de los átomos en umas no resuelve el problema, ya que nuestras balanzas no miden umas, están graduadas en unidades de masa de “escala humana” (no atómica). Esto es, en gramos. Lo razonable, por tanto, sería relacionar ambos mundos (el micromundo, de átomos y moléculas, con el nuestro, el macroscópico).

Pensemos en una solución. ¿Cuántos átomos de ^{12}C (por ejemplo) necesitaríamos reunir para que su masa sea, no 12 uma (escala atómica), sino 12 g (escala humana)? Esto es ¿cuántos átomos se necesitan para que su masa sea numéricamente igual a la masa atómica, expresada en gramos?

$$0,012 \text{ kg} \cdot \frac{1 \mu}{1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ at. C}}{12 \mu} = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ at. C}$$

La respuesta, como puede verse, es el *Número de Avogadro* ($N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ átomos).⁸

Puede comprobarse (reiterando el procedimiento) que se obtiene siempre un resultado idéntico para cualquier átomo o molécula. Es decir, *si tomamos un número de gramos igual al peso atómico o molecular, expresado en gramos, nos aseguramos que en esa cantidad tenemos el Número de Avogadro de unidades elementales (átomos, moléculas...)*.

Este número, que a menudo escribimos con cierta indiferencia en el encerado, es enormemente grande, prácticamente inimaginable [ver más abajo Cómo hacer “visible” el Número de Avogadro... y la aplicación de la web FQW (Figura 2) sobre el Número de Avogadro⁹], y hay que esforzarse por transmitir

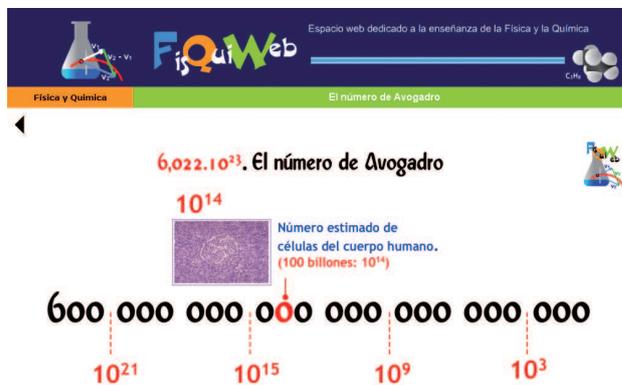


Figura 2. Aplicación interactiva de la web FisQuiWeb para visualizar la magnitud del Número de Avogadro (ref. 9).

esto a nuestros alumnos con el fin de que entiendan la pequeñez de los átomos y las moléculas. Tal vez así destierremos respuestas tales como que la masa de una molécula de agua son 18 g o la de un átomo de hidrógeno 1 g. La enorme magnitud del Número de Avogadro (N_A) nos da, paradójicamente, una idea de la pequeñez de los átomos y las moléculas.^{10,11}

Si hemos conseguido transmitir la sensación de lo enormemente grande que es el Número de Avogadro, seguro que la pregunta surge espontánea: *¿y cómo se puede contar eso?* Y ahí, precisamente, empieza la necesidad de definir el mol.

Cómo hacer “visible” el Número de Avogadro

La estrategia que se puede seguir en clase comienza escribiendo (de forma aproximada) el Número de Avogadro con todos sus ceros en el encerado:

600 000 000 000 000 000 000 000

Después de leerlo: seiscientos mil trillones, el número sigue pareciendo muy grande, *pero no se tiene conciencia de su enormidad*.

Preguntemos: “¿cuántos habitantes tiene el planeta Tierra (en números redondos)?”.

Respuesta: siete mil millones. Esto ya da una idea de “número grande” ya que la impresión general es que en este planeta hay “muchísima” gente.

Comparemos ambos números:

- Habitantes del planeta Tierra: $7 \cdot 10^9$
- Número de Avogadro (N_A): $6 \cdot 10^{23}$

Empezamos a lograr que N_A sea considerado como un número realmente grande, ya que es del orden de cien billones de veces mayor que el número de habitantes de nuestro planeta.

Planteemos ahora el siguiente experimento mental: imaginaos que ponemos a contar átomos a todos los habitantes del planeta Tierra a razón de 100 átomos por segundos ¿cuánto tardarían en contar $6 \cdot 10^{23}$? Anotar las posibles respuestas (es muy difícil que alguien se acerque al resultado correcto).

Calculemos ahora: átomos contados por segundo por todos los habitantes de la Tierra: $7 \cdot 10^{11}$ átomos/s. Aún esta-

mos muy lejos. Supongamos que cuentan durante 1 día sin parar. Contarían:

$$7 \cdot 10^{11} \frac{\text{átomos}}{\text{seg}} \cdot \frac{3600 \text{ seg}}{1 \text{ h}} \cdot \frac{24 \text{ h}}{1 \text{ día}} = 6 \cdot 10^{16} \frac{\text{átomos}}{\text{día}}$$

Vale, ¡acabemos! ¡qué cuenten un año entero!:

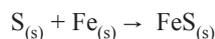
$$6 \cdot 10^{16} \frac{\text{átomos}}{\text{día}} \cdot \frac{365 \text{ días}}{1 \text{ año}} = 2 \cdot 10^{19} \frac{\text{átomos}}{\text{año}}$$

Aún no llegamos. El número es treinta mil veces menor. ¿Cómo es posible? (primeras exclamaciones).

¿Entonces cuál es la solución?: ¡harían falta unos 30 000 años!

Reacciones químicas, ecuaciones y cálculos

A la hora de plantear un cálculo estequiométrico el químico tiene una imperiosa necesidad de contar átomos o moléculas. Veamos un ejemplo:

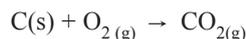


Para obtener el monosulfuro de hierro es necesario que los átomos de hierro y azufre se combinen en proporción 1:1. Esto es, tendremos que tener igual número de átomos de hierro que de azufre. Pero... ¿cómo contar lo incontable?...

Los químicos han descubierto la forma de contar usando la balanza. Efectivamente, a partir de la definición de una deducimos (ver más arriba), que si tomamos una cantidad de azufre, o de hierro, tal que su masa en gramos coincida con su masa atómica en umas, estaremos cogiendo exactamente $6,022 \cdot 10^{23}$ átomos (de azufre o de hierro). Para garantizar que tomamos exactamente igual número de átomos de azufre que de hierro tendremos entonces que tomar 32,0 g de azufre y 55,8 g de hierro. Es razonable, por tanto, decir que hemos de tomar una “unidad” de azufre y otra de hierro. Esta “unidad” se corresponde con una cantidad de cada una de las sustancias (una porción) que contiene un número idéntico de unidades elementales (átomos en este caso). *Lo relevante a la hora de establecer la cantidad de sustancia a tomar no es ni su masa, ni su volumen, ni ninguna otra propiedad, sino la circunstancia de que tenga un número determinado de unidades elementales. A esta unidad se la denomina mol.*

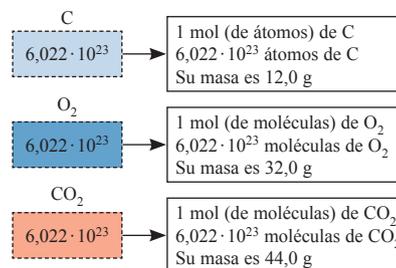
Lógicamente, al ser una porción de materia, podemos asignar al mol una masa, pero no podemos identificar mol con un número de gramos, tampoco con un número (N_A). Lo que el químico coge para efectuar sus reacciones son cantidades determinadas de sustancias que “fracciona” en unidades que contienen idéntico número de unidades elementales que más tarde reaccionarán (sean átomos, iones o moléculas) para formar nuevas sustancias.

Pongamos un ejemplo. Consideremos una determinada cantidad de sustancia: 72,0 g de carbono. Desde el punto de vista químico consta de 6 unidades químicas o moles (masa de 1 mol = 12,0 g). Si quiero hacer reaccionar ese carbono con oxígeno según:

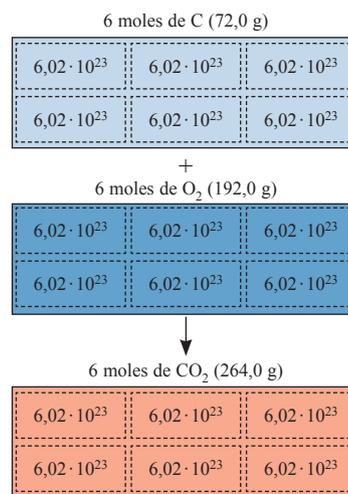


necesito coger tantas unidades (moles) de carbono como de oxígeno, teniendo en cuenta que en el caso del oxígeno las unidades elementales van a ser moléculas.

La cantidad de oxígeno que contiene $6,022 \cdot 10^{23}$ moléculas (1 mol) tendrá una masa de 32,0 g. Luego para reaccionar con seis moles o unidades químicas de carbono (cuya masa son 72,0 g) necesitaré idéntico número de unidades (moles) de oxígeno. Esto es: 192,0 g de oxígeno.



Por tanto:



Última etapa: convencer a nuestro público

Es posible que con todo lo dicho tengamos un poco más claro el (criptico) significado de la definición ortodoxa de mol¹ y su utilidad, pero como profesores aún nos queda lo más complicado: enfrentarnos a nuestro alumnado e intentar explicarles qué es un mol.

¿Cómo transmitir esto a una clase?

Primero tenemos que precisar... ¿Un mol de qué? Pongamos de (la sustancia) cinc. Es la cantidad de cinc que contiene $6,022 \cdot 10^{23}$ átomos de cinc.

En pocas palabras, esto es un mol de cinc:



Figura 3. Un mol de cinc.

En esa cantidad de cinc (a la que le corresponde una masa de 65,5 g, ya que la balanza ha sido previamente tarada e indica directamente la masa del cinc contenido en el matraz) hay el Número de Avogadro de átomos de cinc (Figura 3).

Si consideramos ahora un compuesto, como puede ser el agua, deberemos de considerar cuál es la masa de una molécula (unidad elemental) de agua: 18,0 uma.

Tomando una cantidad de (sustancia) agua cuya masa en gramos sea numéricamente igual a su masa molecular, podemos asegurar que estaremos cogiendo $6,022 \cdot 10^{23}$ moléculas de agua. Tendremos un mol de agua (coloreada de verde en la Figura 4):

Esto es un mol de agua:



Figura 4. Un mol de agua.

En resumidas cuentas ¿quieres enseñar a tus alumnos qué es un mol de...? ¡Muéstraselo! Prepara cantidades adecuadas de diversas sustancias (elementos y compuestos) y haz que los vean (Figura 5).

Recalca que las cantidades tomadas no son cualesquiera, han sido tomadas con el criterio de que todas ellas contienen el mismo número de entidades elementales (átomos o moléculas) y, en consecuencia, pueden usarse como verdaderas unidades a la hora de establecer las proporciones correctas entre átomos o moléculas a la hora de plantear una reacción química.

Conclusiones

- La magnitud de la cual es unidad el mol es la cantidad de sustancia (esto es, una porción de materia con unas propiedades definidas y fijas) ¿Es medible la cantidad de sustancia? Sí, siempre que se defina una unidad de medida adecuada. Para los propósitos de alguien que se dedica a la química, la unidad de medida se define como la cantidad de esa sustancia que contiene un número determinado ($6,022 \cdot 10^{23}$) de unidades elementales.
- Como un mol es, por definición, una cantidad dada de materia, le corresponderá una masa determinada (aunque distinta para las distintas sustancias), pero no se pueden confundir moles con gramos. Un mol de agua no son 18,0 g de agua. Un mol de agua es una cantidad de agua tal que contiene $6,022 \cdot 10^{23}$ moléculas de agua. A esta cantidad de agua (como materia) le corresponde una masa de 18,0 g (Figura 4).

- Tampoco se puede confundir con un número ($6,022 \cdot 10^{23}$). Un mol de cinc, no son $6,022 \cdot 10^{23}$ átomos de cinc. El químico no puede contar átomos o moléculas de forma directa. Sólo puede manipular cantidades macroscópicas de sustancias y eso, precisamente, es el mol: una determinada cantidad de sustancia, pero no cualquiera, sino aquella que contiene el Número de Avogadro de unidades elementales de la sustancia que estemos considerando.
- Lo realmente interesante, y que hace útil a la unidad mol, es que permite una conexión sencilla entre el mundo microscópico (escala atómica, número de unidades elementales) con el macroscópico (escala humana, gramos), puesto que tomando una determinada cantidad de sustancia (que caracterizamos por su masa, por ejemplo) podemos asegurar que contiene un número fijo de unidades elementales, lo cual es vital a la hora de plantear una reacción química.
- Hablando rigurosamente deberíamos especificar las partículas elementales a las que nos referimos, ya que no es lo mismo un mol de átomos de oxígeno, por ejemplo, que un mol de moléculas de oxígeno, pero la mayor parte de las veces no es necesaria esta precisión ya que la naturaleza de las partículas queda suficientemente clara.



Figura 5. Un mol de distintas sustancias. De izquierda a derecha: de azufre, de hierro de cinc y de agua.

Bibliografía

1. Web de la IUPAC (Gold Book), <http://goldbook.iupac.org/M03980.html>, visitada el 03/06/2013.
2. Web de la IUPAC (Gold Book), <http://goldbook.iupac.org/A00297.html>, visitada el 03/06/2013.
3. J. J. Andrade, H. L. Corso, F. C. Gennari, *Eureka* 2006, 3, 229–236.
4. H. Strömdahl, A. Tulberg, L. Lybeck, *Int. J. Sci. Ed.* 1994, 16, 17–26.
5. C. Furió, R. Azcona, J. Guisasola, *Enseñanza de las Ciencias* 2002, 20, 229–242.
6. Garritz, L. Gasque, G. Hernández, A. Martínez. *Alambique* 2002, nº 33, 99–109.
7. Historia del Número de Avogadro, <http://bit.ly/16CNAUX>, visitada el 03/06/2013.
8. Web del National Institute of Standards and Technology, <http://www.nist.gov/pml/index.cfm>, visitada el 03/06/2013.
9. Aplicación interactiva para visualizar la magnitud del Número de Avogadro, <http://bit.ly/Xu9yzp>, visitada el 03/06/2013.
10. M. Carrillo, G. Hernández, E. Nieto, *Enseñanza de las Ciencias*, 2005, número extra, VII congreso.
11. R. Fox, T. Hill, *American Scientist* 2007, 95, 104–107.

Desenmascarando líneas espectrales de átomos hidrogenoides

José Zúñiga, Adolfo Bastida, Alberto Requena

Resumen: En este artículo unos alumnos de Química cuentan como han logrado identificar y asignar las líneas espectrales de un átomo hidrogenoide procedentes del espectro de una estrella lejana.

Palabras clave: Alumnos de química, átomos hidrogenoides, líneas espectrales, fórmula de Rydberg, actividades educativas.

Abstract: In this paper a group of undergraduate students of Chemistry tell how they have managed to identify and assign the spectral lines of a hydrogen-like atom coming from the spectrum of a far away star.

Keywords: Chemistry students, hydrogen-like atoms, spectral lines, Rydberg formula, learning activities.

Relato de los alumnos

Nuestro profesor de Química-Física se presenta en clase con el espectro de una estrella lejana que le ha enviado un astrónomo, amigo suyo, en el que aparecen una serie de líneas que pertenecen, sospechosamente, a un átomo hidrogenoide diferente del átomo de hidrógeno. Las líneas espectrales del átomo de hidrógeno las conocemos perfectamente; son las que forman las series de Lyman, Balmer, Paschen, etc... que nos han enseñado repetidamente al explicarnos los elementos básicos de la teoría atómica y de la espectroscopía. Así que las líneas desconocidas en cuestión proceden de alguno de los átomos monoeléctricos que se forman cuando los átomos polielectricos pierden todos sus electrones menos uno, es decir, del He⁺, del Li²⁺, del Be³⁺, del B⁴⁺, y así sucesivamente. No es de extrañar que haya átomos de este tipo en las estrellas –nos dice el profesor–, teniendo en cuenta las elevadas temperaturas que se alcanzan en ellas.

Las líneas espectrales del átomo hidrogenoide desconocido que nos pasa el profesor aparecen a las siguientes longitudes de onda: 516.85, 415.42, 366.16 y 337.53 nm, o sea que las dos primeras caen en el visible (entre 390 y 780 nm) y las dos últimas en el ultravioleta (por debajo de los 390 nm). Nuestro profesor de Química-Física, que confía plenamente en nuestra dedicación, nos encarga que averigüemos de qué átomo hidrogenoide se trata, y que “desenmascaremos” las líneas o, como dicen los espectroscopistas, que las asignemos, que no es otra cosa que identificar las

transiciones entre los niveles que las producen (a estas alturas del grado ya sabemos que los átomos y moléculas tienen niveles de energía discretos o cuantizados, entre los cuales pueden saltar absorbiendo o emitiendo radiación). ¡Fácil! Porque las posiciones de las líneas espectrales de los átomos hidrogenoides vienen dadas por la famosa fórmula de Rydberg, que no tiene una forma, digamos, muy complicada. La podemos encontrar incluso en nuestro libro de Química General. Aquí esta:

$$\frac{1}{\lambda} = R_x Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad n_1 < n_2 \quad (1)$$

Esta fórmula se obtiene al hacer la diferencia entre los niveles de energía de los átomos hidrogenoides, cuya expresión matemática dedujo por primera vez Bohr, mira por donde hace ahora justo 100 años, cuando propuso su modelo atómico planetario con órbitas cuantizadas. De acuerdo con la fórmula de Rydberg (1), la longitud de onda λ a la que aparece una línea espectral de un átomo hidrogenoide desconocido, llamémosle X , se puede calcular conociendo su número atómico Z , su constante de Rydberg R_x , y los números cuánticos n_1 y n_2 de los niveles entre los cuales se produce la transición, que toman valores enteros a partir de la unidad.

En las estrellas, lo normal es que los átomos hidrogenoides estén en niveles excitados debido, de nuevo, a las elevadas temperaturas, y que caigan a niveles más bajos emitiendo la radiación que se recoge en el espectro que, en nuestro caso, tenemos que analizar. Si las líneas aparecen más o menos cercanas entre sí, acercándose cada vez más unas a otras, entonces lo más probable es que procedan de transiciones que parten de niveles cada vez más excitados, que identificamos con el número cuántico n_2 , y que acaban todas ellas en un nivel común más bajo de número cuántico n_1 . Se dice entonces que las líneas pertenecen a una misma serie espectral caracterizada por el número cuántico n_1 . Pero bueno, esto también lo sabemos ya. En el átomo de hidrógeno la serie correspondiente a $n_1=1$ es la de Lyman y sus líneas ($n_2=2, 3, 4, \dots$) aparecen todas en el ultravioleta, la serie con $n_1=2$ es la de Balmer, y sus líneas ($n_2=3, 4, 5, \dots$) aparecen en el visible, y las series siguientes con $n_1=3$ (Paschen), $n_1=4$ (Brackett), etc... aparecen en el infrarrojo. Para adornar un poco nuestro trabajo hemos representado



J. Zúñiga



A. Bastida



A. Requena

Departamento de Química Física. Universidad de Murcia.
Campus de Espinardo, 30100 Murcia, España.
C-e: zuniga@um.es

Recibido: 26/06/2013. Aceptado: 03/09/2013.

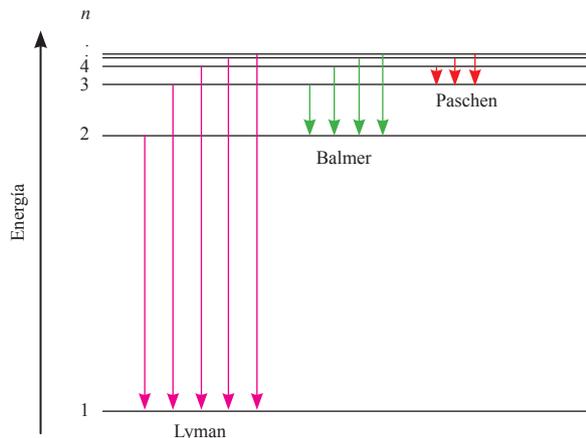


Figura 1. Transiciones descendentes entre niveles de energía del átomo de hidrógeno pertenecientes a las tres primeras series espectrales.

gráficamente las transiciones que dan lugar a las primeras líneas de estas series en la Figura 1.

Parece, pues, que lo único que tenemos que hacer es identificar la serie a la que pertenecen las líneas espectrales de nuestro átomo hidrogenoide desconocido utilizando la fórmula de Rydberg. Para empezar, seamos prácticos. Como en esta fórmula lo que aparece es la inversa de la longitud de onda, vamos a trabajar directamente dicha inversa, que es el llamado número de ondas $\tilde{\nu} = 1/\lambda$. La fórmula de Rydberg queda entonces como sigue:

$$\tilde{\nu} = R_X Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad n_1 < n_2 \quad (2)$$

y los números de ondas de las líneas de nuestro espectro misterioso, en sus unidades habituales de cm^{-1} , valen respectivamente 19348, 24072, 27310 y 29627 cm^{-1} .

