

Formas y conformaciones de anillos y cústeres inorgánicos de cuatro átomos.
Un estudio estructural mediante medidas continuas de forma,
Santiago Álvarez

Algunas reflexiones sobre el futuro de la química computacional, José Elguero

No solo química, Luis Oro

ISSN: 2792-520X



Anales de Química de la RSEQ

Revista de la Real Sociedad Española de Química

Editor General

Miguel Ángel Sierra

Universidad Complutense de Madrid

Comité Editorial

Fernando P. Cossío

Universidad del País Vasco y DIPC San Sebastián-Donostia

José Manuel Costa

Universidad de Oviedo

Óscar Millet

CICbioGUNE, Derio, Bizkaia

Gabriel Pinto

Universidad Politécnica de Madrid

M.^a Carmen Redondo

Colegio Estudio, Madrid

Elena Sáez

Universidad Complutense de Madrid

Miquel Solà

Institut de Química Computacional i Catàlisi, Universitat de Girona

Rolando A. Spanevello

Universidad Nacional de Rosario, Argentina

Joaquín Tamariz

Instituto Politécnico Nacional, México

Alejandro Toro-Labbé

Pontificia Universidad Católica de Chile

María C. de la Torre

Instituto de Química Orgánica General, CSIC, Madrid

Otilia Val-Castillo

IES Luís Simarro Lacabra, Xàtiva, Valencia

Secretaría Editorial

Patricia Yáñez-Sedeño

Real Sociedad Española de Química

www.analesdequimica.es

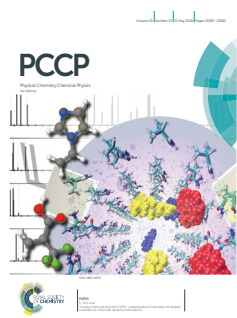
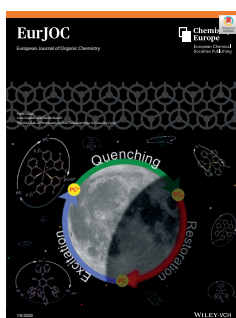
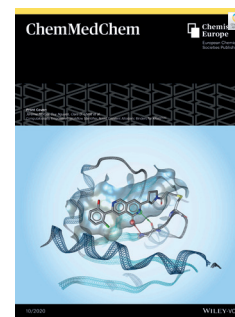
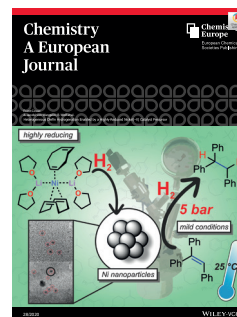
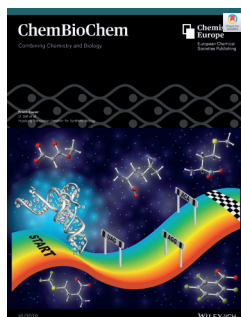
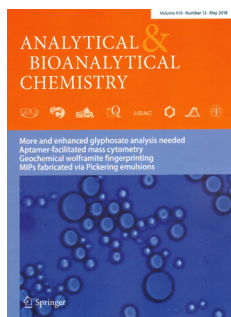
Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense Ciudad Universitaria.

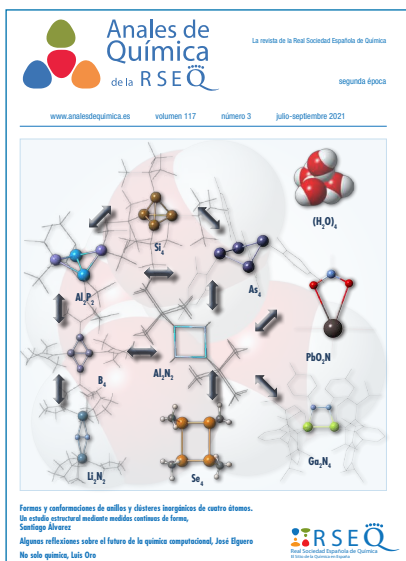
28040 Madrid

Tel (+34) 913 944 356



Revistas patrocinadas por la Real Sociedad Española de Química





Diseño, composición y producción:
Moisés Fernández
 Edinova Taller Editorial

An. Quím., 117 (3), 2021, 195-250
 ISSN: 2792-520X
 e-ISSN: 2792-5250
 D. L.: M-232-1958