Ya estamos listos. ¿Y ahora qué? La fórmula de Rydberg nos dice que cuanto mayor sea n_2 , para un valor fijo de n_1 , más pequeña será la cantidad $1/n_2^2$ que resta entre paréntesis y, por tanto, mayor será el número de ondas $\tilde{\nu}$. Así pues, los números de onda crecientes de nuestras líneas deben estar asociados a una serie de valores también crecientes de n_2 . Si usamos precisamente n_2 para identificar la primera de nuestras líneas, cuyo número de ondas es $\tilde{\nu}_{n_2} = 19348 \text{ cm}^{-1}$, entonces las siguientes líneas corresponderán a los valores n_2+1 ($\tilde{\nu}_{n_2+1} = 24072 \text{ cm}^{-1}$), n_2+2 ($\tilde{\nu}_{n_2+2} = 27310 \text{ cm}^{-1}$) y n_2+3 ($\tilde{\nu}_{n_2+3} = 29627 \text{ cm}^{-1}$). Nuestras incógnitas son entonces el propio valor de n_2 , que nos dice cual es la primera línea y a partir de ella las siguientes, el valor de n_1 , que nos dice cual es la serie a la que pertenecen las líneas, la constante de Rydberg R_X , y finalmente el número atómico Z , que es el que nos va a permitir realmente identificar el átomo hidrogenoide del que se trata. Son cuatro incógnitas que pueden resolverse usando las cuatro ecuaciones siguientes que nos da la fórmula de Rydberg para los números de ondas experimentales:

$$\tilde{\nu}_{n_2} = R_X Z^2 \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right] \quad (3)$$

$$\tilde{\nu}_{n_2+1} = R_X Z^2 \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{(n_2+1)^2} \right] \quad (4)$$

$$\tilde{\nu}_{n_2+2} = R_X Z^2 \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{(n_2+2)^2} \right] \quad (5)$$

$$\tilde{\nu}_{n_2+3} = R_X Z^2 \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{(n_2+3)^2} \right] \quad (6)$$

En realidad, podemos escribir estas cuatro ecuaciones de forma más “compacta” como sigue:

$$\tilde{\nu}_{n_2+i} = R_X Z^2 \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{(n_2+i)^2} \right] \quad (7)$$

donde $i=0, 1, 2$ y 3 , y donde $\tilde{\nu}_{n_2+i}$ son los valores de los números de ondas de las líneas, y esto suena sospechosamente a ajuste por mínimos cuadrados. Si representásemos gráficamente los números de ondas $\tilde{\nu}_{n_2+i}$ frente a $1/(n_2+i)^2$, entonces deberíamos obtener una serie de puntos prácticamente alineados en una recta $y = y_0 + mx$ de pendiente negativa $m = -R_X Z^2$ y de ordenada en el origen $y_0 = R_X Z^2/n_1^2$. ¡Fantástico! Esto está hecho. Representamos los puntos, los ajustamos por mínimos cuadrados a una línea recta, y comenzamos a “despejar” incógnitas. Los valores de y son directamente los números de ondas $\tilde{\nu}_{n_2+i}$ y los valores de x vienen dados por la cantidad $1/(n_2+i)^2$. ¡Un momento! Aquí necesitamos el valor de n_2 que todavía no conocemos. Parece que tenemos un problema. Desde luego, podemos “probar” diferentes valores de n_2 hasta que encontremos justamente el que “coloca” los números de ondas en la recta que buscamos. Pero esto no es muy científico. Además, supongamos que n_2 tiene un valor muy elevado. Tendríamos que hacer un montón de pruebas y ajustes. Olvidémoslo y que no se entere nuestro profesor.

Alguien a nuestro lado, que es un poco friki de las matemáticas, nos dice que si identificamos la variable x con el índice $i=0, 1, 2$ y 3 , entonces la ecuación (7) puede escribirse de la forma:

$$y = a - \frac{b}{(c+x)^2} \quad (8)$$

donde $a = R_X Z^2/n_1^2$, $b = R_X Z^2$ y $c = n_2$. Si representamos la cantidad $y = \tilde{\nu}_{n_2+i}$ frente a $x = i$ y ajustamos los puntos a una función como la (8), entonces podremos determinar n_1 , n_2 y $R_X Z^2$ a partir de los valores que obtengamos para los parámetros a , b y c . Vale, pero esto no es un ajuste por mínimos cuadrados a una línea recta, que podríamos hacer incluso con nuestra calculadora de bolsillo. Necesitamos un programa de ordenador, más o menos sofisticado, que nos permita hacer el ajuste, se dice no lineal, que hace falta. Esto se lo encargamos al friki de las matemáticas, y suponemos que también de los ordenadores, y nosotros mientras tanto pensamos en algo más sencillo.

Volvemos a mirar entonces las cuatro ecuaciones que hemos escrito para los números de ondas, las que van de la (3) a la (6), y pensamos que, al fin y al cabo, siguen siendo cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas, así que veamos si podemos despejar directamente las incógnitas, sin más. Para empezar caemos en que si restamos dos de ellas, las que sean, nos qui-

tamos de en medio una de las incógnitas, la n_1 . Restando, por ejemplo, la ecuación (4) a la (3) obtenemos:

$$\Delta\tilde{\nu}_{n_2} = \tilde{\nu}_{n_2+1} - \tilde{\nu}_{n_2} = R_X Z^2 \left[\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{(n_2+1)^2} \right] \quad (9)$$

Esta expresión nos da, como vemos, la diferencia entre las posiciones de las líneas primera y segunda. Seguimos calculando entonces diferencias entre las posiciones de las líneas espectrales consecutivas. Restando la ecuación (5) a la (4) y la (6) a la (5) nos queda:

$$\Delta\tilde{\nu}_{n_2+1} = \tilde{\nu}_{n_2+2} - \tilde{\nu}_{n_2+1} = R_X Z^2 \left[\frac{1}{(n_2+1)^2} - \frac{1}{(n_2+2)^2} \right] \quad (10)$$

y

$$\Delta\tilde{\nu}_{n_2+2} = \tilde{\nu}_{n_2+3} - \tilde{\nu}_{n_2+2} = R_X Z^2 \left[\frac{1}{(n_2+2)^2} - \frac{1}{(n_2+3)^2} \right] \quad (11)$$

Ahora tenemos tres ecuaciones con tres incógnitas, n_2 , R_X y Z , y desarrollando las diferencias que aparecen en ellas entre corchetes, podemos escribirlas como sigue:

$$\Delta\tilde{\nu}_{n_2} = R_X Z^2 \frac{2n_2+1}{n_2^2(n_2+1)^2} \quad (12)$$

$$\Delta\tilde{\nu}_{n_2+1} = R_X Z^2 \frac{2n_2+3}{(n_2+1)^2(n_2+2)^2} \quad (13)$$

$$\Delta\tilde{\nu}_{n_2+2} = R_X Z^2 \frac{2n_2+5}{(n_2+2)^2(n_2+3)^2} \quad (14)$$

Para ir ordenando nuestros datos, construimos una pequeña tabla, que llamamos Tabla 1, donde incluimos los valores de los números de ondas de las líneas y los valores de sus diferencias consecutivas.

Tabla 1. Números de ondas (en cm^{-1}) de las líneas espectrales del átomo hidrogenoide

i	$\tilde{\nu}_i$	$\Delta\tilde{\nu}_i$	$\Delta\tilde{\nu}_{i+1}/\Delta\tilde{\nu}_i$
0	19349	4722	0,6859
1	24071	3239	0,7150
2	27310	2316	
3	29626		

Sigamos despejando incógnitas. Si ahora dividimos entre sí dos de las ecuaciones anteriores, las que sean, entonces nos quitamos de encima $R_X Z^2$, es decir, de golpe dos de las incógnitas, R_X y Z . Ya vamos sospechando a estas alturas que estas dos incógnitas actúan como una sola, el producto $R_X Z^2$, pero seguimos fervientemente en nuestro empeño de eliminar

incógnitas hasta quedarnos con una sola de ellas que podamos despejar, y luego ya veremos. Dividimos entonces, por ejemplo, la ecuación (12) por la (13) y obtenemos:

$$\frac{\Delta\tilde{\nu}_{n_2}}{\Delta\tilde{\nu}_{n_2+1}} = \frac{(2n_2+1)(n_2+2)^2}{(2n_2+3)n_2^2} \quad (15)$$

Pero mira, ya lo tenemos. En esta ecuación aparece únicamente n_2 . El valor de $\Delta\tilde{\nu}_{n_2}/\Delta\tilde{\nu}_{n_2+1}$ lo podemos calcular, y de hecho lo hemos incluido también en la Tabla 1. Solo nos falta despejar n_2 de la ecuación (15) y obtener su valor. Una vez que lo tengamos, daremos marcha atrás en nuestras ecuaciones para calcular el resto de las incógnitas.

Para despejar n_2 de la ecuación (15) comenzamos renombrando el cociente $\Delta\tilde{\nu}_{n_2}/\Delta\tilde{\nu}_{n_2+1}$ de la forma:

$$c = \frac{\Delta\tilde{\nu}_{n_2}}{\Delta\tilde{\nu}_{n_2+1}} \quad (16)$$

Podemos escribir entonces la ecuación (15) como sigue:

$$c(2n_2+3)n_2^2 = (2n_2+1)(n_2+2)^2 \quad (17)$$

y si desarrollamos esta ecuación multiplicando los paréntesis y agrupando los términos que acompañan a las mismas potencias de n_2 (esto lo hacemos en sucio para mostrar que nuestras deducciones son elegantes) obtenemos

$$2(c-1)n_2^3 + 3(c-3)n_2^2 - 12n_2 - 4 = 0 \quad (18)$$

Vaya, es una ecuación cúbica o de tercer grado en n_2 . Parece que no podemos librarnos de las matemáticas. Si fuese una ecuación de segundo grado, sería coser y cantar, más o menos, porque todavía nos acordamos de como se calculan las raíces de una ecuación de segundo grado. Pero de tercer grado... Y el friki de las matemáticas se ha ido a hacer el ajuste no lineal. Espera, ¿y si buscamos en Internet? En Internet está todo ¿no? Tecleamos en el buscador "raíces cúbicas" y ¡bien!, aparecen varias páginas que calculan las raíces de una ecuación cúbica simplemente tecleando sus coeficientes. Vamos allá. El valor de c es 1,4579, y los valores de $2(c-1)$ y $3(c-3)$ que acompañan a las potencias n_2^3 y n_2^2 en la ecuación (18) son 0,9157 y 4,6264. La ecuación cúbica que tenemos que resolver es, por tanto, la siguiente:

$$0,9157n_2^3 + 4,6264n_2^2 - 12n_2 - 4 = 0 \quad (19)$$

Introduciendo los coeficientes en una de las páginas web que hemos encontrado para resolver raíces cúbicas, obtenemos los valores 7,01, -1,56 y -0,40. ¿Cuál de ellas es la correcta? Bueno, es muy fácil porque n_2 tiene que ser un número entero positivo, así que la única posibilidad válida es la primera. No nos ha salido un número entero, pero casi, debido seguramente a que las posiciones medidas de las líneas llevan algún tipo de error experimental, o a los posibles redondeos numéricos de nuestros cálculos. Nos frotamos las manos porque hemos conseguido averiguar que el valor de n_2 es 7. Lo escribimos bien claro, con satisfacción poco contenida:

$$n_2 = 7 \quad (20)$$

Vamos ahora hacia atrás. Sabiendo n_2 , podemos calcular $R_X Z^2$ usando cualquiera de las ecuaciones (12), (13) o (14). Si usamos la (12), por ejemplo, obtenemos:

$$R_X Z^2 = \Delta \tilde{\nu}_{n_2} \frac{n_2^2 (n_2 + 1)^2}{(2n_2 + 1)^2} = 4722 \times \frac{49 \times 64}{15} = 987212,8 \text{ cm}^{-1} \quad (21)$$

y, como sospechábamos, no vemos la manera de separar las incógnitas R_X y Z . Tenemos que pensar un poco más. Lo que queremos saber realmente es a qué átomo hidrogenoide pertenecen las líneas espectrales, y esto nos lo dice directamente el valor del número atómico, o número de protones, Z . Si Z vale 2 se trata de He^+ , si vale 3 es Li^{2+} , si vale 4 es Be^{3+} , y así sucesivamente. ¿Qué ocurre con la constante de Rydberg R_X del átomo hidrogenoide? Sus valores cambian de un átomo hidrogenoide a otro, pero no cambian mucho en realidad. Hicimos un problema en clase en el que vimos que eran muy parecidos, y que al aumentar la masa del núcleo se acercaban rápidamente hacia la constante de Rydberg propiamente dicha, R_∞ , que es la que tendría un átomo hidrogenoide con una masa nuclear infinita, y cuyo valor es $R_\infty = 109737 \text{ cm}^{-1}$. Si usamos este valor para R_X en la ecuación (21) y despejamos Z obtenemos:

$$Z = \left(\frac{987212,8}{109737} \right)^{1/2} = 2,99 \quad (22)$$

¡Genial! No nos ha salido exactamente 3 pero, dadas las circunstancias, como si nos hubiese salido. Escribimos con satisfacción menos contenida aun:

$$Z = 3 \quad (23)$$

Así que nuestro átomo hidrogenoide desconocido que emite radiación procedente de una estrella lejana es Li^{2+} . Y todavía no ha vuelto el friki de las matemáticas con sus cálculos.

Solo nos queda obtener el valor de n_1 . Pero para eso tenemos nuestras ecuaciones originales, de la (3) a la (6), en las que ya sabemos cuales son los valores de n_2 y de $R_X Z^2$. Si tomamos, por ejemplo, la ecuación (3) y despejamos de ella n_1 , nos queda:

$$n_1 = \left(\frac{R_X Z^2}{\tilde{\nu}_{n_2} n_2^2 + R_X Z^2} \right)^{1/2} \quad (24)$$

y sustituyendo aquí los valores de $R_X Z^2 = 987212,8 \text{ cm}^{-1}$, $\tilde{\nu}_{n_2} = 19349 \text{ cm}^{-1}$ y $n_2 = 7$ obtenemos:

$$n_1 = \left(\frac{987212,8}{19349 \times 40 + 987212,8} \right)^{1/2} = (24,995)^{1/2} = 4,999 \quad (25)$$

o sea, directamente

$$n_1 = 5 \quad (26)$$

¡Problema resuelto! Las líneas espectrales proceden del átomo hidrogenoide Li^{2+} , pertenecen a la serie correspondiente a $n_1 = 5$ y corresponden a las transiciones $7 \rightarrow 5$, $8 \rightarrow 5$, $9 \rightarrow 5$ y $10 \rightarrow 5$, tal como mostramos en la Tabla 2.

Para cuando vuelve el friki de las matemáticas, y de los ordenadores, con su ajuste no lineal, ya sabemos la solución, pero como somos amigos suyos, y a veces nos saca realmente de apuros matemáticos más comprometidos, incluimos sus cálculos en el trabajo (véase Figura 2) para que el profesor vea que tenemos recursos y marcarnos, de paso, un puntito de versatilidad, o como se diga.

Tabla 2. Asignaciones de las líneas espectrales del átomo hidrogenoide Li^{2+} .

$n_2 \rightarrow n_1$	$\tilde{\nu}_i$
7 → 5	19349
8 → 5	24071
9 → 5	27310
10 → 5	29626

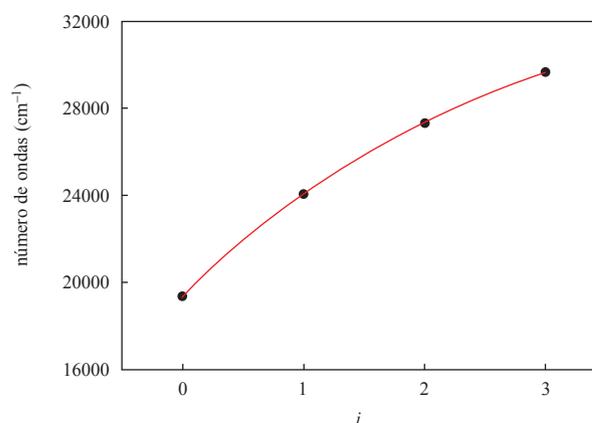


Figura 2. Ajuste no lineal de los números de ondas a la función $y = a - b/(c + x)^2$ donde $y = \tilde{\nu}_{n_2+i}$, $x = i$, $a = R_X Z^2 / n_1^2$, $b = R_X Z^2$ y $c = n_2$. Los valores obtenidos para los parámetros del ajuste son $a = 39587 \text{ cm}^{-1}$, $b = 1003562 \text{ cm}^{-1}$ y $c = 7,04$, de los cuales se obtiene, redondeando a números enteros, $n_1 = 5$, $n_2 = 7$ y $Z = 3$ confirmando la asignación de las líneas espectrales realizada en el trabajo.

Comentario del profesor

La utilización de la fórmula de Rydberg para calcular las longitudes de ondas (o los números de ondas) de las líneas espectrales de los átomos hidrogenoides aparece habitualmente en los libros de Química General,¹⁻⁶ para ilustrar el modelo atómico de Bohr, así como en los libros de Química-Física⁷⁻¹² y de Química Cuántica,^{13,14} para reforzar todavía más el papel clave que tuvo dicha fórmula en el nacimiento de la Mecánica Cuántica y, por supuesto, en los libros de Espectroscopía que incluyen el estudio de los espectros atómicos,¹⁵⁻¹⁹ por razones obvias. Los ejercicios y aplicaciones que se hacen de la fórmula de Rydberg no suelen plantear muchas dificultades, ya que es una fórmula fácil de manejar, una vez que se entiende su significado y su conexión con la estructura de niveles de los átomos hidrogenoides. En ocasiones, sin embargo, como la que describen los alumnos en este artículo, el empleo de la fórmula de Rydberg puede compliarse un poco más de la cuenta.

Desde un punto de vista experimental, está también bastante documentada la práctica de laboratorio en la que se observan las primeras líneas de la serie de Balmer del átomo de hidrógeno en el visible, y se determina posteriormente la constante de Rydberg mediante ajuste por mínimos cuadrados lineal.²⁰⁻³⁰ Yendo un poco más allá, se han descrito recientemente un par de enfoques pedagógicos adicionales de esta práctica. En el primero de ellos,²⁰ los alumnos prueban distintos tipos de representaciones gráficas de la longitud de onda de las líneas frente al número cuántico n_2 hasta dar con la correcta, y en el segundo²² realizan un ajuste no lineal, similar al empleado por el friki de las matemáticas en este trabajo, para identificar correctamente las líneas de la serie de Balmer. Otra posibilidad consiste en medir la primera línea de esta serie para el hidrógeno y para el isótopo de deuterio, y calcular a partir de la separación de las mismas, el cociente entre las masas del protón y del núcleo del deuterio, el deuterón.²⁴

Tomando como punto de partida la fórmula de Rydberg, se han planteado también cuestiones interesantes como, por ejemplo, averiguar si las series espectrales de los átomos hidrogenoides llegan, o no, a solaparse y, en su caso, cuando lo hacen,³¹ o estimar el tamaño que pueden llegar a tener los átomos de hidrógeno en el espacio interestelar usando la información espectroscópica que puede recogerse sobre los mismos.^{32,33} La detección espectroscópica de átomos hidrogenoides en el espacio es, ciertamente, lo que se ha utilizado como reclamo en este artículo para propiciar el trabajo de los alumnos, pero no hemos entrado en ella con más detalle porque esa es otra historia que merece ser contada en otro momento.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado parcialmente por el Ministerio de Ciencia e Innovación, proyectos CTQ2011-25872 y CONSOLIDER CSD2009-00038, y por la Fundación Séneca del Centro de Coordinación de la Investigación de la Región de Murcia, proyecto 08735/PI/08.

Bibliografía

1. P. Atkins, L. Jones, *Principios de Química. Los Caminos del Descubrimiento*, Ed. Médica Panamericana, Buenos Aires, **2012**.
2. R. H. Petrucci, F. G. Herring, J.D. Machura, C. Bissonette, *Química General*, Prentice Hall, Madrid, **2011**.
3. R. Chang, *Química*, McGraw-Hill Interamericana, México, **2010**.
4. J. W. Moore, C. L. Stanitski, J. L. Wood, J. C. Kotz, *El Mundo de la Química: Conceptos y Aplicaciones*, Addison Wesley Longman, México, **2010**.
5. T. L. Brown, H. E. Lemay, B. E. Bursten, C. J. Murphy, *Química. La Ciencia Central*, Pearson Education, México, **2009**.
6. M. D. Reboiras, *Química. La Ciencia Básica*, Thompson Editores Spain, Madrid, **2006**.
7. P. W. Atkins, *Química Física*, Ediciones Omega, Barcelona, **1999**.
8. K. J. Laidler, J. H. Maser, *Physical Chemistry*, Houghton Mifflin, Boston, **1999**.
9. R. S. Berry, S. A. Rice, J. Ross, *Physical Chemistry*, Oxford University Press, New York, **2000**.
10. L. M. Raff, *Principles of Physical Chemistry*, Prentice Hall, New York, **2001**.
11. I. N. Levine, *FísicoQuímica*, McGraw-Hill, Madrid, **2004**.
12. T. Ángel, P. Reid, *Química Física*, Pearson Education, Madrid, **2006**.
13. D. A. McQuarrie, *Quantum Chemistry*, University Science Books, California, **2007**.
14. I. N. Levine, *Química Cuántica*, Prentice Hall, Madrid, **2001**.
15. A. Requena, J. Zúñiga, *Espectroscopía*, Prentice Hall, Madrid, **2004**.
16. J. M. Hollas, *Basic Atomic y Molecular Spectroscopy*, Wiley-Interscience, Royal Society of Chemistry, **2002**.
17. T. P. Softley, *Atomic Spectra*, Oxford Chemistry Primers 19, Oxford University Press, Oxford, **1994**.
18. P. F. Bernath, *Spectra of Atoms y Molecules*, Oxford University Press, New York, **1995**.
19. S. Svanberg, *Atomic y Molecular Spectroscopy*, Springer-Verlag, Berlin, **2001**.
20. A. M. R.P. Bopegedera, *J. Chem. Educ.* **2011**, *88*, 77–81.
21. S. R. Goode, L. A. Metz, *J. Chem. Educ.* **2003**, *80*, 1455–1459.
22. B. R. Ramachyran, A. M. Halpern, *J. Chem. Educ.* **1999**, *76*, 1266–1268.
23. M. E. M. Piedade, M. N. B. Santos, *J. Chem. Educ.* **1998**, *75*, 1013–1017.
24. L. K. Khundkar, *J. Chem. Educ.* **1996**, *73*, 1055–1056.
25. G. C. Shields, M. M. Kash, *J. Chem. Educ.* **1992**, *69*, 329–331.
26. E. Reiss, *J. Chem. Educ.* **1988**, *65*, 517–518.
27. J. Douglas, E. L. Nagy-Felsobuki, *J. Chem. Educ.* **1987**, *64*, 552–553.
28. M. Rappon, J. M. Greer, *J. Chem. Educ.* **1987**, *64*, 453–456.
29. A. Companion, K. Schug, *J. Chem. Educ.* **1966**, *43*, 591.
30. J. L. Hollenberg, *J. Chem. Educ.* **1966**, *43*, 216.
31. D. W. Ball, *J. Chem. Educ.* **2006**, *83*, 883–884.
32. D. B. Clark, *J. Chem. Educ.* **1991**, *68*, 454–455.
33. D. B. Clark, *J. Chem. Educ.* **1992**, *69*, 946.

Estrategias didácticas para la promoción de la química en la enseñanza secundaria y bachillerato

Sergio Menargues, Amparo Gómez-Siurana

Resumen: El alarmante descenso del número de alumnos que estudian química en bachillerato hace necesaria la búsqueda de herramientas para recuperar los niveles de finales de la pasada década. Los autores proponen algunas estrategias, aplicables en todos los niveles de enseñanza no universitaria, que van desde experiencias de laboratorio para alumnos de primaria, hasta la creación de una serie de personajes de ficción, que intervienen en los enunciados de los problemas de química, poner a disposición de los alumnos colecciones de problemas resueltos y la participación en pruebas como las olimpiadas de química.

Palabras clave: Laboratorio mágico, Olimpiada de Química, didáctica de la química, problemas resueltos.

Abstract: The noticeable decrease of the number of high school chemistry students suggests the need of developing strategies in order to achieve the levels of the past decade. In this work, some tools, applicable from the first educative levels to secondary and high school, are proposed. These strategies include the design of fun laboratory experiments for 6-7 year children, the creation of a peculiar team of researchers involved in the problems proposed to students, the availability of solved problems collections or taking part in external competitions, as the Chemistry Olympiad.

Keywords: Magic laboratory, Chemistry Olympiad, didactic of chemistry, solved problems.

Introducción

En los últimos años ha descendido de forma alarmante el número de alumnos que eligen la asignatura de química en 2º de bachillerato.¹ Entre las posibles razones podría encontrarse la supuesta dificultad intrínseca de esta asignatura frente a otras más asequibles para ellos, que hace que a la hora de elegir las materias optativas, éstos se decanten por otras que les suponen menos esfuerzo y, en ocasiones, calificaciones más altas. Por otro lado, el hecho de que se asocie la química exclusivamente a la opción de “Ciencias de la Salud” provoca que muchos alumnos que van a estudiar ingenierías, y que no reciben una buena orientación desde sus centros, no la consideren una materia útil para su formación posterior. Tampoco ayuda el que en algunas universidades la nota del examen de química en las Pruebas de Acceso a la Universidad (PAU) pondere con un factor de 0,1 a la hora de calcular las notas de acceso para los grados de ingeniería.

Este descenso tiene dos consecuencias directas: en primer lugar, la disminución del número de estudiantes que cursan los grados de Química o de Ingeniería Química en las universidades españolas, con la consecuente reducción de la cantidad de nuevos profesionales, bien formados en este campo, que son fundamentales para el futuro y desarrollo del país, y, en segundo lugar, la falta de una “cultura general en química” en la sociedad que lleva a un desconocimiento de las implicaciones de la química en la vida cotidiana, en los bienes de consumo y en definitiva, en todo lo que contribuye al estado del bienestar y a la propia vida. En este sentido, las actividades de divulgación que se emprenden desde las universidades, asociaciones y colegios profesionales, o a título individual por parte de algunos profesores,² son de gran utilidad para contrarrestar la parte negativa o tendenciosa de anuncios publicitarios y supuestos “gurús” de opinión que fundamentan sus mensajes bajo el eslogan de que “esto no tiene química”.³

Ante esta situación, cabe plantearse qué podemos hacer los químicos. En opinión de los autores, aquéllos que se dedican a la docencia de la química sí pueden aportar su granito de arena para intentar hacer de la química una disciplina atractiva y amena para los estudiantes. En este artículo se proponen algunas acciones que han sido desarrolladas con éxito y que no requieren más que una implicación activa por parte del profesorado.

Metodología

De acuerdo con lo expuesto en la introducción, se propone una estrategia que abarca los tres niveles de enseñanza no universitaria en España: primaria, secundaria y bachillerato. El objetivo último es que el interés por la química pueda despertarse en los alumnos de un nivel contribuya a incrementar el número de estudiantes que optan por la química en el nivel inmediatamente superior.



S. Menargues¹



A. Gómez-Siurana²

¹ Colegio HH. Maristas Alicante
C/ Isla de Corfú, 5. 03005 Alicante
C-e: aigorkimika@gmail.com

² Dpto. Ingeniería Química. Universidad de Alicante
Ap. 99. 03080 Alicante.

Recibido: 13/05/2013. Aceptado 22/05/2013.

El punto de partida se encuentra en la realización de actividades con los más pequeños (6-7 años) en las que se les dé a conocer qué es la química, a través de una serie de experimentos vistosos, que despierten su interés y las ganas de introducirse en ese mundo, nuevo y mágico para ellos.

En un segundo nivel, se trata de diseñar estrategias educativas más o menos innovadoras en las que se haga que los estudiantes se impliquen en diversos proyectos educativos o de investigación. Esto puede hacerse dentro de una asignatura de “Proyecto de Investigación”, dentro de las propias asignaturas de Química y Técnicas de Laboratorio o incluso de manera extracurricular. En este nivel puede resultar muy estimulante la participación en certámenes, congresos de estudiantes, sesiones científicas, etc.; que organizan diversos centros e instituciones dedicados a alumnos de ESO con el fin de fomentar las vocaciones científicas.

Finalmente, en un tercer nivel, se encuentra la posibilidad de fomentar la participación de los estudiantes de bachillerato en competiciones como las olimpiadas de química que aumentan el interés por el estudio de esta materia e impulsan y estimulan el espíritu de superación al tener que competir con alumnos de otros centros y ciudades. Por otro lado, el éxito en pruebas de este tipo, así como el interés por la química puede verse muy estimulado si se pone a disposición de los alumnos colecciones de problemas resueltos y explicados, que faciliten y den garantías para el aprendizaje autónomo.⁴⁻⁶

Actividades para alumnos de primaria: el laboratorio mágico

Una experiencia muy satisfactoria es la realización de prácticas de laboratorio demostrativas con alumnos de 1º y 2º de primaria⁷. Desde hace varios años, uno de los autores de este artículo planifica sesiones de “química mágica” en las que los alumnos visitan el “Laboratorio del profesor Deveraux” (un personaje de ficción con el que se encontrarán cuando estudien química en los cursos de secundaria y bachillerato) y participan en la preparación de experimentos muy llamativos: *la sangre del dragón* (formación del complejo de tiocianato de hierro (III)), *la pasta de dientes para elefantes* (reacción entre ioduro de potasio y peróxido de hidrógeno con unas gotas de detergente), *el fuego verde* (la llama del metanol con ácido bórico), *el volcán* (el vapor que sale de un gran matraz Erlenmeyer que contiene peróxido de hidrógeno con permanganato de potasio), etc. En estas sesiones, el ayudante del profesor Deveraux (el profesor de química) elige, haciendo unas sencillas preguntas, a sus colaboradores, a los que reviste con “guantes mágicos” y les transmite “la magia” necesaria para poder realizar sus experimentos. Evidentemente, en estas sesiones no se explica nada de química. El único objetivo es que asocien la palabra “química” con algo divertido y llamativo. Una vez que los alumnos han tenido su primera sesión de “laboratorio mágico”, la única condición que han de cumplir para poder volver al laboratorio es que lo hagan con un dibujo del experimento que más les haya gustado.

El resultado es una fantástica colección de dibujos, algunos de cuales se muestran en la Figura 1, y la impagable sensación de ir por la calle y que un niño/a pequeño/a diga a su acompañante “mira ese es el profesor de química” a la que vez que te

saludan agitando la mano y mirándote con un brillo especial en los ojos. Es de destacar cómo, en el poco tiempo que ellos permanecen en el laboratorio, son capaces de identificar en estos dibujos elementos e instrumentos propios de un laboratorio de química (ducha de emergencia, trompa de vacío, matraces, probetas, grifos, pipetas, espátulas, armarios, mecheros Bunsen, frascos de reactivos, desagües, guantes, etc.), que incluso en algunos casos van identificados por sus nombres, aunque algunas veces lo han escrito de manera graciosa: *Elermeyer*, *Qimica*, *Aboratorio de Experimentos*, *Cubo de Ensallos*, etc.



Figura 1. Dibujos del Laboratorio Mágico realizados por alumnos de 1º y 2º de primaria.

Actividades para alumnos de secundaria: realización de proyectos de investigación

Una experiencia muy interesante consiste en involucrar a los estudiantes de secundaria en pequeños proyectos de investigación, en los que han de realizar algún tipo de desarrollo experimental que les permita obtener unos resultados que les proporcione una información útil o interesante. La implicación de los alumnos en estas actividades se ve muy incentivada cuando los proyectos se enmarcan en algún tipo de competición que les puede reportar algún premio. En este sentido, se requiere que el profesorado se preocupe de recabar información sobre las iniciativas que se plantean desde diversos centros y organismos para fomentar el conocimiento de la química o la ingeniería química. Por ejemplo, el *Instituto Universitario de Ingeniería de los Procesos Químicos de la Universidad de Alicante* convoca, desde hace varios años, un Certamen de Proyectos Educativos de Ingeniería Química ⁸ dirigido a alumnos de 3º y 4º de ESO, en el que éstos desarrollan pequeños trabajos de investigación que luego presentan en forma de póster o de comunicación oral en una jornada que se celebra en la propia universidad. En la Figura 2 se muestra el cartel anunciador del certamen. Algunos de los proyectos con los que se ha participado con éxito –tanto por los resultados obtenidos como por el grado de satisfacción de los estudiantes– han consistido en “Destilación: obtención de etanol a partir de vino”, “Aguas residuales en la industria de tintes y acabados textiles” y “Rectificación: obtención de los componentes de una gasolina”. Este tipo de actividades resulta especialmente interesante en el caso de grupos de diversificación curricular, y puede servir para involucrar en sus estudios a alumnos que, de otra manera, permanecen apáticos o desinteresados.



Figura 2. Cartel anunciador del Certamen de Proyectos Educativos de Ingeniería Química que convoca el I.U. de Ingeniería de Procesos Químicos de la Universidad de Alicante.

Actividades para alumnos de secundaria y bachillerato: los problemas del profesor Deveraux

Una línea de actuación que se puede seguir a lo largo de las sucesivas asignaturas de química en ESO y en bachillerato y que ha dado muy buenos resultados, es la creación de un peculiar grupo de químicos que inspira muchos de los problemas que uno de los autores propone a sus alumnos en los exámenes de química.⁹ Este grupo está integrado por un serio profesor de química (el profesor Sergei Deveraux), su fiel e inepto ayudante Aigor (inspirado en el personaje creado por Mel Brooks en la película *El jovencito Frankenstein*), la inefable becaria Pepita Borderline y el técnico de laboratorio Manolo von Vortex (basados en personajes reales).

Estos personajes plantean al alumno situaciones químicas que pretenden ser cotidianas, reales o inventadas, que a veces rozan lo absurdo, siempre bajo un tono humorístico, sarcástico o irónico y a veces incluso con moraleja. De esta manera se proponen escenarios en los que surge algún problema de química básica que el estudiante debe resolver, a la vez que tratan de arrancarle una sonrisa y haciéndole ver que uno se puede divertir resolviendo problemas de química. Hay que decir que, en alguna ocasión, el equipo del profesor Deveraux ha llegado incluso a la universidad para plantear alguno de sus problemas a alumnos de 5º curso de Ingeniería Química.

Para fomentar la implicación de los alumnos en esta actividad, durante la semana de noviembre, en la que celebra la festividad de San Alberto Magno, además de preparar chocolate en el laboratorio con vasos de precipitados y mecheros Bunsen, éstos participan en un “Concurso de Redacción de Problemas del Profesor Deveraux” en los que proponen y resuelven sus propios ejercicios. Los alumnos autores de los problemas ganadores consiguen un incremento en la calificación de la asignatura y, además, estos problemas irán apareciendo en los diferentes exámenes que realicen a lo largo del curso.

A continuación se muestra un ejemplo de enunciado de este tipo de problemas:

Al duro pero sensible teniente del CSI de Miami Dade Horatio Caine se le ha presentado un caso que lleva de cabeza a él y a todo su equipo, sacar pruebas de un calcetín lleno de babas que han encontrado en el vestuario del gimnasio “Bodiguai”. Para resolver el caso, H. ha contactado con su viejo amigo el profesor Sergei Deveraux, un especialista en babas (ya que ideó un método para neutralizar las que dejaba un compañero suyo por los pasillos y que más de una vez le hicieron resbalar). Horatio ha enviado el calcetín baboso al profesor con un mensajero, en un contenedor especial etiquetado con el pictograma T+.

El profesor ha encargado a Aigor, su fiel e inepto ayudante, a Pepita Borderline, la inefable becaria, y al técnico de laboratorio Manolo von Vortex que siguiendo el protocolo X-500 de extracción de muestras peligrosas ideado por el profesor, saquen una muestra del calcetín y la analicen. El resultado que Aigor, Pepita y Manolo han dado al profesor es el siguiente:

1. *En la baba misteriosa han aislado un compuesto X que tiene origen orgánico y que está formado por los elementos carbono, hidrógeno y oxígeno.*

2. En un ensayo analítico han quemado totalmente 0,530 g del compuesto X y han obtenido 0,777 g de dióxido de carbono y 0,318 g de agua.
 3. Una disolución acuosa del compuesto X tiene un pH de 2,2.
 4. Una muestra de 0,530 g del compuesto X se ha neutralizado exactamente con 26,5 mL de disolución de hidróxido de sodio 0,222 M utilizando fenolftaleína como indicador.
 - a. Determina las fórmulas empírica y molecular del compuesto X.
 - b. Escribe, al menos, dos posibles fórmulas estructurales, con su nombre, que puedan corresponderse con el misterioso compuesto X.
- Posteriormente, Aigor y Pepita han hecho reaccionar 2,006 g del compuesto X con metanol y han obtenido un compuesto de olor agradable con el que han decidido fabricar un perfume “Eau de Babás”.
- c. Escribe la ecuación química correspondiente a la reacción entre el compuesto X y el metanol e identifica las sustancias que intervienen en la misma.
 - d. Si en la reacción han obtenido 1,989 g del compuesto de olor agradable, ¿cuál ha sido el rendimiento del proceso?

Datos. Masas (g/mol): C = 12, H = 1, O = 16.

Epílogo: gracias a la ayuda del profesor y su equipo, Horatio ha conseguido resolver el caso y ha puesto al criminal a buen recaudo. “Los malos nunca ganan”.

Con estos enunciados, además de generar corrientes de simpatía y complicidad, se busca fomentar en los estudiantes la capacidad de discriminar entre los datos superfluos y los necesarios para la resolución del problema, la capacidad de analizar un texto y sintetizarlo, extrayendo la información fundamental y, finalmente, combinar en un único problema conceptos de temas diferentes del currículum de química, lo que les ayuda a entender que los sucesivos conceptos que van adquiriendo no deben “guardarse” en compartimentos estancos, de donde los sacan cuando les han de examinar del tema correspondiente.

Actividades para alumnos de bachillerato: participación en iniciativas didácticas organizadas por organismos externos

La oferta de actividades de este tipo es más amplia para alumnos de bachillerato que de ESO, y requiere que el profesor esté pendiente de las diferentes convocatorias de proyectos relacionados con la química. Por ejemplo, el concurso *Reacciona*¹⁰ convocado por la Ciudad de las Artes y las Ciencias de Valencia, Generalitat Valenciana, Real Sociedad

Española de Química, la Universidad Politécnica de Valencia y la Universidad de Valencia, en cuya primera edición resultaron ganadoras en la modalidad de bachillerato las alumnas Lucía Matarredona y Marina Quiles, con un proyecto titulado “Química para la Vida”. En la segunda edición ha sido premiado, en la misma modalidad, el vídeo “Hay química en el ambiente...REACCIONA” realizado por Laura Gutiérrez, Teresa Font y Miguel A. Auladell. Todos estos estudiantes han sido tutorizados por uno de los autores de este artículo y habían participado cuando cursaban 3º o 4º de ESO en alguna de las actividades mencionadas anteriormente, lo que pone de manifiesto la utilidad y el éxito de estas iniciativas. En la Figura 3 se muestra el cartel anunciador del certamen.



Figura 3. Logo del concurso *Reacciona* organizado por la Ciudad de las Artes y Las Ciencias.

También ha resultado muy interesante la participación de alumnos de bachillerato con algún póster o presentación oral en otras actividades, tales como Las Jornadas de la Enseñanza de la Química organizadas por ANQUE, el I y II Congreso de Estudiantes de Ingeniería Química de la Universidad de Alicante, I Congreso de Estudiantes de Química de la Universidad de Alicante y I Congreso de Estudiantes de Química de la Comunidad Valenciana. Hay que señalar que si bien algunos de estos congresos están destinados a alumnos universitarios, si se acude a los comités organizadores y se les propone la participación de alumnos de bachillerato con alguna comunicación interesante, suelen aceptarlo de buen grado. Por ejemplo, en el II Congreso de Estudiantes de Ingeniería Química de la Universidad de Alicante, grupos de alumnos de 2º Bachillerato participaron con comunicaciones orales en las que expusieron los resultados y las conclusiones obtenidas en la caracterización por destilación de una serie de combustibles fósiles o en la extracción de los metales nobles de catalizadores gastados de automóviles.

Finalmente, una experiencia bastante exitosa ha sido proponer a los alumnos de 1º y 2º de bachillerato, así como algún alumno aventajado de 4º de ESO, que lo desean la posibilidad de recibir una preparación de forma extracurricular, durante dos tardes a la semana, para participar en la fase local de las Olimpiadas de Química.

Para ello se les proporciona una colección de más de 3600 cuestiones y problemas resueltos y explicados¹¹⁻¹³ en la que los autores y el profesor Fernando Latre han recopilado y resuelto ejercicios de las pruebas de las fases locales y nacionales de la Olimpiada de Química desde el año 1996. Los ejercicios se encuentran clasificados y agrupados por temas, y ordenados cronológicamente, en una colección de 6 volúmenes, que van creciendo cada año, por la incorporación de los ejercicios de cada nueva edición de la olimpiada química nacional y de las olimpiadas locales que nos envían profesos-

res de diferentes comunidades autónomas. La distribución de los mismos es la siguiente:

1. Estequiometría (734 cuestiones y 224 problemas)
2. Termoquímica, Cinética y Equilibrio (599 cuestiones y 213 problemas)
3. Ácido-Base, Precipitación y Electroquímica (472 cuestiones y 118 problemas)
4. Estructura Atómica, Sistema Periódico y Geometría Molecular (669 cuestiones y 119 problemas)
5. Enlace y Propiedades, Química Orgánica, Química Nuclear y Laboratorio (401 cuestiones y 51 problemas)
6. Problemas de Olimpiadas Nacionales (70 problemas)

En la Figura 4 se muestra la portada de uno de los seis libros de la colección.



Figura 4. Portada del volumen 3 correspondiente a los temas de ácido-base, precipitación y electroquímica.

Esta colección se encuentra disponible en abierto, para su consulta y descarga por cualquier profesor o alumno que desee consultarla y utilizarla y ha sido muy bien valorada por todos los que han accedido a ella. Esta recopilación de problemas se encuentra accesible en las direcciones de Internet mencionadas¹¹⁻¹³ y, además, se actualiza prácticamente a diario con la adición de nuevos ejercicios y corrección de erratas

en una carpeta de Dropbox, a la que se puede acceder solicitándose a uno de los autores a través del correo electrónico aigorkimika@gmail.com.

La difusión a nivel nacional de esta colección, a través del “boca a boca” ha facilitado que haya sido utilizada como material de estudio por parte de alumnos procedentes de universidades y centros ajenos a los autores que, finalmente, han resultado ganadores de la fase nacional. En lo que se refiere a la fase local de la Universidad de Alicante, ha facilitado la clasificación de 19 alumnos durante los últimos 10 años, que han obtenido 7 medallas de bronce, 2 de plata y 2 de oro en la fase nacional, una mención de honor en la fase internacional y una medalla de bronce en la fase iberoamericana. En la Figura 5 se muestra a los ganadores de XXII Olimpiada Nacional de Química celebrada en Ávila en el año 2009.

Estos resultados representan un estímulo para los estudiantes de cada nueva promoción, que ven la posibilidad de clasificarse como algo accesible y se animan a implicarse en la preparación extracurricular, con el objetivo de tratar de superar a las promociones precedentes y, en cualquier caso, son conscientes de que la formación que reciben les ayuda a mejorar su nota de acceso a la universidad en la P.A.U., a obtener una mejor situación de partida para el acceso a los estudios que desean cursar, especialmente cuando el acceso está limitado y, finalmente, una formación básica que les ayuda a abordar con confianza la química de los primeros cursos de grado.



Figura 5. Luca Scheneller-Pavelescu (segundo por la derecha) ganador de la 2ª medalla de oro en la XXII Olimpiada Nacional de Química del 2009.

Conclusiones

Como resultado final de todas estas acciones cabe destacar que, en este periodo de tiempo, alrededor del 4% de los alumnos de un mismo centro que han participado en alguna de las actividades propuestas han cursado o están cursando en la actualidad las titulaciones o los grados de Química e Ingeniería Química. Podría argumentarse que estos resultados no son especialmente destacables, pero si se tiene en cuenta que, en ese mismo centro, el número de alumnos que estudian química en bachillerato ha descendido casi en un 70% en los últimos años (se ha pasado de tres grupos de más de

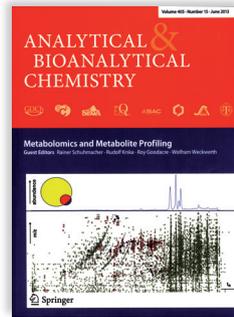
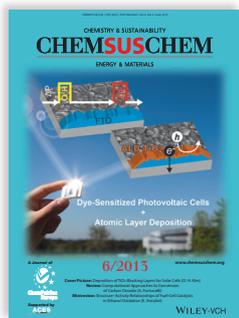
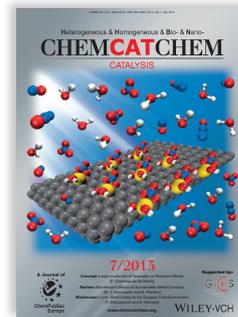
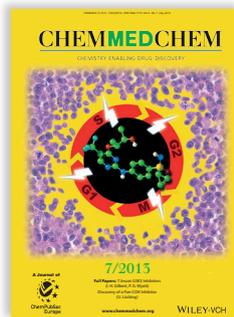
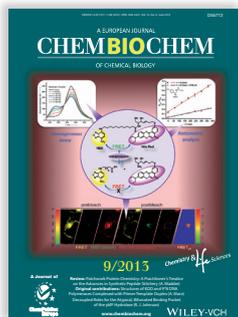
30 alumnos en COU en los años 90 a un único grupo en la actualidad), los resultados obtenidos son alentadores y cabe esperar que se pueda registrar un remonte durante los próximos años como consecuencia de las actividades realizadas con los más pequeños.