Editorial	198
Miguel Ángel Sierra	
Ensayo	
CHIMIA and the Swiss Chemical Society	200
Gillian Harvey	
Algunas reflexiones sobre el futuro de la química computacional	203
José Elguero	
La Química española vista por sus protagonistas	
No sólo química	209
Luis Oro	
Investigación Química	
Formas y conformaciones de anillos y clústeres inorgánicos de cuatro átomos.	
Un estudio estructural mediante medidas continuas de forma	219
Santiago Álvarez	
Enseñanza de la Química	
Innovación educativa en Física y Química en tiempos de pandemia. Una iniciativa para destacar la labor del profesorado en una etapa histórica singular	226
Gabriel Pinto Cañón y Luis Moreno Martínez	
https://www.melocoton.es – Un dominio seguro de nuestra huerta	233
Francisco Rojas	
Actividades no formales como estrategia para abordar el currículo de Física y Química.	
El Concurso de Cristalización en la Escuela	240
Jorge Martín-García y María Eugenia Dies Álvarez	
Artículos reseñables	
Conversión de alcanos gaseosos en derivados de amidas	246
Pedro J. Pérez y Ana Caballero	
Radicales (muy) libres	
<i>Fair Play</i>	247
Javier de Mendoza	
Obituario	
Carlos Pico	249

EDITORIAL

Miguel Ángel Sierra

Han pasado muchas cosas desde mi última editorial. La más importante es que la pandemia parece que empieza a remitir. Nos hemos ido de Afganistán, se han iniciado los vuelos espaciales comerciales, hemos cambiado de ministro de Ciencia, incluyendo el notición de que se ha incrementado un 60% la inversión en Ciencia en España (algo que debe saber el ministro saliente pero que los demás desgraciadamente no hemos notado), y los chinos han encendido su propio reactor nuclear de torio. Además, tenemos una nueva ley de educación que acaba con el trauma de tener que repetir curso y, casi seguro, una revolucionaria ley de acceso al profesorado universitario en la que se indica que no serán necesarios filtros previos. Entiendo que son tiempos de crisis y que, según dicen los pedantes, en chino oportunidad y crisis tienen el mismo ideograma. Lo que pasa es que yo no veo ningún chino a mi alrededor. Por supuesto, hay otras muchas noticias porque el mundo está cambiando a marchas forzadas, pero listarlas aquí ocuparía mucho espacio y sería aburrido.

En medio de estos tiempos tan interesantes hay una noticia que, por supuesto no ha trascendido a los medios de comunicación, pero que puede ser crucial para la Ciencia del siglo XXI: a principios de 2022 la Universidad de Utrecht abandonará los factores de impacto, incluyendo el índice h , para considerar la contratación de un científico o su promoción. La razón principal detrás de esta postura es que «Los factores de impacto realmente no reflejan la calidad de un investigador o un universitario... creemos que algo tiene que cambiar y abandonar el factor de impacto (o el índice h) es uno de esos cambios». Esta decisión trascendental se inspira en la Declaration of Research Assessment (DORA) que, desde su presentación en 2012 ha sido apoyada por cerca de 20.000 investigadores e instituciones docentes e investigadoras. En el fondo es una forma de acabar con la producción masiva de publicaciones y favorecer la buena ciencia.



Indudablemente, la decisión de la Universidad de Utrecht es arriesgada puesto que, hasta que esta corriente se imponga, y ojalá lo haga por el bien de la ciencia, los investigadores que vengan de la Universidad de Utrecht estarán en desventaja frente a otras universidades. No obstante, como en otras tantas revoluciones, el paso más difícil de dar es el primero.

Estamos entrando en un terreno nuevo con la «Open Science» como bandera. La Unión Europea en su *report de 2019 «Indicator frameworks for fostering open knowledge practices in science and scholarship»* apuesta (no claramente, la Unión nunca se moja) por la opción que ha seguido Utrecht y, aproximadamente un 60% de las universidades de Norteamérica, entre ellas las más importantes, no tienen criterios basados en índices bibliométricos en sus paneles de selección. Por supuesto las empresas esto ni se lo plantean.

¿Puede aplicarse este avance rompedor a las universidades españolas? Lo dudo mucho. Y esto dejando aparte las veleidades respecto a la contratación y consolidación del personal universitario del ministro Castells (poco puede

esperarse de alguien que inaugura su mandato diciendo que no cree en su ministerio), que espero sean solo eso, veleidades. Desde que tengo recuerdos siempre se han utilizado sumas y restas para contratar o promocionar a un candidato. Cuando publicar artículos era algo mucho más raro que ahora se usaba el número de artículos, después al comenzar la bonanza investigadora era el índice de impacto de las revistas, después llegó el Santo Excel con su panevanglio y el resultado de sumar y restar una serie de datos es el que decide si un candidato pasa o no. Tengo que decir que en las múltiples comisiones en las que he estado nunca nadie leyó o comentó la calidad de un artículo presentado por un candidato. Me consta que los gestores de los distintos programas de selección y los presidentes de las comisiones de acreditación intentaron, por activa y por pasiva, y a veces frente a presiones políticas fuertes, que eso no fuera así, que era necesario entrevistar al candidato. Pero, para nuestra desgracia, no lo consiguieron. El Evangelio del Santo Excel se ha extendido y se ha impuesto como herramienta absoluta y decisoria.