De momento, lo que sí se puede afirmar es que con estas actividades sí que se consigue un aumento del interés de los alumnos por la química como una disciplina básica para su formación futura, así como el mantenimiento del flujo de estudiantes que optan por titulaciones de Química e Ingeniería Química.

Bibliografía

1. <http://bit.ly/19hUooy>, visitada el 19/06/2013.
2. <http://cmans.wordpress.com/>, visitada el 19/06/2013.
3. J. M. Mulet, *Anales Quim.* **2012**, *108*, 263–267.
4. S. Menargues Irles, A. Gómez Siurana, *20 años de problemas y cuestiones de química en las pruebas de acceso a la Universidad de Alicante*, Publicaciones U.A., Alicante, **2007**.
5. S. Menargues Irles, F. Latre David, A. Gómez Siurana, *Problemas y cuestiones de las Olimpiadas de Química de la Comunidad Valenciana*, Publicaciones U.A., Alicante, **2009**.
6. A. Gómez Siurana, S Menargues Irles, *Problemas de Química General*, Publicaciones U.A., Alicante, **1992**.
7. <http://bit.ly/19hVfFE>, visitada el 19/06/2013.
8. <http://iipq.ua.es/es/otras-actividades.html>, visitada el 19/06/2013.
9. S. Menargues Irles, A. Gómez Siurana, *Quím. Ind.* **2008**, *575*, 43.
10. <http://www.cac.es/reacciona>, visitada el 19/06/2013.
11. <http://bit.ly/19QioZ2>, visitada el 19/06/2013.
12. <http://bit.ly/11NGsNR>, visitada el 19/06/2013.
13. <http://bit.ly/KgF9Rc>, visitada el 19/06/2013.

Revistas patrocinadas por la RSEQ



Química para un futuro mejor: reseñas de la XXXIV Biental de la Real Sociedad Española de Química

La XXXIV Reunion Biental de la RSEQ en Santander se ha estructurado alrededor de 10 simposios desarrollados en la ETSIIyT de la Universidad de Cantabria en el periodo comprendido entre el 15 y el 18 de septiembre de 2013. Los simposios se han programado bajo la coordinación de investigadores de reconocido prestigio, que se pueden consultar en el libro de resúmenes.

La reunión bienal ha tenido como lema “*Química para un Futuro Común*” y por ello hemos dedicado el 0,7% del presupuesto a promover las actividades de dos reconocidas ONGs con cuyas tarjetas hemos agradecido la colaboración de nuestros conferenciantes invitados.

Las actividades programadas han ocupado 72 sesiones de trabajo donde se han debatido más de 400 comunicaciones orales y más de 450 carteles. El congreso ha contado con 956 personas inscritas, de las cuales aproximadamente el 50% son jóvenes investigadores, índice indiscutible de la gran aceptación de la programación realizada.

Además de las presentaciones orales y carteles uno de los mayores atractivos de esta bienal han sido las conferencias plenarias. El premio Nobel de Química 2005, profesor Robert H. Grubbs del Instituto de Tecnología de California (EEUU), se encargó de impartir la conferencia de apertura. El lunes, la bienal contó con el galardonado con el premio Elhuyar Goldsmidt 2011, el profesor Alois Fürstner del Instituto Max-Planck (Alemania), y con el Presidente de la Federación Europea de Ingeniería Química (EFCE), profesor Richard Darton, de la Universidad de Oxford (Reino Unido). El martes impartieron conferencias plenarias dos de los principales exponentes de la investigación española en Química,



El profesor Luis Oro, presidente del Comité Científico, hace entrega de la insignia de la RSEQ al profesor Grubbs.

la profesora María Vallet-Regí y el profesor Nazario Martín, ambos de la Universidad Complutense de Madrid. La conferencia plenaria de clausura tuvo lugar el miércoles día 18 y correspondió al Presidente de la IUPAC, profesor Kazuyuki Tatsumi de la Universidad de Nagoya (Japón).

En la sesión de clausura merece destacarse la nominación de A Coruña como la sede de la Biental de la RSEQ 2015, y la concesión de los Premios Wiley a los mejores carteles de Química Inorgánica, que recayó en un grupo de la Universidad de Granada; de Química Orgánica que se fue a la Universitat Rovira i Virgili; y de Ingeniería Química que correspondió al grupo de la Universidad de Las Palmas de Gran Canaria.



Miembros del Comité Organizador Local con (de izquierda a derecha) Jesús Jiménez Barbero, Robert Grubbs, Ángel Irabien y Luis Oro.



Sesión de apertura de la XXXIV Bienal de la RSEQ.

Esta Reunión ha sido posible por el trabajo, dedicación y esfuerzo del Comité Ejecutivo de la RSEQ constituido por Jesús Jiménez Barbero, Pedro Pérez Romero y Sonsoles Martín Santamaría y con la colaboración del Comité Local constituido por Ángel Irabien, Raquel Ibañez, Carmen Blanco, Enrique Álvarez-Guerra y Gabriel Zarca-Lago.

Una mención especial merecen los patrocinadores de Platino (Dynasol/Fundación Repsol), de Oro (Brucker, Lilly y Agilent Technologies) y de Plata [Solvay, Vertex, Scharlab, Aditya Birla (Gajano), Waters y Sigma Aldrich], así como Janssen, Wiley y numerosas organizaciones locales.

Como memoria de la reunión se ha publicado un documento electrónico (ISBN: 978-84-695-8511-5. Depósito Legal: SA-510-2013) editado por los organizadores con los resúmenes de las comunicaciones presentadas que muestran el panorama en 2013 de los principales resultados de la I+D+i española en el campo de la química y de la ingeniería química en el último bienio. Así mismo, se ha previsto la publicación de un número especial de la revista CTMC (*Current Topics in Medicinal Chemistry*) editado por Sonsoles Martín Santamaría y Pilar Goya Laza.

En resumen, un gran éxito de participación y calidad que permite visualizar el excelente estado de la investigación en química a pesar de las dificultades económicas y de las deficiencias de planificación con las que se encuentra la I+D+i en España.

Remitido por: **Ángel Irabien**,
Presidente del Comité Ejecutivo Local

Simposio de “Ingeniería química, medioambiente y energía” (IQ/MAMB)

Este simposio, celebrado dentro de la XXXIV Reunión Bienal de la RSEQ, ha sido el marco de debate de más de 150 investigadores. Durante tres días de trabajo se han celebrado ocho sesiones con la participación de 16 conferencias, impartidas por conferenciantes invitados, y de 46 presentaciones orales. Así mismo, se han discutido 72 presentaciones en forma de póster. El simposio, coordinado por los miembros del Comité Científico de la XXXIV Reunión Bienal, Arturo Romero Salvador (UCM) y Juan José Rodríguez Jiménez (UAM), ha combinado la participación de investigadores de reconocido prestigio con un gran número de jóvenes investigadores, convirtiéndose en una eficaz plataforma para el intercambio de conocimiento y para la interrelación entre los miembros de la comunidad científica en el ámbito de la ingeniería química, del medioambiente y la energía.

A través de las conferencias, impartidas por los profesores A. Arce (USC), J. García (UA), T. Cordero (UMA), D. P. Serrano (URJC), I. Ortiz (UC), G. Orcajo (URJC), E. Martín (USAL), J. Palomar (UAM), G. Villoria (UM), A. Galindo (Imperial College London), A. Santos (UCM), E. García (UAH), J. Ortega (ULPGC), S. Ordoñez (UNIOVI), J. Bilbao (EPV/EHU) y J. Adánez (CSIC), se ha presentado una excelente visión del estado del arte en temas de la máxima actualidad. Así, se trataron aspectos como el binomio agua-energía, el desarrollo y aplicación de líquidos iónicos, los avances en las tecnologías de membranas, el desarrollo de nuevas fuentes de energía basadas en el aprovechamiento de la biomasa y los residuos plásticos, la obtención de nuevos recursos hídricos, el conocimiento en profundidad



Conferencia durante el simposio IQ/MAMB.

de los procesos de oxidación avanzada para el tratamiento de las aguas, la combustión con captura de CO₂, el desarrollo y aplicación de nuevos catalizadores o la concepción de modelos termodinámicos y su utilidad en el ámbito de ingeniería química. Aspectos más detallados sobre la actividad de investigación que dentro de estos campos desarrollan los grupos españoles se han discutido a través de las comunicaciones orales y pósteres presentados en el simposio.

Remitido por: **Raquel Ibañez** (Universidad de Cantabria),
Daniel Gorri (Universidad de Cantabria),
Juan J. Rodríguez (Universidad Autónoma de Madrid)
y **Arturo Romero** (Universidad Complutense de Madrid).

Simposio de “Química inorgánica, química del estado sólido y cristalografía” (INOR)

El simposio INOR se desarrolló en seis sesiones de dos horas cada una, cinco de ellas dedicadas a presentaciones orales y, la última, orientada a la presentación y discusión de los pósteres, para dar tiempo a los jóvenes investigadores a defender sus trabajos. Durante las sesiones orales se presentaron conferencias de media hora de duración a cargo de seis investigadores propuestos por los grupos especializados, además de una conferencia del investigador galardonado con el premio de la especialidad en química inorgánica, que recayó en el profesor Teófilo Rojo de la Universidad del País Vasco. Se presentaron también 17 comunicaciones orales de 15 minutos. El número de carteles presentados en este simposio fue de 45.

Los conferenciantes invitados fueron L. M. Liz-Marzán (CIC biomaGUNE), A. Martín (UAH), A. Demourgues (CNRS-Université de Bordeaux), A. Fuentes (ICMAB-CSIC, Barcelona), F. J. Lahoz (CSIC, Zaragoza), y M. Armand (CIC energiGUNE), que impartieron conferencias de temáticas variadas.

Así mientras el Dr. Liz-Marzán habló sobre quiralidad nanoplasmódica y el Dr. A. Martín sobre complejos metalato, el Dr. A. Demourgues analizó los cambios de color asociados a distintas sales de Co^{2+} , y Zn^{+2} y se discutieron, con exquisito detalle, las estructuras cristalinas de una familia de aluminatos, silicatos (azules), óxidos (verdes) o hidroxofosfatos (violeta) de zinc y cobalto junto con otros derivados

análogos de tonalidades diversas. La profesora A. Fuertes realizó una revisión de la química de los oxinitruros, repasando aspectos de relevancia, como su extraordinaria dificultad de preparación, o sus particulares propiedades como fotocatalizadores o como materiales magnetorresistentes. El profesor F. Lahoz nos expuso la importancia que tiene el estudio estructural para entender la catálisis enantioselectiva. Las conferencias de los Dres. T. Rojo y M. Armand versaron sobre materiales avanzados para baterías de sodio y litio. El resto de ponencias también reflejaron esta variedad temática llevándonos desde aspectos teóricos de las interacciones en sólidos hasta las más innovadas aplicaciones de éstos. La sesión de póster resultó animada y estimulante y el cartel número 31 presentado por la joven N. Muñoz Padial y titulado: “*Superhydrophobic isorecticular porous metal-organic frameworks for the capture of harmful volatile organic compounds*”, de la Universidad de Granada, resultó premiado en esta sesión.

A las distintas sesiones de este simposio asistieron una media de unas 100 personas, destacando de una forma muy importante la presencia de jóvenes que superaba ampliamente el 60%. La reunión en Santander fue muy agradable y fructífera y deseamos que la gran participación de este año se mantenga en ediciones posteriores.

Remitido por: **María Isabel Arriortua** (Universidad del País Vasco) y **Pilar Gómez-Sal** (Universidad de Alcalá).

Mesa redonda sobre “Servicios científico-técnicos” (SCTGII)

El miércoles 18 de septiembre se celebró una mesa redonda en la que participaron 11 representantes de ocho Servicios Científico-Técnicos (SCTs) de toda España en el marco de la XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química. El evento fue moderado por la profesora María Isabel Arriortua Marcaida, directora de los SCT de la Universidad del País Vasco (SGIker) y por el profesor José Luis Arce Diego, director del área de investigación y organización de la Universidad de Cantabria.

Los temas principales que se trataron fueron los siguientes: 1) instrumentación y métodos de análisis singulares de cada SCT; 2) planes de formación promovidos por los SCT; 3) sistemas de gestión de calidad en los SCT; y 4) coordinación entre SCT.

Inicialmente cada representante realizó una breve presentación del estado actual de los servicios de su universidad haciendo especial hincapié en los temas descritos anteriormente. A continuación, en la mesa redonda, se inició un debate durante el cual se profundizó en el apartado de planes

de formación. En este sentido se planteó, de manera generalizada, la importancia de mantener un plan de formación continua para los técnicos. Con el fin de gestionar mejor este plan, se propuso promover un calendario de cursos de formación específicos de interés común a los que pudieran asistir técnicos de diferentes SCTs. Posteriormente, se trató el punto sobre sistemas de gestión de calidad en los SCTs. En general, se estableció que las acreditaciones en base a la norma ISO-17025 son necesarias en el caso de demandas concretas, aunque hay que tener en consideración el alto coste que supone su implantación. Por otro lado, se comentó el interés en implantar certificaciones de gestión de calidad según la ISO-9001 como base para futuras acreditaciones. Finalmente, todos los asistentes comentaron el gran interés de los temas tratados, con lo cual se planteó crear un foro de SCTs para reunirse en el futuro de manera periódica.

Remitido por: **José Luis Arce** (Universidad de Cantabria), **María Isabel Arriortua** (Universidad del País Vasco) y **David Hernández** (Universidad de Cantabria).

Simposio de “Educación, historia y divulgación” (EDH)

En los actos de la Bienal de la Real Sociedad Española de Química que ha tenido lugar en Santander entre el 15 y el 18 de septiembre, el 18 de septiembre se celebró un simposio sobre Educación, Historia y Divulgación de la Química organizado por los grupos de Historia de la Ciencia y de Didáctica e Historia de la Física y la Química, en el que intervinieron los siguientes conferenciantes: B. Herradón del CSIC que de forma amena trató de “La Historia como herramienta en la enseñanza de las ciencias: los fundamentos de la química”; M. Martínez-Ripoll del CSIC, disertó brillantemente sobre “Claroscuros y esplendor de la cristalografía”; J. Pérez-Pariente del CSIC hizo un interesante resumen de la “Historia de la catálisis en Europa y España”; y J. Casado de la Universidad de Salamanca cerró el acto con una sugestiva charla sobre un tema tan actual como “Objetivos sociales en la evaluación de la investigación”.

En el intermedio de esas cuatro conferencias se presentaron ocho comunicaciones orales y ocho pósteres relacionados con temas de historia y de enseñanza de la química que tuvieron una buena acogida entre los presentes por la variedad de temas tratados. El simposio fue seguido por gran número de los participantes en la bienal que intervinieron en los coloquios correspondientes.

Remitido por: **Manuela Martín-Sánchez**,
Universidad Complutense de Madrid.



De izquierda a derecha. Julio Casado, José María Hernández y Manuela Martín-Sánchez.

Simposio de “Química analítica, aplicaciones en alimentos, química agrícola y sensores” (QA)

Este simposio fue seguido por 57 investigadores. El simposio estuvo organizado en 4 sesiones los días 17 y 18 de septiembre y constó de cinco conferencias invitadas (una sexta tuvo que cancelarse a última hora por problemas de salud del conferenciante) y seis comunicaciones orales. Se presentaron, además, 20 comunicaciones flash y 34 pósteres. Durante el simposio se han puesto de manifiesto algunas de las últimas tendencias en la química analítica así como la interfase cada vez más amplia con otras ciencias como la biología molecular, la química clínica, la ciencia de materiales o la nanociencia y la nanotecnología con objeto de poder diseñar sistemas analíticos cada vez más rápidos, eficientes y que tengan un menor coste. En este sentido, la síntesis y las aplicaciones analíticas de las micro- y nano-partículas magnéticas ha sido un tema ampliamente debatido durante las sesiones que han contado con amplia asistencia y una gran participación por parte de los asistentes. Las conferencias invitadas trataron temas como: “*electrochemical biosensors*

for clinical applications”, “*metallomics and metabolomics in exposure experiments of laboratory mice for environmental metal toxicity assesment*”, “*desarrollo y aplicación de métodos quimiométricos para el análisis de datos ómicos ambientales*”, “*aportaciones de la química analítica a la investigación biomédica: del análisis de fármacos a la metabolómica*” y “*magnetic nanoparticles decorated with β -cyclodextrins for cancer biomarker recognition*”. Es importante resaltar que el simposio ha acogido también presentaciones dedicadas a la mejora e innovación tecnológica de varios procesos industriales implicados en la industria agroalimentaria, así como, en la utilización de subproductos de dicha industria con objeto de obtener un valor añadido importante. Todo ello dio lugar a interesantes discusiones científico-tecnológicas que ponen de manifiesto la estrecha relación de la química analítica con este sector industrial.

Remitido por: **José Manuel Pingarrón**,
Universidad Complutense de Madrid.

Evento satélite “El papel de los centros e institutos tecnológicos en el sistema de ciencia-tecnología español” (ES-CENTEC)

En los últimos 30 años, la ciencia ha tenido un desarrollo notable en España, con una repercusión internacional aceptable. En concreto, en el campo relacionado con la química, la ingeniería química, la energía, la bioquímica, el medio ambiente y los materiales, entre los años 1996 y 2010, los investigadores españoles han publicado más del 3% de los artículos científicos mundiales, entre el 2,6% y el 3,6% según las anteriores especialidades, y con una alta repercusión en citas, de 1,2 como media, un 20% por encima del nivel medio. Esto supone estar entre el 9º y el 11º puesto en número de publicaciones y entre el 3º y el 17º en citas a nivel mundial.

Sin embargo, no se ha conseguido algo parecido en tecnología, en innovación y en la aplicación de los conocimientos científicos. En número de patentes éramos los décimosexto del mundo en 2007, estamos en el puesto 17 en 2011, y con apenas el 51-52% de dichas patentes presentadas por las empresas, cuando en otros países este porcentaje rara vez baja del 85%. En innovación, apenas el 0,5% de facturación a nivel mundial de productos de alta tecnología es española, esto supone el puesto 26º, o en el tantas veces citado “índice de competitividad”, en el puesto 35º del mundo en 2011 y en el 39º según los datos de 2012. Y lo peor es que nuestros responsables quieren mejorar este puesto *¡bajando salarios!*, cuando parece que sería mejor dedicar más recursos a la I+D+i.

Este problema, la desconexión entre ciencia y sector productivo, aunque se han hecho muchos intentos, no ha sido superado, ni siquiera hemos avanzado significativamente en todos estos años.

Esta ya es razón suficiente para plantear en este congreso científico una mesa redonda sobre el papel de los centros e institutos tecnológicos, como instituciones más cercanas a la transferencia de conocimiento. Además, otro de los proble-

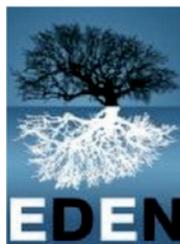
mas acuciantes de nuestro sistema de ciencia y tecnología, y lamentablemente en los últimos años de otros muchos sectores, es la renovación generacional. Dar una esperanza a los jóvenes, en este caso científicos y tecnólogos, que no pase por la emigración, que no proyección exterior.

Para ello, se ha contado con una variada representación de distintos centros e institutos. Son centros muy variados, tanto en cuanto a su temática principal, como a lo que respecta a cómo entienden su desarrollo y relación con el entorno. Los ponentes que intervinieron fueron: Carlos Feliú, hasta hace unos meses Director del Instituto de Tecnología Cerámica, asociado a la Universitat Jaume I de Castellón; María Pascual de Zulueta, coordinadora General de Difusión y Marketing de la Fundación GAIKER, en el Parque Tecnológico de Zamudio en Bizkaia; Sixto Malato, Director de la Plataforma Solar de Almería, una ICTS del CIEMAT; y Miquel Rovira, Director del *Centre Tecnològic* de Manresa. También se contó con una breve presentación del Centro Tecnológico Nacional de Descontaminación del Mercurio, de las Minas de Almadén, en Ciudad Real, Castilla La Mancha, a cargo de Ana Conde.

Estos ponentes realizaron una breve presentación sobre cuál es el quehacer de su centro o instituto y su papel en su región y ámbito profesional o industrial de influencia.

Posteriormente, hubo un animado debate sobre el papel de estos centros e institutos en el sistema de ciencia y tecnología español, cuáles son sus principales logros, anhelos y sus perspectivas, y cuáles son las oportunidades que ofrecen para jóvenes investigadores y tecnólogos.

Remitido por: **Félix García-Ochoa Soria**
(Universidad Complutense de Madrid)
y **Manuel Álvarez Guerra**
(Universidad de Cantabria).



IV Encuentro sobre Dendrímeros EDEN

SANTIAGO DE COMPOSTELA, JANUARY 23rd - 24th, 2014

Simposio “Nuevos retos de la electroquímica” (NRELECT)

Este simposio, celebrado el martes 17 de septiembre, fue organizado por el Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ y coordinado por los profesores Vicente Montiel (Universidad de Alicante), Manuel Rodrigo (Universidad de Castilla-La Mancha) y Ane Miren Urriaga (Universidad de Cantabria). El simposio se desarrolló en tres sesiones. El formato general de cada sesión consistió en la presentación de comunicaciones orales de 10 minutos cada una, seguidas de una conferencia invitada de 30 minutos que precedió a un coloquio relacionado con la temática de la sesión siendo coordinada por el/la presidente/a de cada una de la sesiones desarrolladas. La primera de ellas, presidida por la profesora Elvira Gómez (Universidad de Barcelona), se inició con la bienvenida y apertura realizada por el presidente del Grupo de Electroquímica el profesor Vicente Montiel. A continuación, se presentaron cinco comunicaciones orales y una conferencia invitada impartida por el profesor Enrique Herrero (Universidad de Alicante) que plantearon nuevos desarrollos en el campo del diseño de procesos electroquímicos desde el punto de vista fundamental. La segunda sesión presidida por el profesor José Manuel Pingarrón (Universidad Complutense de Madrid) se centró en la presentación de los nuevos avances en el campo de los sensores y biosensores electroquímicos; se desarrolló mediante 6 comunicaciones orales y una conferencia invitada impartida por la profesora Paloma Yáñez-Sedeño (Universidad Complutense de Madrid). Por último, y bajo la presidencia del profesor Manuel Rodrigo (Universidad de Castilla-La Mancha), se presentaron contribuciones relacionadas con la aplicación de la electroquímica



Asistentes al simposio NRELECT.

en el medioambiente y en la obtención y empleo de la energía; tres presentaciones *flash* de pósteres seguidas de cinco comunicaciones orales y una conferencia invitada impartida por el profesor Enric Brillas (Universidad de Barcelona). Además de las sesiones se presentaron una serie de comunicaciones mediante distintos pósteres.

Remitido por: **Vicente Montiel**,
Universidad de Alicante.

Simposio de “Química en la frontera con la biología” (QBIO)

El simposio QBIO contó con 12 conferencias invitadas, 8 conferencias seleccionadas, 6 comunicaciones orales, 24 comunicaciones *flash* y 48 carteles. Como conferenciantes invitados se contó con los profesores L. Brunsveld (Universidad Técnica de Eindhoven), T. Ward (Universidad de Basilea) y L. Banci (Universidad de Florencia) cuya participación fue patrocinada por Janssen-Cilag y los Grupos Especializados de Química Biológica y RMN, respectivamente, así como con C. Barbas (USP-CEU), F. Díaz (CIB-CSIC), J. Granja (USC), V. Guallar (BSC-CNS), I. Haro (IQAC-CSIC), M. C. Jiménez-Molero (UPV), J. Mareque (CIC biomaGUNE), J. Rojo (IIQ-CSIC) y A. Somoza (IMDEA Nanociencia). Las contribuciones abarcaron diversos aspectos relacionados con la química biológica, cubriendo en gran medida las características multidisciplinarias de esta área científica. Los ponentes disertaron sobre reconocimiento molecular, diseño de fármacos, glicobiología, nanociencia, metabolómica, química computacional, péptidos, productos naturales y fotoquímica, en el contexto amplio de la frontera entre la química y la biología, mostrando así distintos abordajes, protocolos y métodos para el entendimiento y la manipulación de procesos biológicos relevantes.

El Grupo Especializado de Química Biológica concedió dos premios a las dos mejores comunicaciones *flash* (Anna Laromaine del ICMB-CSIC y Nuria Rodríguez de la USC) y un premio al mejor cartel (Alfonso Latorre del IMDEA Nanociencia).



Premiados por el Grupo Especializado de Química Biológica (de izquierda a derecha): Nuria Rodríguez, Anna Laromaine y Alfonso Latorre.

Desde el comité organizador local, se contó con la coordinación de Ignacio Fernández del Olmo y los voluntarios Esther Santos (UNICAN), César Martínez (UAM) y Ricardo Abejón (UNICAN), que estuvieron “al pie del cañón” en todo momento.

Remitido por: **Sonsoles Martín-Santamaría**,
Universidad CEU San Pablo.

Evento satélite “Institutos de investigación” (ES-INSINV)

El evento satélite “Contribuciones de la Química a la sociedad. El papel de los institutos de investigación como fuente de empleo cualificado” contó con la presencia de los ponentes Miquel Pericás (ICIQ), Fernando Cossío (IKERBASQUE), María Vallet-Regí (UCM) y Jesús Santamaría (Instituto de Nanociencia de Aragón). Los ponentes, moderados por S. Martín-Santamaría (USP-CEU), departieron sobre distintos modelos de gestión y de investigación eficaces, haciendo énfasis en las posibilidades de trabajo que pueden ofrecerse a los jóvenes investigadores y en la evolución y diseño de su carrera científica. Se comparó la gestión pública frente a la privada, resaltando las ventajas y posibles inconvenientes de los modelos extremos y de posibles soluciones intermedias. Entre otros aspectos, se destacó la importancia de disponer de modelos ágiles de captación y retención de talento investigador. También se resaltó la importancia de trabajar en colaboración para compartir recursos y permitir el abordaje de problemas desde distintas disciplinas y, finalmente, se lanzó un mensaje de estímulo para los jóvenes: el cambio ha venido muchas veces del empuje y avance de personas concretas.

Remitido por: **Sonsoles Martín-Santamaría**,
Universidad CEU San Pablo.



De izquierda a derecha, Miquel Pericás, Fernando Cossío, Sonsoles Martín-Santamaría, Jesús Santamaría y María Vallet-Regí.

Simposio “Nanociencia y nanotecnología” (NANO)

El simposio de nanociencia y nanotecnología ha contado con 244 investigadores interesados en este tema multidisciplinar. El simposio transcurrió durante tres días contando con seis sesiones. Se impartieron 13 conferencias invitadas por expertos de reconocido prestigio nacional e internacional, además de 29 comunicaciones orales y 12 comunicaciones *flash*. Asimismo, se presentaron 45 carteles. Cabe destacar el alto grado de participación en todas las sesiones con aulas llenas e intervenciones en prácticamente todas las comunicaciones presentadas. No cabe duda de que una de las razones del éxito de este simposio es la amplia interdisciplinariedad y transversalidad que se le ha conferido; englobando aspectos sintéticos de nanomateriales y una amplia gama de aplicaciones relevantes que van desde su utilización como materiales, para el almacenamiento eficiente de energía, hasta el diseño de dispositivos de (bio)sensorización. Buena prueba de ello son los temas tratados en algunas de las conferencias invitadas: “*Aryl extended calix[4]pyrrole scaffolds in supramolecular chemistry*”, “*Dendrimers-modified solid supports towards nanostructured materials for clinical diagnostics*”, “*Evolución morfológica y óptica de nanopar-*

tículas de oro recubiertas de plata”, “*Fotocatalizadores para combustibles solares*”, “*Porphyrin nanostructures on surfaces and chiral assemblies in solution*”, “*Gated silica mesoporous materials for controlled release and sensing applications*”, “*Nanomateriales híbridos para el diseño de biosensores electroquímicos*”, “*Nanoscale metal-organic frameworks synthesis and assembly in the air and on surfaces*”, “*Synthesis of metallic nanoparticles: assembly based on coordination chemistry and development of enzyme-nanoparticle hybrid systems*” o “*Large scale ab-initio simulations in nanoscience*”.

Por otra parte, dentro del simposio se procedió a la entrega del premio Lilly al Dr. Juan Luis Delgado (IMDEA-Nanociencia), que impartió la conferencia titulada “*Nuevos materiales orgánicos para la preparación de dispositivos fotovoltaicos*”. Asimismo, la presidenta del grupo especializado de Nanociencia de la RSEQ, la Dra. Ángela Sastre, hizo entrega, en el marco del simposio, de los premios del grupo.

Remitido por: **José Manuel Pingarrón**,
Universidad Complutense de Madrid.

Evento satélite “Productos naturales, sondas moleculares en sistemas biológicos” (ES-PRONAT)

Durante este evento se hizo entrega de los premios GEPRONAT 2012 del Grupo Especializado de Química de Productos Naturales de la RSEQ, en su segunda edición. Estos premios pretenden apoyar y promover la investigación científica de calidad en el área de productos naturales, así como premiar la labor científica individual de sus investigadores que por su trayectoria científica de excelencia hayan destacado en la investigación en algunas de las facetas de la química y de la transferencia de tecnología al sector industrial en química de productos naturales. Además, se premia a jóvenes investigadores que destacasen por su labor científica en España o en estancias en centros internacionales de investigación.

Las tres modalidades de los premios de investigación GEPRONAT 2012 son: excelencia en la investigación en productos naturales; transferencia tecnológica al sector empresarial y creación de empresas de base tecnológica; y al investigador novel en química de productos naturales.

Tras la apertura del acto por parte del Sr. Presidente del Grupo Especializado, el Secretario del Grupo, D. José Javier Fernández Castro, realizó una semblanza de los premios GEPRONAT 2012, dando lectura de los aspectos más destacados de los currículos de los galardonados. A continuación, se entregaron las correspondientes medallas de plata del GE de Química de Productos Naturales de la Real Sociedad Española de Química.

El premio joven investigador en química de productos naturales fue otorgado a la Dra. Ana Raquel Díaz-Marrero, de la Universidad de La Laguna, Tenerife. La Dra. Díaz-Marrero se doctoró en 2003, obteniendo el premio a la mejor tesis leída en la Facultad de Química y el premio extraordinario de la Universidad de La Laguna en la división de Ciencias Experimentales y Técnicas. Posteriormente, como becaria posdoctoral MECD/Fullbright, realizó una estancia, en el grupo del profesor Raymond J. Andersen, en la Universidad de British Columbia, Canadá. A lo largo de su trayectoria profesional ha publicado 44 artículos científicos y dos capítulos de libro, ha codirigido una tesis doctoral y participa en la codirección de otras 3 tesis doctorales y un trabajo de máster.

El premio a la transferencia de tecnología al sector empresarial recayó en el profesor Emilio Molina, de la Universidad de Almería, por su contribución al desarrollo de biodiésel y ácidos grasos en general a partir de microalgas. Es responsable del grupo de investigación de Biotecnología de Microalgas Marinas desde su creación en 1992 (grupo que ha recibido el premio de investigación 2007, por la transferencia de conocimiento a las compañías del sector biotecnológico, de la Fundación Mediterránea, Consejo Social de la Universidad de Almería). Ha dirigido 18 tesis doctorales y es coautor de 196 artículos científicos, 15 capítulos de libros y de 11 patentes de invención.

Por último, el premio a la excelencia en investigación en esta segunda edición de los premios GEPRONAT 2012



Participantes en el evento ES-PRONAT.



Los premiados y parte de la junta de gobierno del GEPRONAT.

le correspondió al profesor Luí Castedo, de la Universidad de Santiago de Compostela, por su dilatada carrera investigadora en química orgánica y por ser artífice de la creación de la escuela compostelana de química de productos naturales. La ingente labor investigadora desarrollada por el profesor Castedo ha dado como resultado la realización de 78 tesis doctorales, la publicación de cerca de 500 artículos científicos y de varios capítulos de libros. Así mismo ha sido galardonado con varios premios, entre ellos, la Medalla de Investigación de la RSEQ, la Medalla de Honor del Instituto Universitario “Antonio González” de la Universidad La Laguna y el prestigioso Premio Galicia de Investigación 2003 “Antonio Casares y Rodrigo”, siendo nombrado además Dr. *Honoris Causa* por la Universidad del País Vasco en 2009.

El acto se cerró con la intervención del Presidente del Grupo Especializado.

Remitido por: **Isidro González-Collado**,
Presidente del GE de Química de Productos Naturales.

Simposio “Síntesis orgánica” (SIN)

Con un total de seis sesiones científicas durante los días 16 y 17 de septiembre, en el simposio de Síntesis Orgánica se han impartido 12 conferencias invitadas, tres de ellas por los profesores extranjeros Yujiro Hayashi (Tohoku University), Jean Suffert (Université de Strasbourg) y Walter Leitner (Aachen University), 10 comunicaciones orales cortas, 25 comunicaciones *flash* y 37 pósteres.

El simposio ha cubierto los distintos ámbitos de la síntesis orgánica. En él se han presentado resultados relevantes en el desarrollo de nuevas metodologías de síntesis, y en los campos de la síntesis de productos naturales y de compuestos bioactivos o de interés estructural. Se ha prestado especial atención a la síntesis enantioselectiva mediante organocatálisis o mediante el uso de auxiliares

quirales, y a la utilización de catalizadores, tanto metálicos como no metálicos, en procesos sintéticos. Se han discutido procesos de química sostenible, que generan un menor impacto medioambiental, tales como, reacciones en agua o secuencias sintéticas en las que se utiliza el concepto de “*pot economy*”. Se han presentado también ciertos tipos de dendrímeros y de péptidos modificados de potencial interés en biomedicina, así como estudios de reconocimiento molecular.

Un aspecto altamente estimulante, que merece ser destacado, ha sido la elevada participación de jóvenes investigadores y la masiva asistencia a todas las sesiones.

Remitido por: **Joan Bosch**,
Universidad de Barcelona.

Simposio “Educación en química” (ED-Q)

En el marco de la XXXIV Reunión Bienal de la RSEQ celebrada en Santander, tuvo lugar un simposio específico dedicado a la Educación en Química. Dicho simposio, con estructura de mesa redonda, se dividió en dos sesiones tituladas “La Ingeniería Química y la Química en la Ingeniería” y “Los estudios de Química”.

En la primera sesión intervinieron un total de cinco ponentes. En primer lugar, se abordó el estado actual de los estudios de ingeniería química en España así como sus excelentes perspectivas de futuro, destacando la importancia de que el graduado tenga la mayor versatilidad posible. Seguidamente, se presentó la evolución de los estudios de química en los estudios de ingeniería de telecomunicaciones, biomédica, aeronáutica e industrial en diversas escuelas. Se evidenció la necesidad de mantener y reforzar la presencia de la química en dichas titulaciones como elemento esencial para la empleabilidad y desarrollo profesional de los ingenieros del futuro. Adicionalmente, se plantearon cuestiones de relevancia como la necesidad de hacer más atractivos los contenidos, la actual estructura de los grados y la conveniencia del actual número de centros que imparten similares titulaciones en España.

En la segunda sesión intervinieron dos ponentes. En ambas intervenciones se destacó el imprescindible papel que la química ha jugado, juega y seguirá jugando en el desarrollo de la sociedad actual y de cómo su estudio riguroso en las titulaciones de ciencias es capaz de formar a los profesionales del mañana.



Ponentes y asistentes en la primera mesa redonda del simposio.

Al término de la sesión tuvo lugar un turno de debate con los asistentes, destacando entre otros puntos, una estructura de grado y máster asimilable a la europea, la necesidad de racionalizar los estudios de ciencias en España, y la importancia de la divulgación de la química, no sólo en secundaria sino en edades más tempranas, como un mérito más a valorar en los currículos de los investigadores.

Remitido por: **Antonio Domínguez-Ramos**,
Universidad de Cantabria.

Evento Satélite “Innovación y empleo para jóvenes investigadores” (ES-INNJOV)

Este evento satélite se articuló en torno a la mesa redonda titulada “Opciones de innovación y empleo para jóvenes investigadores”, en la que participaron como conferenciantes invitados el profesor Carlos Negro (presidente del Foro Química y Sociedad), la profesora Pilar Goya (miembro de la Comisión de Ética del CSIC), el profesor Javier García-Martínez (cofundador de *Rive Technology*) y el profesor Manuel Galán (fundador de las empresas Carbuere Europe y Bionaturis).

Durante el transcurso de la mesa redonda, el profesor Carlos Negro destacó el importante papel del sector químico en España, al generar más de 500.000 empleos directos e inducidos y representar el 11% del PIB industrial. Además, se caracteriza por ser un sector altamente innovador, al concentrar una cuarta parte de la inversión en I+D+i de la industria española y el 10% del total de tesis leídas en nuestro país. Asimismo, se destacó que los profesionales químicos pueden trabajar en multitud de sectores (alimentación, aeronáutico, energético..., además del químico y farmacéutico tradicionales), por lo que la interdisciplinariedad es fundamental en el ejercicio de su trabajo. Finalizó su intervención resumiendo los principales resultados alcanzados por el portal de empleo del Foro Químico y Sociedad (www.laboris.net/quimica/), único específico del sector en la actualidad.

A pesar del desfavorable contexto económico actual, los profesores Javier García Martínez y Manuel Galán señalaron al emprendimiento como una oportunidad muy interesante para aquellos profesionales que, contando con capacidad, conocimiento y esfuerzo, no encuentran empleo como trabajadores por cuenta ajena. Durante las presentaciones de las empresas que estos profesores fundaron, se insistió en la necesidad de contar con un plan de negocio sólido y que genere la confianza suficiente para permitir obtener financiación suficiente para superar el “Valle de la Muerte” (período



Ponentes y organizadores del ES-INNJOV.

inicial de toda empresa en que su flujo de caja es negativo) y consolidarse.

Por su parte, la profesora Pilar Goya comentó la importancia de las buenas prácticas científicas para el desarrollo de la carrera de cualquier investigador, por lo que la presión para la obtención de resultados nunca debería inducir a malas prácticas científicas (FFP: falsificación, fabricación de datos y plagio). Se estima que un 2% de los trabajos de investigación adolecen de FFP siguiendo una tendencia creciente durante los últimos años. Para luchar contra este fraude, la Dra. Goya informó que en numerosos países y organismos se han desarrollado códigos de buenas prácticas, y se han organizado ya tres congresos mundiales sobre integridad en la investigación.

Remitido por: **Carlos Negro**,
Universidad Complutense de Madrid y Foro Química y Sociedad.

Simposio “Estructura y reactividad: de la teoría al experimento” (ESTR)

La comprensión, mejora y desarrollo de procesos químicos es, cada vez más, una temática transversal, que rompe las tradicionales barreras del pasado siglo entre distintos campos de la química. En esta nueva perspectiva, el modelaje y la simulación computacionales se dan la mano con un amplio espectro de técnicas experimentales con el fin de obtener una descripción detallada, a nivel molecular, de las especies presentes en un medio de reacción y de sus transformaciones. Poner de manifiesto esta multilateralidad, reuniendo a investigadores de distintos campos, ha sido el objetivo del simposio “Estructura y reactividad: de la teoría al experimento” que ha tenido lugar en el marco de la XXXIV Reunión Bienal de la RSEQ. El simposio ha reunido a químicos computacionales, con una larga experiencia en investigación colaborativa con grupos experimentales, con químicos experimentales orgánicos e inorgánicos, y especialistas en técnicas como la espectroscopia de masas de ionización por electrospray, la resonancia magnética nuclear y la fuente de luz sincrotrón. La reunión ha mostrado, en un ambiente participativo y de franca discusión, la



Sesión del simposio ESTR.

potencialidad de un enfoque multilateral en el estudio de la reactividad química.

Remitido por: **Agustí Lledós**,
Universidad Autónoma de Barcelona.

Noticias de las Secciones Territoriales y Grupos Especializados

Convocatoria de premios PREMIOS GEPRONAT 2013 del GE de Química de Productos Naturales

Se convocan los Premios 2013 del Grupo Especializado Química de Productos Naturales, Premios GEPRONAT 2013, en las siguientes modalidades: **premio a la investigación en química de productos naturales**, para premiar la labor científica individual de investigadores, por su trayectoria científica de excelencia en química de productos naturales; **premio a investigadores noveles del GE de Química de Productos Naturales**, para premiar la labor científica de jóvenes investigadores, menores de 40 años, que hayan destacado por su labor científica en España o en estancias en centros internacionales de investigación; y **premio a la transferencia de tecnología al sector industrial**

y a la creación de EBTs, para premiar trayectorias científicas relevantes de investigadores, en el área de productos naturales, cuyos resultados de investigación hayan sido transferidos al sector industrial o hayan dado lugar a empresas de base tecnológica consolidadas en el sector industrial nacional o internacional.

Las propuestas de candidatos deberán enviarse al GEPRONAT hasta el 15 de Noviembre de 2013, preferiblemente por correo electrónico a jjfercas@ull.es o isidro.gonzalez@uca.es.

Remitido por: **Isidro González-Collado**,
Presidente del GE de Química de Productos Naturales.

VI Reunión Química Orgánica del Mediterráneo (VI REQOMED)

Entre los días 19-21 de Junio tuvo lugar en Granada la sexta edición de REQOMED con la participación de alrededor de 130 investigadores de España y diferentes países del arco mediterráneo y América. Las sesiones científicas se celebraron en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Granada y hubo doce conferencias invitadas. La Dra. Duñach (Universidad de Niza, Francia) expuso resultados sobre procesos de ciclación catalizados por superácidos de Lewis, con aplicaciones en la construcción de moléculas olorosas de interés en Perfumería. El Dr. Pérez-Inestrosa (Universidad de Málaga) habló de la síntesis de nuevos dendrímeros y sus posibles aplicaciones médicas. El Dr. Pischel (Universidad de Huelva) contó sus experiencias en el empleo de cucurbiturilos y su asociación con diferentes moléculas buscando aplicaciones en la liberación de fármacos, sensores etc. El Dr. Caballero (Universidad de Murcia) presentó los últimos avances en la utilidad del enlace de halógenos en la construcción de diferentes entidades moleculares de interés. El Dr. Gonzalo Blay (Universidad de Valencia) presentó la puesta a punto de procesos catalíticos de alquilación asimétrica de enonas. La charla del Dr. Sansano (Universidad de Alicante) versó sobre la síntesis asimétrica de pirrolidinas quirales con actividad antiviral C, mediante cicloadiciones 1,3-dipolares. La Dra. Pla-Quintana (Universidad de Gerona) disertó sobre nuevos avances en ciclaciones [2+2+2] catalizadas por Rh acompañado con ligandos del tipo de los fosforamiditos que mejoran enantioselectividades. La conferencia del Dr. Casas-Solvas (Universidad de Almería) trató sobre la preparación de neoglicoconjugados basados en ciclodextrinas, dendrímeros y nanopartículas. El Dr. Macías Sánchez (Universidad de Cádiz) expuso los resultados de la utilización del sesquiterpene cariofileno en ciclaciones-reordenamientos hacia moléculas con actividad antifúngica contra *Botrytis cinerea*. La Dra. Díaz (Universidad de Tarragona) comentó los avances de procesos catalizados por metales de transición en la síntesis de productos naturales. El Dr. Shafir (Universidad Autónoma de Barcelona e ICIQ Tarragona) presentó nuevas aplicaciones del PIFA en diferentes acoplamientos carbono-carbono. Finalmente el Dr. García-Granados expuso sus experiencias en la transferencia de tecnología y la problemática de la burocracia legal, para la puesta en marcha de empresas de base tecnológica.



Participantes en el VI REQOMED.



Entrega de premios Sigma-Aldrich a los mejores pósteres del VI REQOMED (los premiados están en la fila superior).

Además, el programa científico se completó con 21 comunicaciones orales y más de 80 comunicaciones en formato póster. Los comités científico y organizador seleccionaron los seis mejores carteles que recibieron sendos premios subvencionados por la firma Sigma-Aldrich en la sesión de clausura. Paralelamente el programa de actividades lúdico-sociales llevó a los participantes a una visita guiada por el Albaicín que finalizó con una copa de bienvenida en el incomparable

marco del antiguo convento de Santa Paula, además se celebró una cena en el Palacio de los Córdovas ubicado junto al río Darro, amenizada por un espectáculo flamenco en directo.

Desde el Comité Organizador agradecemos las ayudas recibidas desde los grupos especializados de Química Orgánica y Productos Naturales y de la sección territorial de Granada de la RSEQ, de la Facultad de Ciencias, del Departamento de Química Orgánica, el Instituto de Biotecnología y el Vicerrectorado de Política Científica e Investigación de la Universidad de Granada,

del Excelentísimo Ayuntamiento de Granada y de Sigma-Aldrich. Agradecemos igualmente la participación y deseamos manifestar que esta reunión científica gestada hace años en la Universidad de Alicante por el Dr. Miguel Yus se ha consolidado plenamente y ofrece un marco complementario al de otras reuniones como las de la Real Sociedad Española de Química.

Remitido por: **Alejandro Fernández Barrero**,
Universidad de Granada,
Presidente del Comité Organizador VI REQOMED.

XXXIV Reunión del Grupo de Electroquímica de la RSEQ y XV Encuentro Ibérico de Electroquímica

La XXXIV Reunión del Grupo de Electroquímica de la RSEQ (GE-RSEQ) y el XV Encuentro Ibérico de Electroquímica tuvieron lugar entre el 15 y el 17 de julio de 2013 en la Universidad de Valencia (Fundación Universidad-Empresa ADEIT), contando con la asistencia de 200 participantes. La reunión fue organizada por el profesor Francisco Vicente Pedrés (Presidente) y el Dr. José Juan García Jareño (Secretario).

La apertura de la reunión fue presidida por el rector de la Universidad de Valencia. La reunión se organizó en cuatro simposios paralelos con la presentación de 18 comunicaciones invitadas, 82 comunicaciones orales y 82 carteles. Se impartieron conferencias plenarias por los profesores Mirna Urquidi-Macdonald (USA), Artur J. M. Valente (Portugal), H. Perrot (Francia) y Digby D. Macdonald (USA).

Se celebró la asamblea general del grupo especializado en la que se informó sobre la gestión de la nueva página web, se aprobó el Reglamento del grupo adaptado a la nueva normativa de la RSEQ y se entregó el premio al ganador del concurso para el logotipo del grupo y que ha recaído en D. Manuel Montiel Argaiz del departamento de Química Física de la Universidad de Barcelona. Asimismo el Dr. Álvaro Colina Santamaría, como miembro del comité organizador de la próxima XXXV Reunión

del Grupo, informó sobre el futuro encuentro del próximo año 2014 en la ciudad de Burgos. Se entregaron los premios CIDETEC 2012 (ver siguiente reseña).

Durante el desarrollo de la reunión, tuvo lugar la defensa de los proyectos de tesis del programa interuniversitario de doctorado “Electroquímica. Ciencia y Tecnología” y la defensa de los “trabajos fin de máster (TFM)” de la primera promoción del máster interuniversitario “Electroquímica. Ciencia y Tecnología”.

También es de destacar el Foro “La Electroquímica en la Industria” (Mesa Redonda sobre “Formación, Producción, Investigación), en el que intervinieron 12 ponentes (empresas, centros tecnológicos y centros públicos de investigación).

La Junta directiva y el presidente del comité organizador de la reunión quieren agradecer a todos los asistentes la participación y el espíritu de colaboración que ha existido durante la reunión. Queremos trasladar nuestro reconocimiento a nuestros patrocinadores IK4 Cidetec, Gomensoro y Trallero and Schelle. Pueden seguirnos a través de nuestra página web <http://rsequelectroquimica.com/>

Remitido por: **Junta directiva del Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ.**



Participantes en el congreso.

La excelencia en ELECTROQUÍMICA premiada por los IX Premios CIDETEC 2012

El profesor D. Antonio Aldaz Riera y el investigador D. Paramaconi Rodríguez Pérez fueron galardonados con los IX premios CIDETEC, entregados por el director general del centro tecnológico vasco IK4-CIDETEC, el Dr. F. Javier Rodríguez, en el seno de la XXXIV Reunión del Grupo especializado de Electroquímica de la RSEQ y XV Encontro Ibérico de Electroquímica celebrado en Valencia del 15 al 17 de Julio.

El profesor Antonio Aldaz, miembro del departamento de Química Física y del Instituto Universitario de Electroquímica de la Universidad de Alicante, recibió los 6.000 euros, el trofeo y el diploma acreditativo del premio CIDETEC 2012 en la modalidad de *Trayectoria Científica en Electroquímica*. El jurado, compuesto por siete expertos en la materia, decidió premiar su amplia y destacada trayectoria científica en el área de la electroquímica. Asimismo, fue entregado el Premio CIDETEC 2012 en la modalidad de *Investigación Científica en Electroquímica*, dotado con 6.000 euros y diploma acreditativo, al Dr. Paramaconi Rodríguez, actualmente en la *School of Chemistry* de la Universidad de Birmingham, por el artículo: "The promoting effect of adsorbed carbon monoxide on the oxidation of alcohols on a gold catalyst" publicado en la revista *Nature Chemistry* **2012**, *4*, 177–182. Ambos premiados impartieron sendas conferencias después de la entrega de los premios.

Los premios CIDETEC se han convertido en un referente de la excelencia en la electroquímica española y en una seña de identidad de las actividades del grupo especializado de Electroquímica de la RSEQ. En este sentido, hay



De izquierda a derecha: el Dr. F. Javier Rodríguez, Director General de IK4-CIDETEC; el Dr. Antonio Aldaz; el Dr. Paramaconi Rodríguez; el Dr. Enric Brillas, Presidente del jurado evaluador de los premios y el Dr. Vicente Montiel, Presidente del GE de Electroquímica de la RSEQ.

que señalar que ya ha sido convocada la X edición de los Premios CIDETEC de Investigación Científica y de Jóvenes Investigadores en su edición 2013. La convocatoria se puede consultar en <http://www.cidetec.es/cas/index.aspx> y <http://rseqelectroquimica.com/>

Remitido por: **Junta directiva del Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ.**

Premio "Marcial Moreno Lectureship" para jóvenes investigadores de la ST de Cataluña



Dr. Cramer.

El primer premio de la sección catalana de la RSEQ (RSEQ-CAT) "Marcial Moreno Lectureship" para jóvenes investigadores de hasta 40 años ha sido concedido a Nicolai Cramer (*Laboratory of Asymmetric Catalysis and Synthesis*, EPFL, Lausanne). Nicolai Cramer impartirá dos conferen-

cias sobre "Asymmetric C-H Functionalizations: A Quest for Efficient Ligand Systems" en diciembre con motivo de recibir este premio. La primera tendrá lugar el jueves día 12 en el ICIQ (Tarragona) y la segunda el viernes día 13 en el *Institut de Recerca Biomèdica/Departamento de Química Orgànica de la Universitat de Barcelona*.

Nicolai Cramer estudió química en la Universidad de Stuttgart y en 2005 obtuvo el doctorado en la misma universidad bajo la dirección del profesor S. Laschat. Después de una estancia en la Universidad de Osaka, se incorporó al grupo del profesor B. M. Trost en la Universidad de Stanford como investigador postdoctoral en 2006. En el periodo 2007-2010 trabajó en el ETH Zurich (asociado del profesor E. M. Carreira) donde consiguió la habilitación. Desde el año 2010 ocupa su posición actual en la EPF-Lausanne. Su investigación abarca las transformaciones enantioselectivas catalizadas por metales y su implementación para la síntesis de moléculas con actividad biológica.

Remitida por: **Antonio Echavarren**,
Presidente de la ST de Cataluña.

Educación

Ciencia en acción



Estudiantes y alumnos del IES Bezmiliana (El Rincón de la Victoria, Málaga) durante una demostración de química.

El fin de semana del 4 al 6 de octubre se celebró la fase final de la decimocuarta edición del concurso Ciencia en Acción. Tuvo lugar en el Paraninfo de la Universidad del País Vasco en Bilbao, donde se dieron cita más de 500 participantes que hicieron las más de 100 demostraciones seleccionadas como finalistas en las 17 modalidades en las que se divide el concurso. Entre estas modalidades, podemos mencionar materiales didácticos, puesta en escena, demostraciones prácticas en matemáticas, física, geología, tecnología, biología, sostenibilidad y química.

Como es habitual, las actividades fueron seguidas por numeroso público. Durante el certamen también se contó con dos conferencias. La inaugural fue impartida por Jesús Etcheverry y trató sobre *La magia y la ciencia*, incluyendo diversas números de ilusionismo, tanto del ponente como de magos colaboradores. La conferencia de clausura, *A graduate student's story*, fue excepcional. Fue impartida por una gran científica, Jocelyn Bell, la primera persona que detectó un púlsar, cuando realizaba la tesis doctoral con el profesor Hewish (Premio Nobel de Física, 1974, por el descubrimiento de los púlsares). En su conferencia, la Dra. Bell expuso sus vivencias de estudiante de doctorado, antes y después del gran hallazgo. Sin duda, Jocelyn Bell dio una gran lección científica al joven público asistente.

Aunque en Bilbao se celebró la fase final, el concurso empezó a principios del año en curso; a través de una fase previa en la que se seleccionan a los participantes en la fase final. En esta edición del concurso, la RSEQ ha participado por primera vez como entidad colaboradora con una pequeña aportación económica y proponiendo personas para los jurados. En la fase previa, las personas propuestas por la RSEQ fueron Héctor Busto, Javier García-Martínez, Juan Manuel Gutierrez-Zorrilla, Bernardo Herradón, Juan José Iruín, Inés

Pellón, Pascual Román, César Tomé, Daniel Torregrosa, y Paloma Yáñez-Sedeño; que formaron parte de diversos jurados, aparte del específico de química.

En la fase final, estuvieron varios miembros de la RSEQ: Héctor Busto (en la modalidades de matemáticas, y física y sociedad), Pascual Román (en la modalidad de puesta en escena) y Bernardo Herradón, Juan José Iruín e Inés Pellón (en la modalidades de química, biología, y sostenibilidad). Este último jurado, presidido por Bernardo Herradón, también contó con Marta Saloña (UPV), Sergio López (Antares) y Javier Ramírez (CosmoCaixa).

En los últimos años, el número de participantes en la modalidad de química y la calidad de las demostraciones ha aumentado espectacularmente. En esta fase final hubo 11 demostraciones de química y fue realmente complicado elegir a los ganadores, todos ellos presentando actividades divulgativas y de gran valor didáctico. Se concedieron dos primeros premios y dos menciones de honor, que recayeron en:

- Primer premio: **Tinta magnética adhesiva**. Presentado por Margarita Merida (*Agrupamento de escolas de azambuja, Lisboa*). Por su originalidad con varias actividades de valor formativo, como la obtención de la caseína de la leche y el empleo de colorantes naturales cuyo color varía con el pH; planteado como un proyecto de investigación. Los experimentos se pueden repetir sin dificultad y las explicaciones son adecuadas.
- Primer premio: **Jugando con la tabla periódica**. Presentado por Antxon Anta (Colegio Alemán, San Sebastián). Es un trabajo realizado por estudiantes que, de manera original, didáctica y atractiva, explican el sistema periódico, uno de los conceptos fundamentales en química. También se destaca que han abordado aspectos relacionados con la seguridad y medio ambiente.
- Mención de honor: **Química en el arte**. Presentado por Fina Guitart (CESIRE-CDEC, Barcelona). Usando como hilo conductor la ciencia que hay en el trabajo artístico y en su identificación, se ha hecho un trabajo muy completo, homogéneo, coherente con valor didáctico; que permite enseñar muchos conceptos de química.
- Mención de honor: **Iones y electrones**. Presentado por Josep M. Valls (*Escola Pia Nostra Senyora, Barcelona*). En la que se expone una colección de experimentos de electroquímica, una parte de la química que a los alumnos les cuesta entender. Son demostraciones sencillas, realizadas con materiales al alcance de todos y que proporcionan resultados muy evidentes. Las experiencias se explican de un modo muy riguroso, con alto valor formativo.

Remitido por: **Bernardo Herradón**, RSEQ.

¡Una tabla con mucha química!

Piedra Rosetta de la naturaleza, en palabras de Rudy Baum, editor de *Chemical & Engineering New*. *La compilación del conocimiento más compacta y significativa que el hombre haya elaborado*, según el astrónomo Harlow Shapley. La tabla periódica es el icono por excelencia de la química y de los químicos.

Durante las últimas semanas, desde nuestras cuentas de Facebook (<http://cort.as/609w>) y Twitter (@RSEQUIMICA), se propuso compartir distintas tablas periódicas entre toda la comunidad química, que demostró ser muy activa en las redes sociales, llegando a recibirse más de 60 tablas periódicas de todo tipo, desde cortinas de baño, tazas y delantales a tablas con muestras de elementos químicos reales.

Además, gracias a la comunidad virtual de apasionados de la química hemos podido recoger tablas periódicas de varias ciudades y de distintos países. Desde México a Australia, pasando por Reino Unido y por distintas ciudades españolas, hemos podido viajar con la tabla periódica.

Puedes leer más sobre la tabla periódica y las aportaciones de nuestros seguidores en redes sociales en el post *Breve historia de la Tabla Periódica: Del cuaderno de Lavoisier a Twitter* publicado por Bernardo Herradón (@QuimicaSociedad) y Luis Moreno (@luisccqq) en el blog *El cuaderno de Calpurnia Tate*.



La tabla periódica en objetos de la vida cotidiana.



Tabla periódica en diversos lugares del mundo.

Remitido por: **Luis Moreno-Martínez** (Universidad Complutense de Madrid) y **Bernardo Herradón** (RSEQ)



Grupo Especializado de Química Biológica
Real Sociedad Española de Química

2nd Meeting of the RSEQ Chemical Biology Group
First Announcement

Date: February 4-5, 2014.
Venue: Paraninfo de la UPV/EHU. Av. Abandoibarra 3. 48009 Bilbao.

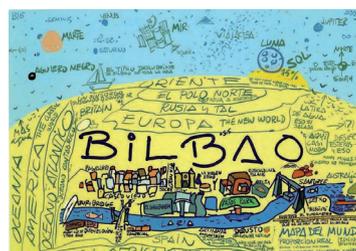
The Spanish Chemical Biology Group will celebrate its 2nd society meeting in **Bilbao the 4 and 5 of February (2014)**. The meeting will bring together a panel of outstanding researchers in the field of chemical biology. The scientific program will be completed with oral communications selected from the submitted abstracts. In a near future, more information will be available at the group's web page (www.quimicabiologica.es). You can also contact with Oscar Millet (omillet@cicbiogune.es), anytime.

The 2nd Meeting of the RSEQ Chemical Biology Group will be coordinated with the XIV Iberian Peptide Meeting (Bilbao, February 5-6 of 2014).

Looking forward to meet you in Bilbao!
Oscar Millet

Invited Speakers

- Teresa Carlomagno, EMBL Heidelberg**
- Ernest Giralt, IRB Barcelona**
- Tim Liedl, LMU Munich**
- Daniel Müller, ETH Zurich**
- Leonardo Pardo, UAB Barcelona**
- Kevin Plaxco, UCSB Santa Barbara**
- Manuel Serrano, CNIO Madrid**
- Nicolas Winssinger, Univ. Genève Ginebra**



Olimpiada Internacional de Química (IChO 2013)

Este año 2013, la 45ª Olimpiada Internacional de Química (IChO), se ha celebrado del 15 al 24 de julio en la Universidad Estatal de Moscú, Rusia. El número de países participantes aumenta, llegando este año a 77. La incorporación de los nuevos países participantes requiere, según los estatutos de la olimpiada, la asistencia previa de una delegación del país solicitante, durante dos años como observador, es decir sin la participación de estudiantes. Este año han asistido delegaciones de tres países observadores que irán incorporándose en los próximos años. El equipo español estuvo formado por cuatro alumnos, David Prieto Rodríguez (del IES Doctor Fleming, Asturias), Damiá Torres La Torre (del IES Guadassuar, Valencia), Sergio Cuesta Galisteo (del colegio Joyfè, Madrid), y Felipe Cano Córdoba (del Colegio Sant Pere, Islas Baleares).

El examen consistió, como es habitual, en una parte teórica con ocho problemas; y otra, de laboratorio. Cada parte tuvo cinco horas de duración. El examen de laboratorio consistió en la realización de dos prácticas, una de química orgánica y otra de química física. Esta última práctica requirió la realización de medidas con un viscosímetro bastante frágil que requirió gran destreza y habilidad para su correcto manejo. El número total de estudiantes participantes fue de 291.

La ceremonia de clausura y entrega de medallas tuvo lugar en el edificio del rectorado de la Universidad de Moscú. Las cinco primeras medallas de oro correspondieron a China, China, China-Taipei, Corea y China. España consiguió dos medallas de bronce, Damiá Torres y David Prieto, y una mención de honor, Sergio Cuesta.

Hanoi (Vietnam) albergará la sede de la 46ª Olimpiada Internacional de Química, (IChO 2014), del 20 al 29 de julio del próximo año, con la participación de 80 países. Estará



De izquierda a derecha: Vicente Martí-Centelles, David Prieto, Felipe Cano, Sergio Cuesta, Damiá Cano y Nerea Iza.

organizada por la Universidad de Ciencias y la Universidad Nacional de Educación de Hanoi. La presentación de la próxima sede la realizaron el rector de la Universidad de Ciencias y el Ministro de Educación de este país. En su presentación, describieron la gran importancia de este evento humano y científico ya que consigue unir a jóvenes científicos de diferentes países, que hablan diferentes idiomas, que tienen diferentes religiones, creencias y costumbres, con un denominador común: su dedicación al estudio de la química.

La información sobre la olimpiada se encuentra en la dirección <http://bit.ly/170dSuA>, junto con once números de la revista de la olimpiada, *Catalyzer* (<http://bit.ly/1g3L09r>), que se edita durante la celebración del evento y describe las actividades diarias, comentarios, fotos y anécdotas ocurridas durante estos días. La sede de la IChO2015 será Baku (Azerbaiyan).

Remitido por: **Nerea Iza**,
Universidad Complutense de Madrid.

XI Concurso de “Química, Sociedad y Medio Ambiente”

La Universidad Rey Juan Carlos celebró el pasado 13 de junio la undécima edición del Concurso de “Química, Sociedad y Medio Ambiente” en la que participaron 137 alumnos de segundo de Bachillerato, matriculados en la asignatura de Química durante el curso académico 2012-2013 en institutos y colegios de la Comunidad de Madrid y Toledo.

La prueba consistió en 45 preguntas tipo test sobre cuestiones generales de química y aspectos industriales, medioambientales y sociales relativos a la química. Todas las preguntas estuvieron relacionadas con los contenidos recogidos en el currículo oficial de la Comunidad de Madrid para la materia de Química de segundo curso de bachillerato. Las preguntas dieron más de un quebradero de cabeza a estos alumnos, que manifestaron que habían sido más complicadas que los exámenes de las pruebas de acceso a la universidad. A los alumnos de cada centro les acompañaron sus profesores, quienes pusieron en valor la oportunidad que les ofrece este concurso para expresar sus conocimientos en química y para acercar la ciencia a los estudiantes de una forma más atractiva.

La entrega de premios tuvo lugar el 24 de junio y se otorgaron a los diez mejores resultados. El concurso contempla diez premios de entre 50 y 600 euros, además de una enciclopedia para el ganador. Este año el primer premio ha



Organizadores y ganadores del concurso.

sido para Sergio Cuesta Galisteo, alumno del Colegio Joyfè de Madrid.

Este concurso está organizado por los Departamentos de Tecnología Química y Ambiental y Tecnología Química y Energética, con la colaboración del Grupo Editorial Anaya y la empresa Köttermann Systemlabor, S.A.

Remitido por: **Irene Vega**,
Universidad Rey Juan Carlos.

Año Internacional de la Cristalografía

Master en Cristalografía y Cristalización. Un master internacional recomendado por la Unión Internacional de Cristalografía (IUCr) y la Asociación Europea de Cristalografía (ECA)

El *Master en Cristalografía y Cristalización* (MCC) ofrece una visión unificada del estudio de los cristales, de sus propiedades y de sus aplicaciones en las distintas disciplinas científicas/técnicas que se consideran como “usuarias” de la cristalografía, incluyendo la química estructural, la ciencia de materiales, la biología estructural, el crecimiento de cristales, la cristalización industrial, la ingeniería química, la nanotecnología, la farmacología, la mineralogía y la física del estado sólido.

La coordinación y la enseñanza de este master está a cargo de un equipo internacional de investigadores de distintas instituciones europeas con reconocido prestigio en el campo de la cristalografía y cristalización. Más de 50 profesores de 12 países aseguran que los alumnos se encontrarán con un ambiente de marcado carácter internacional e interdisciplinario. De hecho, todo el master se imparte en inglés, incluyendo las presentaciones y trabajos de los alumnos.

La enseñanza del MCC es teórica y práctica, con un sesgo hacia la práctica y se estructura en tres módulos con contenidos coordinados.

En un primer módulo de 28 ECTS se imparten los fundamentos de la cristalografía, la cristalización, la difracción, y la resolución y refinamiento de estructuras. Estas cuatro materias básicas se imparten en Sevilla (España) de octubre a diciembre. Durante estos meses iniciales, los alumnos también aprenden a escribir artículos de investigación, a realizar presentaciones orales e informes profesionales. El quinto curso de este módulo troncal es una asignatura llamada *Cristalografía y Sociedad* donde se discuten el impacto de los avances científicos y tecnológicos de la cristalografía en la vida cotidiana. Al finalizar los cursos básicos del módulo 1, los estudiantes deciden el laboratorio europeo en el que realizarán los trabajos prácticos tutelados, el tema de su tesis de maestría y su supervisor@. La decisión se toma con la ayuda de los profesores y directores del master.

El segundo módulo de 14 ECTS consiste en una estancia de dos meses de trabajo práctico tutelado. Durante este tiempo, el alumno se integra en el trabajo diario de un laboratorio de investigación especializado en el tema de su elección.

Estos créditos se pueden tomar en un solo laboratorio (14 créditos, 2 meses) o dos laboratorios (7 créditos, 1 mes) entre los 16 laboratorios que actualmente se ofrecen en España y en otros países europeos. Durante este período el estudiante trabaja con los científicos del laboratorio en un problema práctico que será la base experimental de su tesis de maestría.

El tercer módulo (6 ECTS) incluye cursos avanzados de especialización opcionales. Los estudiantes deben elegir, siempre con la ayuda de su tutor@ y de los directores de master, dos o tres de los cursos internacionales de una semana de duración ofrecidos por el master.

La tesis de maestría de 12 ECTS implica la preparación, redacción y presentación de un proyecto de documento que contiene los resultados del trabajo de los estudiantes en los módulos 2 y 3 y una presentación oral de los mismos resultados. El trabajo escrito debe cumplir con los requisitos de calidad y las “Instrucciones para Autores” de una revista especializada en el campo, mientras que la presentación oral, seguida de una discusión abierta, se da en el formato de una reunión científica.

El Master en Cristalografía y Cristalización (MCC), así como el doctorado correspondiente están integrados en el Programa Oficial de Posgrado de la Universidad Internacional Menéndez Pelayo (UIMP) y el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), en el marco del Espacio Europeo de Educación Superior. Tiene una duración de un año académico y una valoración de 60 ECTS.

Más información se puede encontrar en la página web (<http://lafactoria.lec.csic.es/mcc>) o a través de correo electrónico. Los interesados pueden contactar con antiguos estudiantes del MCC a través de la página de Facebook (<https://www.facebook.com/groups/284546588237110/>).

Remitido por: **Fermín Otálora y Juan Manuel García-Ruiz**
Laboratorio de Estudios Cristalográficos, Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra, CSIC-Universidad de Granada;
(otalora@csic.es, juanmanuel.garcia@csic.es).

Fermín Otálora y Juan Manuel García-Ruiz son director y exdirector del MCC, respectivamente.



El Master en Cristalografía y Cristalización combina enseñanza teórica (a) y práctica, tanto en el aula (b) como en visitas a laboratorios de investigación (d) y a empresas (e). La programación del master está organizada para permitir el máximo rendimiento de nuestro excelente profesorado, y la mayor interacción con el alumnado (c).

Reunión de asociaciones de cristalógrafos italianos, españoles y suizos (MISSCA 2013)

Durante los días 9-12 de septiembre se celebró en Como (Italia) el primer *Meeting of the Italian, Spanish and Swiss Crystallographic Associations* (MISSCA 2013). Este evento, continuación de los celebrados entre el Grupo Especializado de Cristalografía y Crecimiento español (GE3C) y la Asociación Italiana de Cristalografía (AIC) en Copanello (2007) y Oviedo (2010), ha reunido a más de 200 científicos de los países organizadores y circundantes, con una asistencia importante de jóvenes investigadores. El MISSCA 2013 ha cubierto la mayor parte de las ramas de la cristalografía, desde las pequeñas moléculas hasta las proteínas y el crecimiento cristalino, teniendo muy presente las conexiones con otras áreas científicas próximas.

El congreso se organizó en torno a 12 microsímposios centrados en temáticas punteras, que se pudieron llevar a cabo al disponer de una masa crítica de participantes tras la unión de las tres asociaciones. Algunos de los títulos de los microsímposios, que citamos a continuación, nos dan idea de la multidisciplinariedad de intereses de la reunión: *Macromolecular assemblies and viruses; Structure and properties of inorganic and organic thin films; Molecular compounds and intermolecular interactions; Membrane proteins and drug design; Aperiodic, nano and defective materials, Crystallography for intelligent materials; Advances in crystal growth and crystallization methods; y Quantum crystallography.*

Durante los días del congreso se impartieron cinco conferencias plenarias, 12 conferencias invitadas, 36 presentaciones orales y se han defendido 102 pósteres. La representación española incluyó más de 70 cristalógrafos que contribuyeron con 14 contribuciones orales y más de 40 pósteres. En el acto de la inauguración del congreso el profesor Juan Manuel García-Ruiz (Laboratorio de Estudios Cristalográficos, IACT-CSIC-UGR) recibió la Medalla MISSCA 2013, como premio a sus relevantes aportaciones científicas y a su extraordinaria capacidad como divulgador de la ciencia, impartiendo la conferencia titulada “*Crystals and (my) life*”.



Sesión científica del MISSCA 2013.

Finalmente, tras la interesante y estimulante conferencia de la jornada de clausura “*Chiral crystallization with non classical crystal growth and enantiodiscrimination through oriented attachment*” impartida por el profesor Cristóbal Viedma (UCM), se celebró una mesa redonda dedicada al año internacional de la Cristalografía (IYCr2014), en la que se expusieron las actividades que se han diseñado hasta el momento por parte de la Unión Internacional de Cristalografía (IUCr) en general, y de las asociaciones italiana, española y suiza, en particular.

La sede de la reunión fue el magnífico palacio Villa Olmo en las orillas del Lago Como, donde los participantes pudieron disfrutar de extraordinarias vistas mientras comentaban las sesiones del día en torno a un buen café. Información adicional sobre el congreso puede encontrarse en la página web <http://bit.ly/GPem0z>.

La Asamblea general del GE3C, celebrada el día 11 de septiembre, ratificó el alto valor añadido de estas reuniones entre grupos especializados de distintos países y planteó el realizar la siguiente reunión en España en el año 2016.

Remitido por: **Pilar Gómez-Sal** y **Avelino Martín**, miembros de la Junta de Gobierno del GE3C.



Participantes en el MISSCA 2013.

Cristalización en la Escuela

El concurso *Cristalización en la Escuela* es una actividad que utiliza un formato ya experimentado, de gran éxito, desarrollado en los últimos años en el Laboratorio de Estudios Cristalográficos del CSIC con la dirección de Juan Manuel García-Ruiz. Este concurso nació en el año 2009 en una edición creada por García-Ruiz y Juan López Garriga, que se organizó conjuntamente entre centros educativos de Andalucía y Puerto Rico con la ayuda logística del Parque de las Ciencias de Granada. A través de los años, el concurso ha ido sufriendo modificaciones y mejoras, tanto en los materiales utilizados, como en el desarrollo de los protocolos de uso. Se han organizado ediciones del concurso en Asturias (2010), Andalucía (2009, 2013), Cataluña (2012, 2013) y una, a escala estatal (2011), en la que participaron un número reducido de centros de varias comunidades autónomas y cuya final se desarrolló en Granada.

Con motivo de la declaración por la Asamblea General de las Naciones Unidas del año 2014 como el Año Internacional de la Cristalografía, el Grupo Español de Cristalografía y Crecimiento de Cristales (G3C) ha querido organizar este curso académico el concurso a nivel nacional. Se van a realizar siete finales previas en siete zonas territoriales (Andalucía, Aragón, Asturias, Canarias, Cataluña, Madrid, y Valencia). Los ganadores de estas finales participarán en una final estatal que se celebrará en la sede central del CSIC en Madrid.

El objetivo principal del Concurso de Cristalización, dirigido a estudiantes de ESO y bachillerato, es aprovechar el atractivo natural que posee el fenómeno de la cristalización con objeto de enseñar a los alumnos cómo se hace y disfruta la ciencia, y cómo se compite en los ámbitos científicos, a través de un formato de concurso que utiliza todos los ingredientes del método científico: desde la investigación en el laboratorio, hasta la presentación de resultados en un congreso científico. El concurso propuesto posee un formato original que cuenta con cuatro fases o actividades claramente definidas:

Actividad 1. Captación y formación del profesorado de secundaria

Se llevarán a cabo un mínimo de siete cursos para profesores de educación secundaria (uno por cada sede territorial) durante los meses de octubre-noviembre con objeto de dotarles de herramientas necesarias para la realización de los experimentos de cristalización con sus alumnos. Al mismo tiempo, se pretende convencer a los profesores de la importancia de la cristalografía y la cristalización, que suele estar ausente en los programas docentes oficiales en todos los niveles educativos. Esta es la parte más importante del concurso, en el sentido de que se enseñará a los docentes la importancia y trascendencia de la cristalografía como fuente para la resolución de problemas industriales o en el estudio del binomio estructura-propiedad en numerosas áreas de desarrollo tecnológico. Todos estos conceptos serán ejemplificados con procesos y productos que utilizamos y consumimos en nuestra vida diaria.

Actividad 2. Realización de experimentos y seguimiento del concurso (investigadores-profesores-alumnos)

Durante alrededor de 3-4 meses (diciembre 2013-marzo 2014) del curso académico, los profesores de secundaria trabajarán con sus alumnos en la realización de experimentos de cristalización que les permitirá adquirir conocimientos en el campo de la cristalografía y la cristalización. En esta fase será fundamental el contacto directo y constante entre los profesores, los alumnos y los investigadores responsables en cada sede territorial, de manera que exista un flujo continuo de información entre los mismos y el aprovechamiento sea el máximo posible (esta comunicación será articulada a través de la creación de una comunidad virtual alrededor del concurso, ver actividad 4). Los estudiantes utilizarán un kit didáctico que permite crecer cristales de ADP (fosfato amónico) visualmente impactantes y a la vez con suficiente contenido científico para atraer su atención y fomentar su espíritu investigador.

Con este material, y naturalmente con el soporte inmediato de sus profesores, los alumnos podrán entender conceptos fundamentales de la cristalización (solubilidad, concentración, sobresaturación, nucleación y crecimiento de cristales) que tienen aplicación en multitud de procesos relacionados con cualquiera de las áreas de las ciencias e ingenierías. Además de ello, se les facilitará una guía didáctica que contiene una selección de numerosas fotografías y videos de crecimiento cristalino que debido a su atractiva belleza motivarán al estudiante a adentrarse en el fascinante mundo de la cristalización, a la vez que le ayudarán a entender formalmente los procesos y mecanismos implicados en el crecimiento cristalino. Con la ayuda de esta guía didáctica, el estudiante será capaz de ejecutar experimentos reales de cristalización que mejoraran el proceso de enseñanza-aprendizaje enriqueciéndose de manera dinámica y activa. Por tanto, a través de una actividad de aprendizaje entretenida y estimulante, los alumnos desarrollarán un entendimiento sólido de los conceptos implicados en los experimentos a la vez que se fomenta el interés general por la ciencia.



Espectaculares cristales de ADP, obtenidos en el IES Manuel Romero (Villanueva de la Concepción, Málaga).



Cristal gigante de sulfato de cobre (II), cristalizado en el IES Bezmiliana (El Rincón de la Victoria, Málaga).

Actividad 3. Final del concurso de cristalización

La labor experimental realizada por los estudiantes en sus centros será presentada y compartida en una acción final a modo de congreso científico. Se realizarán siete finales territoriales: Andalucía, Aragón, Asturias, Canarias, Cataluña, Madrid, y Valencia. Los ganadores de estas finales participarán en una final estatal, que previsiblemente se celebrará en la sede central del CSIC en Madrid. Las finales tendrán lugar durante un día, con un formato novedoso que simula un verdadero “Congreso Científico”. En función de la participación en cada centro, cada profesor elegirá uno o dos grupos de tres alumnos de su centro. Cada equipo de tres alumnos presentará una maqueta de los cristales obtenidos acompañada de un póster, con formato científico, en el que se detallarán los objetivos, materiales, métodos, resultados y conclusiones del

trabajo. Los alumnos deberán presentar sus resultados experimentales a un jurado de expertos cristalógrafos que valorarán la calidad del trabajo. Las finales territoriales se realizarán previsiblemente a finales de abril de 2014. La final estatal reunirá un máximo de 50 grupos finalistas, elegidos entre los mejores trabajos presentados a las finales territoriales, y se celebrará a lo largo de un día completo, previsiblemente en la primera quincena de mayo.

Actividad 4. Creación de una comunidad virtual alrededor del concurso

Ya que sólo un grupo relativamente pequeño de estudiantes (1000 alumnos aproximadamente) podrá participar en las finales del concurso, la idea que se persigue es que, a través de las nuevas tecnologías, el resto de los alumnos y otras personas interesadas puedan observar en directo parte de esas finales y plasmar sus opiniones al respecto. En otras palabras, se busca crear una comunidad virtual que actúe paralela e integrada a la comunidad presencial. Para lograr este objetivo se plantea una estrategia conjunta que une el uso de nuevas tecnologías con las redes sociales. Una opción factible es instalar una mesa o puesto de exposición conectado con una cámara IP en la sede de la final que deberá tener conexión ágil a Internet. Esta cámara permitiría hacer una conexión en vídeo-streaming a través de la cual el resto de los estudiantes, desde sus institutos y a través de internet, podrían observar una exposición breve (2 ó 3 minutos) de cada uno de los grupos participantes. Al mismo tiempo, se crearán perfiles en Facebook y Twitter utilizando, por ejemplo, el nombre “Cristales en el aula” y el hashtag en Twitter #cristales_aula. Los perfiles en las redes sociales, y sobre todo el hashtag en Twitter, servirán para que los alumnos puedan ir comentando en directo sus impresiones de las imágenes de la final. Los perfiles en redes sociales también servirán para que durante el desarrollo del concurso, todos los involucrados (estudiantes, profesores, investigadores) puedan comentar sus dudas, adelantos, expectativas; e incluso, para avivar el sentido de la competitividad, propio y necesario en el avance de la ciencia.

Remitido por: **Juan Manuel García-Ruiz**,
Laboratorio de Estudios Cristalográficos,
Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra,
CSIC-Universidad de Granada.

Identificando sustancias tóxicas

El sarín (**1**) es un compuesto organofosforado, desarrollado originalmente como pesticida en 1939 en Alemania y que es usado como arma química debido a su extrema potencia como agente nervioso. En 1993 su producción y almacenamiento fue declarada ilegal en la *Convención sobre Armas Químicas*. Su mecanismo de acción se basa en su capacidad de actuar como un potente inhibidor de la enzima acetilcolinesterasa, mediante su reacción con un residuo de serina presente en el sitio activo de dicha enzima. La inhibición de la acetilcolinesterasa lleva a una acumulación de acetilcolina en las sinapsis que finalmente conduce al fallecimiento de la víctima por asfixia, ya que se produce una parálisis de los músculos implicados en la respiración.

El empleo indiscriminado de gas sarín contra la población civil en Siria ha sido denunciado recientemente. Desafortunadamente, el empleo de dicho agente nervioso con fines maliciosos no es nuevo. El sarín ya fue empleado por el régimen de Sadam Hussein contra la población kurda en 1988 o en el atentado terrorista perpetrado en el metro de Tokio por la secta *Verdad Suprema* en 1995.

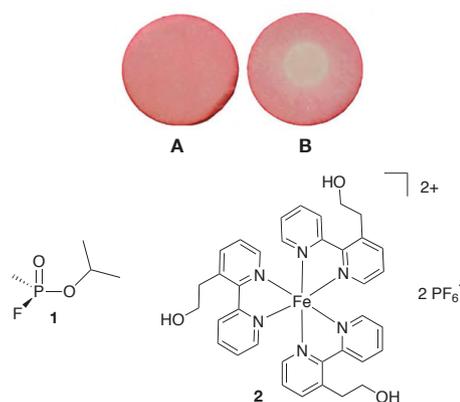
Se han desarrollado diferentes dispositivos sensores basados en técnicas cromatográficas o espectrométricas para la detección de agentes nerviosos organofosforados, pero presentan algunos inconvenientes relacionados con su elevado precio, baja selectividad, limitada portabilidad o complejidad de uso. Hay, por tanto, una necesidad de desarrollar nuevos métodos que permitan la detección de dichos agentes nerviosos de una manera rápida, barata y sobre todo de uso sencillo para la población civil.

Investigadores del LITEN (*Laboratory for Innovation in New Energy Technologies and Nanomaterials*), en Grenoble (Francia), han descrito recientemente (*Chem. Commun.* **2013**, *49*, 8946–8948) un nuevo método cromogénico para la detección de compuestos organofosforados basado en el cambio de color que se observa en un complejo de coordinación de hierro (tal como **2**) cuando es expuesto a dichas sustancias, incluida el sarín. El complejo **2** en disolución presenta un color rosa intenso, pero cuando dicha disolución se expone a la presencia de sarín, se observa una decoloración significativa. Esto se debe a que **2** es capaz de reaccionar con dicho agente nervioso a través de los grupos hidroxilo, lo que provoca una serie de cambios conformacionales en los ligandos del complejo que impiden su coordinación con el hierro.

Con el objetivo de evaluar la capacidad de este sistema para detectar agentes nerviosos en fase gaseosa (un reto mucho más complicado que en fase líquida, debido a la menor concentración de especies detectables), los autores sumergen un trozo de papel en una disolución de **2** durante unos segundos (**A** en la Figura) y a continuación lo exponen durante varios minutos a vapores de clorofosfato de difenilo (DPCP), un compuesto empleado en este tipo de investigaciones como modelo de diferentes agentes nerviosos, observándose una decoloración del papel en la zona expuesta a dichos vapores (**B**). Desafortunadamente, cuando el proceso se repite con una muestra de gas sarín, no se aprecia decoloración alguna. La menor reactividad del gas sarín se debe a la mayor energía de disociación que presenta el enlace P-F en comparación al enlace P-Cl del DPCP.

Por lo tanto, estos resultados preliminares permiten la detección de sarín en fase líquida; aunque en fase gaseosa, el método debe ser mejorado. Para ello aún queda una gran capacidad de maniobra, que incluye tanto modificaciones en la estructura química de los ligandos del complejo de hierro, con el objetivo de aumentar su reactividad; y la determinación de la cantidad óptima de complejo impregnado que permita la detección visible de trazas de sarín en fase gaseosa. En conclusión, esta investigación ofrece una nueva aproximación para el desarrollo de nuevos sensores para la detección de agentes nerviosos.

Para conocer más sobre la química y bioquímica del sarín y compuestos relacionados, se aconseja leer el post escrito por César Menor-Salván en el blog *Noticias de un espía en el laboratorio* (<http://bit.ly/1hn2HBB>, visitada el 03/10/2013).



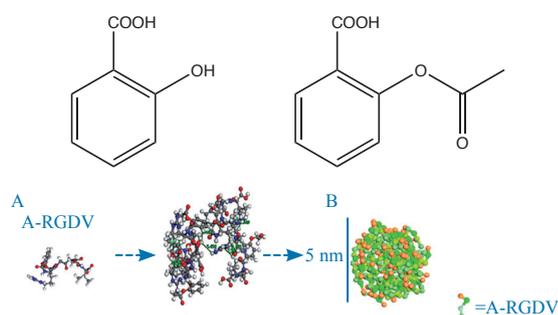
Reinventando la aspirina

Ya en el siglo V a.C., Hipócrates, padre de la medicina, usaba un preparado de hojas y corteza de sauce para tratar los dolores y la fiebre de sus pacientes. A mediados del siglo XVIII se realizó el primer estudio que demostró que las cortezas de sauce tenían un efecto antipirético. A partir de ese momento, muchos químicos trataron de aislar el principio activo. Raffaele Piria, en 1838, logró obtener de forma pura el ácido salicílico (<http://abt.cm/G6DUh>, visitada el 04/10/2013), principio activo de la corteza de sauce. Más adelante, Felix Hoffmann, que trabajaba en los laboratorios Bayer, obtuvo el crédito de ser el primero en sintetizar el ácido acetilsalicílico, aunque este descubrimiento está en discusión (*Brit. Med. J.* **2000**, *321*, 1591–1594). El ácido acetilsalicílico es realmente un profármaco del ácido salicílico; cuyas principales consecuencias son más rápida absorción y menos daño en el estómago. A finales del siglo XIX se estudiaron sus propiedades analgésicas y antiinflamatorias y comenzó a comercializarse con el conocido nombre de aspirina.

Actualmente, se siguen encontrando aplicaciones de la aspirina. Se ha estudiado su uso en el tratamiento de la diabetes, del cáncer, del Alzheimer, etc. Uno de sus usos más comunes actualmente (además de uso como agente antiinflamatorio no esteroídico, analgésico y antipirético) es el de antiagregante plaquetario para evitar la formación de trombos sanguíneos, especialmente en pacientes que ya han sufrido algún infarto

de miocardio (*Circulation* **1995**, 92, 2841–2847). En USA, 60 millones de personas toman aspirina para reducir el riesgo de ataque al corazón. Pero la aspirina no siempre funciona, hay muchos pacientes que no responden a este tratamiento; pues en ellos, la aspirina no es capaz de evitar las agregaciones de plaquetas. En estos casos se trata a los pacientes con fármacos mucho más agresivos. ¿Es esa la única solución? Por fortuna no, **pues la química puede ayudarnos.**

Recientemente, investigadores de tres universidades chinas parecen haber hallado la forma de hacer la aspirina eficaz en los pacientes “resistentes” (*ACS Nano* **2013**, 7, 7664–7673). En este artículo describen la modificación de la aspirina. Para ello, han anclado covalentemente a la aspirina una corta secuencia de aminoácidos (Arg-Gly-Asp-Val, en adelante RGDV) que es reconocida por las integrinas, unas glicoproteínas presentes en las plaquetas y muy importantes en la coagulación por ser capaces de unirse a la fibrina. Gracias a esta secuencia RGDV, se consigue la liberación eficaz y específica del fármaco en la zona afectada (el trombo).



Además de la síntesis de la aspirina modificada con el tetrapéptido RGDV (A), el artículo describe un estudio completo de las propiedades de este novedoso fármaco. En primer lugar, estudian la formación de tetrámeros (A) mediante espectroscopía de RMN y espectrometría de masas por *electrospray*. También se realiza un completo estudio de microscopía (TEM, SEM y AFM) que permite descubrir como la aspirina-RGDV forma nanopartículas de 50 nm de diámetro, formadas por 24 de los anteriormente mencionados tetrámeros (B), estables en el plasma sanguíneo de rata. Su estabilidad se comprueba también mediante ESI-MS. Por último, se estudia con detalle el mecanismo de interacción entre las integrinas y el tetrapéptido y como, gracias a esta interacción, el fármaco es capaz de liberar la aspirina en el trombo, haciendo que el fármaco llegue de manera exclusiva a la zona afectada.

Hay que destacar que gracias a la química y a los avances más recientes en nanotecnología y en bioquímica puede reinventarse un fármaco que se utilizaba hace más de 2500 años.

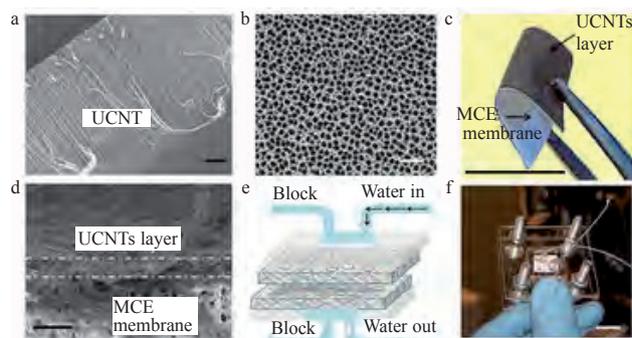
Nanotubos de carbono para purificar y desalinizar agua

Las tecnologías para la purificación y desalinización del agua, como la ósmosis inversa y procesos térmicos, implantadas a gran escala, requieren gran cantidad de energía, lo que supone unos elevados costes, unido a la dificultad que supone implantar estos sistemas en determinados países. El uso de dispositivos portátiles podría evitar estos inconvenientes y satisfacer las necesidades de agua potable. Estos sistemas, común-

mente, son de carbón activo y pueden resultar efectivos en la eliminación de contaminantes orgánicos y metales pesados, pero presentan una limitada capacidad para eliminar la sal del agua. Actualmente, los nanotubos de carbono se utilizan en el tratamiento del agua ya que presentan una gran superficie, una propiedad perfecta para la filtración; y son fáciles de modificar, lo que permite variar sus propiedades al alterar su superficie.

Un equipo de investigadores, de la *Singapore University of Technology and Design*, han desarrollado membranas de nanotubos de carbono ultra-largos modificadas con plasma, perfectas para eliminar contaminantes orgánicos, metales y sal del agua (*Nature Commun.* **2013**, 4, 2220). Estas membranas exhiben ultra alta capacidad específica de adsorción de sal, sobrepasando el 400% en peso, lo que supone dos órdenes de magnitud mayor que los actuales sistemas basados en carbón activo. Además, estas membranas podrían integrarse en dispositivos portátiles de purificación de agua.

Los investigadores planean ampliar su investigación utilizando otros materiales, como el grafeno, material que posee similitudes con los nanotubos de carbono pero es considerablemente más denso y fuerte.



Avanzando hacia una nanotecnología basada en la plata

Debido a la amplia variedad de potenciales aplicaciones en campos como la biomedicina, catálisis, óptica o electrónica; el área de la nanotecnología centrada en la síntesis y estudio de nanopartículas es un campo de intensa actividad investigadora.

Aunque la plata presenta una serie de características muy atractivas para su empleo en la preparación de nanopartículas (como son su relativa abundancia y bajo precio), el oro ha sido el gran dominador dentro de este área de investigación en los últimos años, debido principalmente a su estabilidad y facilidad de uso. A diferencia del oro, la plata presenta una conocida tendencia a oxidarse, lo cual ha sido un factor limitante a la hora de plantearse el desarrollo de nanomateriales basados en este metal. A pesar de los esfuerzos sintéticos realizados en las dos últimas décadas, la preparación de nanopartículas de plata que presentan una estabilidad a largo plazo suficientemente duradera como para poder desarrollar aplicaciones prácticas había resultado hasta ahora una tarea infructuosa.

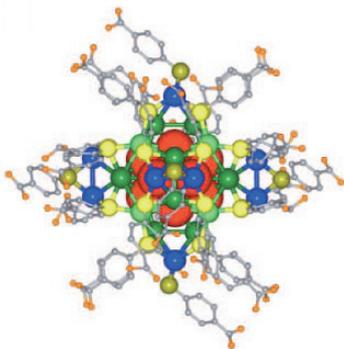
Investigadores de la Universidad de Toledo (Ohio), el Instituto de Tecnología de Georgia y la Universidad de Texas, han descrito un sencillo protocolo sintético que permite la producción de nanopartículas de plata ultraestables de un único tamaño molecular, en grandes cantidades y con

un rendimiento cuantitativo (*Nature* **2013**, *501*, 399–402). Para lograr estos resultados, los autores del trabajo han desarrollado una aproximación basada en el uso de ácido *p*-mercaptobenzóico (*p*-MBA) como ligando estabilizante, ya que dicho ligando es capaz de formar una capa “protectora” en torno al núcleo de átomos de plata de las nanopartículas, confiriéndoles una estabilidad sin precedentes.

La síntesis comprende la reducción de un precursor soluble en disoluciones semiacuosas, en presencia de cationes alcalinos y un disolvente coordinante. Por otro lado, hay que resaltar que dicho protocolo permite la obtención de las nanopartículas de plata con elevada pureza, sin necesidad de llevar a cabo ningún tipo de separación de las nanopartículas en función de su tamaño. Empleando técnicas de ionización por electrospray y análisis elemental, los autores han determinado que la fórmula molecular de las nanopartículas corresponde a $M_4Ag_{44}(p\text{-MBA})_{30}$, donde M son contraiones alcalinos. Además, son capaces de determinar que las cuatro cargas negativas del complejo están localizadas en el núcleo de plata y no en los grupos carboxilato presentes en los ligandos.

Entre otros aspectos, cabe destacar que tanto el tamaño de las nanopartículas, como su composición y estequiometría es independiente de los cambios en los parámetros experimentales, como por ejemplo la naturaleza del disolvente o la concentración de los reactivos empleados en la síntesis. Los autores también describen que la estabilidad de las nanopartículas de plata obtenidas es aproximadamente siete veces superior a la observada en nanopartículas de oro similares. Otro aspecto interesante es la escalabilidad del método, ya que permite obtener hasta 140 g de $M_4Ag_{44}(p\text{-MBA})_{30}$ en una única operación sintética. La posibilidad de llevar a cabo la preparación en escala de kilogramos es una posibilidad fácilmente realizable. La estructura cristalina de las nanopartículas (ver la Figura) presenta una elevada simetría, observándose la presencia de 4 de los 5 sólidos platónicos (la excepción es el tetraedro).

Sin duda, esta investigación es un excelente punto de partida que va a permitir el desarrollo de nuevas aplicaciones de este tipo de nanopartículas basadas en plata en diferentes áreas tecnológicas.



Desvelando la estructura de micelas

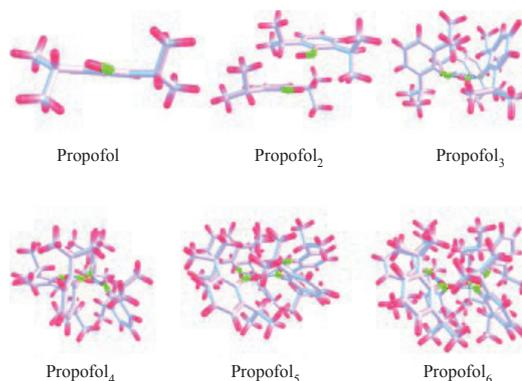
Si miramos jabón en una mezcla acuosa con un microscopio, podremos ver que el jabón crea unas macroestructuras totalmente ordenadas, formadas por numerosas moléculas que tienen dos partes, una polar y otra apolar. La parte polar es hidrófila, por lo que queda rodeada por las moléculas de agua;

mientras que los grupos apolares, que son hidrófobos, se esconden entre otras moléculas de jabón interaccionando entre sí. Así aparecen esas estructuras globulares llamadas micelas, que conforman un entorno completamente diferente al del disolvente en el que se encuentran inmersas. Esta propiedad de formar micelas resulta crucial para los seres vivos y permite, por ejemplo, la existencia de las membranas celulares. También tiene usos farmacológicos, ya que un medicamento puede viajar “escondido” en el interior de las micelas protegido del entorno hasta ser liberado en la parte del organismo donde tiene que ejercer su función. Aunque estos hechos son bien conocidos, su estudio se había limitado a sistemas macroscópicos, formados por muchas moléculas, en fase líquida.

Un avance considerable en el estudio de las micelas y las interacciones responsables de su formación ha sido descrito recientemente (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *125*, 7772–7775) por un equipo de científicos de las universidades del País Vasco, La Rioja y Valladolid; los cuales han conseguido crear micelas sin necesidad de un entorno líquido y determinar con extrema precisión su estructura.

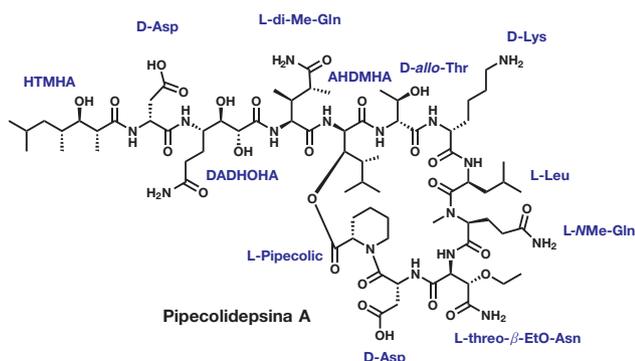
Entre las moléculas anfífilas, esto es, aquellas que como el jabón tienen un extremo hidrófilo y el otro hidrófobo y tienen la capacidad de formar micelas, se encuentra el propofol (2,6-diisopropilfenol), un anestésico ampliamente utilizado en cirugía. Los investigadores, coordinados por José A. Fernández de la UPV/EHU, han realizado su estudio con este anestésico, en fase gas, lo que permite seleccionar las moléculas sin interacciones de cualquier otra molécula del entorno. Emplearon para ello un complejo sistema experimental, que les permitió formar agregados de tamaño creciente de moléculas de propofol, y determinar sus parámetros estructurales mediante una combinación de técnicas espectroscópicas láser y cálculos mecano-cuánticos, llevados a cabo en los superordenadores de la Universidad del País Vasco (UPV/EHU) y de la Fundación i2BASQUE.

Los investigadores pudieron crear, aislar y determinar que las moléculas de propofol se autoorganizan, sin necesidad de estar en un entorno líquido, formando una estructura de micela inversa, es decir, con un núcleo hidrófilo estabilizado por enlaces de hidrógeno, y una envoltura hidrófoba formada por la interacción de la parte apolar de todas las moléculas del propofol, estabilizada por fuerzas dispersivas. Las interacciones que forman las micelas inversas descritas en este artículo son las mismas que gobiernan el plegamiento de las proteínas y la interacción entre moléculas biológicas, por lo que las conclusiones alcanzadas en este trabajo podrían ser extrapolables a otros sistemas biológicos relevantes.



Síntesis total de un antitumoral de origen marino

Los organismos marinos siguen siendo una fuente de sustancias químicas estructuralmente atractivas y biológicamente interesantes. En 2008, investigadores de PharmaMar aislaron una serie de ciclodepsipéptidos de la esponja *Homophyma lamellosa*, hallada en las costas de Madagascar; entre los compuestos aislados cabe destacar la pipecolidepsina A, que es activa *in vitro* frente a las células tumorales de once tejidos: pulmón, próstata, colon, páncreas, ovario, sarcoma, leucemia, hígado, riñón, estómago y mama. Esta alta actividad biológica hace a la pipecolidepsina A un candidato para futuros desarrollos farmacéuticos. Sin embargo, el suministro a partir de fuentes naturales es insuficiente para ensayos preclínicos, por lo que es conveniente recurrir a métodos sintéticos para su obtención.



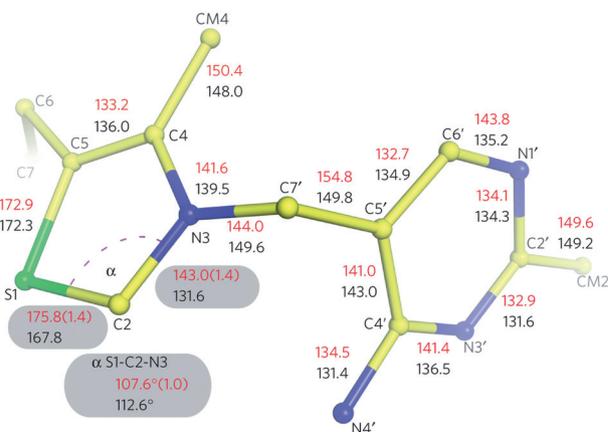
En un reciente artículo (*Nature Comm.* **2013**, *4*, 2352) se ha publicado la primera síntesis total de la pipecolidepsina. En la misma han colaborado científicos de la Universidad de Barcelona, PharmaMar, la Universidad de KwaZulu-Natal (Sudáfrica) y el Instituto de Investigación Biomédica, liderados por Fernando Albericio. La pipecolidepsina A pertenece a la familia de los ciclodepsipéptidos *head to side chain* (de cabeza a cadena lateral). Muchas de estas moléculas han mostrado actividad contra, además de células cancerosas, el virus del sida, bacterias resistentes de diversos tipos y hongos. En concreto, la pipecolidepsina A es un decapeptido de once aminoácidos y un ácido con estructura compleja y funcionalidad sensible. De los 11 aminoácidos, siete son no naturales, lo que ha implicado que se ha tenido que idear una estrategia de síntesis para cada uno. La síntesis del ciclodepsipéptido se ha desarrollado mayoritariamente en fase sólida; lo que ha proporcionado 4 miligramos de la molécula objetivo. Con esta muestra se ha podido comprobar que la actividad de la molécula sintética es comparable a la de la fuente natural, con actividad antitumoral en los tejidos indicados anteriormente. La investigación prosigue, iniciándose un programa para simplificar la síntesis, obtener análogos sintéticos, rebajar el tiempo y coste de producción, y conseguir más cantidad de pipecolidepsina A para empezar con las pruebas preclínicas.

Carbenos estables en el sitio activo de una enzima

Los carbenos son especies singulares en química. Sus seis electrones confieren a estos compuestos un especial modelo de reactividad. Es una especie sumamente inestable, pero los químicos han sido capaces de “domarla” y darle cierta estabilidad. Los catalizadores de Grubbs y toda su extensa química son un buen ejemplo.

La actividad catalítica de la tiamina (vitamina B₁) fue propuesta por Ronald Breslow en 1958 para las reacciones de condensación benzoínica. Posteriormente, un mecanismo catalítico similar fue propuesto para la reacción de Stetter. Ya en 1958, Breslow llegó a sugerir que el heterociclo tiazolio del difosfato de tiamina (la coenzima derivada de la vitamina B₁) podía existir potencialmente como un carbeno de corta duración. Esta coenzima participa en importantes procesos metabólicos, como por ejemplo en el paso de piruvato a acetaldéhiduo en la fermentación alcohólica o en el paso de piruvato a acetil-CoA, previo a la incorporación de este último en el ciclo del ácido cítrico.

En un reciente y excelente trabajo, publicado en *Nature Chemical Biology* (**2013**, *9*, 488–490), investigadores de la Universidad de Göttingen han dado un gran paso en la comprensión del mecanismo de catálisis de la tiamina. En la publicación presentan los datos espectroscópicos y estructurales de la tiamina unida a la correspondiente enzima en un complejo no covalente con el sustrato que va a catalizar. Esos datos evidencian la existencia de un carbeno estable mostrando la estructura tridimensional de la enzima y el cofactor carbeno. El título del artículo no puede ser más revelador: “*Observation of a stable carbene at the active site of a thiamin enzyme*”.



Como afirman los autores, el estudio demuestra que los carbenos estables no sólo son una invención de los químicos inteligentes, son también una consecuencia de la química innata del cofactor tiamina. Además, la interacción del carbeno con las proteínas permite destacar el versátil arsenal químico de la naturaleza. Sorprendentemente, el carbeno se estabiliza en la enzima a pH fisiológico y temperatura ambiente y en disolución acuosa, condiciones bajo las cuales se preveía que los carbenos podían sufrir una descomposición inmediata. Esta investigación puede sentar las bases para el desarrollo de nuevas clases de carbenos biomiméticos para su empleo en química orgánica.

Progresos en la química del uranio

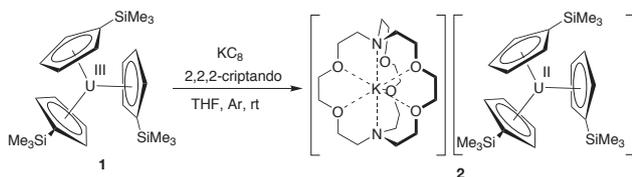
El uranio es un elemento químico metálico perteneciente a la serie de los actínidos. Con un número atómico de 92, el uranio es el elemento con mayor peso atómico de todos los elementos que se encuentran en la naturaleza. Su abun-

dancia en la corteza terrestre es aproximadamente 500 veces mayor que la del oro y similar a la del estaño. Dada su gran importancia estratégica, debido tanto a su uso como fuente de energía nuclear como a las implicaciones medioambientales relacionadas con la generación de residuos altamente contaminantes tras su uso, el estudio de su química es un área de intensa actividad.

Una de las características fundamentales de cualquier metal es la medida en la que puede ceder electrones para dar lugar a especies cargadas con diferentes grados de oxidación. Este aspecto central de la química de los metales lleva estudiándose desde hace más de un siglo, y las reglas que delimitan los estados de oxidación accesibles para cualquier metal están bastante bien definidas. El uranio presenta diversos estados de oxidación: +3, +4, +5 y +6. Los primeros intentos de sintetizar moléculas con U^{2+} en su estructura se remontan al año 1980. Sin embargo, los resultados no fueron concluyentes y no se encontraron evidencias sólidas de la presencia de U^{2+} . También se ha confirmado la presencia de U^{2+} en fase gas, pero hasta este momento la preparación de una molécula aislable con U^{2+} en su estructura no había sido descrita. La identificación de nuevos estados de oxidación es un acontecimiento relevante.

En un artículo publicado recientemente (*J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 13310–13313), investigadores de la Universidad de California han descrito la preparación, aislamiento y caracterización de un complejo molecular con U^{2+} en su estructura. La metodología desarrollada por los autores de este trabajo consiste en hacer reaccionar el complejo de U^{3+} (**1**), con un reductor potente como es el sistema potasio-grafito intercalado (KC_8) en presencia de un criptando (en particular el 2,2,2-criptando) para dar lugar al complejo de U^{2+} (**2**). Los criptandos son una familia de ligandos multidentados sintéticos, desarrollados en la década de los 1960s por el químico Charles Pedersen (trabajo por el que recibió el Premio Nobel de Química en el año 1987 junto a Lehn y Cram) y que poseen una elevada afinidad por una serie de cationes.

El complejo **2** es estable a temperatura ambiente durante varios días y su estructura es confirmada mediante estudios de difracción de rayos X. Para descartar la posibilidad de que **2** sea realmente un complejo de U^{3+} que posea un ligando hidruro no detectado en el estudio de rayos X, los autores realizan una serie de elegantes experimentos donde mediante reacciones con diversos reductores y estudios de RMN y cristalográficos son capaces de desechar tal posibilidad. Finalmente, llevan a cabo estudios computacionales y de espectroscopia UV/vis con el objetivo de examinar las energías de las posibles configuraciones electrónicas del ion U^{2+} en el complejo **2**.



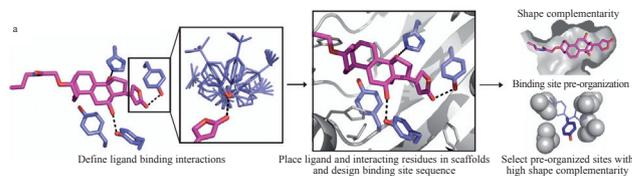
Sin duda, esta investigación aporta nuevas opciones para la exploración tanto de la reactividad como de las propiedades físicas de compuestos con uranio y pone de

manifiesto que las propiedades fundamentales de este metal tan importante por diversos motivos no están aun totalmente delimitadas.

Diseño computacional de proteínas

Un grupo de la Universidad de Washington, ha publicado en la revista *Nature* (**2013**, *501*, 212–216) un artículo donde proponen una revolucionaria metodología computacional para el diseño de mutaciones en proteínas, modulando así su afinidad hacia sus respectivos ligandos. En la actualidad, las aproximaciones experimentales se enfrentan a este problema usando técnicas que generan un gran número de ensayos que, en muchos casos, ni siquiera son suficientes para explorar el inmenso número de posibilidades. Los autores del artículo describen un método computacional capaz de proponer un reducido conjunto de mutaciones candidatas a mejorar la interacción entre la proteína y el ligando, habiendo sido capaces de probarlo en mutantes de una proteína de función desconocida (PDBID-1Z1S) y mejorar la afinidad hacia el esteroide digoxigenina (DIG). Mediante esta aproximación se han generado sólo 17 candidatos de los cuales dos han mostrado una gran afinidad hacia el compuesto y, más aún, la proteína que se predijo como la mejor candidata de manera teórica fue de hecho la que mostró una mayor afinidad.

El programa diseñado sitúa alrededor del ligando aminoácidos aislados capaces de proporcionar una buena interacción, para después buscar la concordancia entre esas interacciones ideales y la estructura de la proteína mediante la búsqueda de posiciones en la cadena peptídica que sean compatibles con dichas mutaciones. En el caso estudiado en el artículo, se optimizaron las interacciones de enlaces de hidrógeno de tirosinas o histidinas con los grupos polares del ligando DIG y fuerzas de empaquetamiento hidrófobas producidas por residuos de tirosina, fenilalanina y triptófano. Dichas interacciones fueron insertadas en los sitios de unión a DIG, seleccionando las 17 candidatas basándose en cálculos de energía de unión, complementariedad de superficies y capacidad de pre-organización de la proteína antes de unirse al ligando. Posteriormente se realizaron ensayos de “*yeast display*” y citometría de flujo, donde se pudo comprobar la afinidad de los distintos candidatos. Este método de diseño computacional de proteínas abre la puerta al desarrollo de nuevas generaciones de fármacos, biosensores y agentes diagnósticos.



Noticias redactadas por:
Héctor Busto (Universidad de La Rioja),
Fernando Gomollón-Bel (ISQCH-UZ-CSIC),
Javier Klett (Universidad CEU-San Pablo),
Enrique Mann (IQOG-CSIC),
Yolanda Pérez (Universidad Rey Juan Carlos),
César Tomé-López (Cuaderno de Cultura Científica, UPV/EHU),
Bernardo Herradón (IQOG-CSIC).



INTRODUCING

FULL-TEXT, PEER-REVIEWED PAPERS

Access your papers on sigma-aldrich.com, powered by Pubget.

Features include:

- Read open-access papers and journal subscriptions on Sigma-Aldrich.com
- Verify the effectiveness of Sigma-Aldrich products in an application performed by your peers
- Add products to your shopping cart while you read peer-reviewed papers

Accessing full-text papers
has never been easier

Watch our video online to learn how it works
sigma.com/searchsigma

Powered by
pubget

©2013 Sigma-Aldrich Co. LLC. All rights reserved. SIGMA and SIGMA-ALDRICH are trademarks of Sigma-Aldrich Co. LLC, registered in the US and other countries. Where bio begins is a trademark of Sigma-Aldrich Co. LLC.

SIGMA

ALDRICH

Fluka

SUPELCO

SAFC

SIGMA-ALDRICH