Sobre la importancia de los valores bibliométricos baste decir que, en base a estos criterios, Watson y Crick ($h = 9$ y $h = 12$ cuando publicaron su artículo sobre la estructura del ADN) o Einstein ($h = 9$ al recibir el premio Nobel de Física) no hubiesen sido considerados como candidatos para un contrato Juan de la Cierva. Es ridículo, pero es así. Estoy seguro de que una entrevista de 10 minutos con Einstein hubiera dejado claro si merecía o no el contrato. No me cabe duda ni del valor como referencia que este número tiene ni de que Hirsch publicó la definición del índice h con la mejor intención (y escepticismo) del mundo. Pero nada más. Como todo, el índice h se puede manipular, ajustar, incrementar etc., especialmente en países en los que lo único que se valora es la cuantificación y se evitan las entrevistas como si fuesen obra del diablo (todavía no he conseguido descubrir cómo se puede tener un índice h negativo, pero estoy en ello). Un presidente de la ACS me contaba que estaba entrevistando a un candidato para ocupar una vacante en un centro de investigación del más alto nivel. Su índice h era discreto y además estaba predispuesto en contra de éste por su actitud, hasta que el candidato empezó a hablar y a exponer sus ideas sobre la química que quería desarrollar. Ni que decir tiene que el candidato logró el puesto y, desde luego, puedo garantizar que el comité no se equivocó. Otro investigador que sin una entrevista no hubiese pasado.

¿Podemos dejar el futuro de un investigador en manos de una hoja Excel que, entre otros muchos defectos no suele incluir la edad del candidato? No lo creo. Cada persona es única y es mucho más que una serie de datos. ¿Es tan difícil que una comisión (endogámica como decía con razón nuestro presidente en su anterior carta, porque así tiene que ser, es el departamento contratador el que se juega su prestigio en un proceso de selección) elija un candidato, le entreviste y le dé una plaza? Después de cinco años, una nueva evaluación y, si ha cumplido en investigación y, si procede, en docencia, se le renueva. En caso contrario puede buscar otro sitio en donde trabajar. ¿Estoy soñando o es, como me dijeron en su momento públicamente, mi estúpida for-

mación americana? Pero es que ya ha pasado en este país. La primera ley de Educación socialista, la famosa LRU, establecía la figura de Ayudante, después Ayudante Doctor y en cinco años la estabilización como Profesor Titular. Si no, pues a buscar otro sitio en donde trabajar. No funcionó. Las universidades, en su infinita sabiduría, hicieron Profesores Asociados a todos aquellos Ayudantes (doctores o no) que no habían obtenido plaza y se cargaron el espíritu de la ley.

No hay que irse al extranjero para encontrar ejemplos de que el sistema propuesto en la LRU es efectivo. Sin ir más lejos, Ikerbasque funciona de esa forma y no les va nada de mal. Las malas lenguas dirán que en este caso es por que los vascos tienen mucha pasta. En fin, ya sabéis lo que decía *Dirty Harry* sobre las opiniones.

Dudo mucho que Hirsch pensase en las consecuencias de su índice para la comunidad científica (no voy a hablar por ejemplo de la hiperinflación de publicaciones procedentes de China, una parte muy importante de escasa calidad o simplemente de dudosa veracidad) pero es un buen exponente del daño que puede hacer la pura bibliometría en la promoción científica. Deberíamos pedir que, al igual que la Universidad de Utrecht, se consideren otros parámetros en la contratación y en la promoción de los científicos españoles. Seguro que hay una cierta correlación entre los indicadores bibliométricos y las aptitudes investigadoras de una persona, pero así, al menos algunos, nos quedaríamos más tranquilos.

Un último factor para considerar es la edad del investigador (con las correcciones lógicas derivadas de la maternidad y circunstancias similares). Estamos contratando a investigadores senior en puestos que deben ocupar investigadores jóvenes. Esto va en detrimento de la capacidad de renovación de la red investigadora del país y de los propios investigadores. Los currículos se incrementan con la edad. Lo que no se considera (de nuevo el Santo Excel) es el grado de independencia investigadora, ni la proyección de futuro de un investigador. Evidentemente, no es lo mismo un doctor con 32 años que uno con 40 (aunque legalmente sean «jóvenes»). Un investigador de 40 años es un investigador senior y debería ser un investigador independiente y consolidado, no «emergente». Esto no lo tiene en cuenta el sistema, al menos hasta donde yo sé. ¿Os imagináis lo que hubiera pasado en el proyecto DARPA si hubiese contratado solo a investigadores senior? Probablemente seguiríamos usando correo en papel y no tendríamos ni Google ni GPS. Menciono el proyecto DARPA porque la Unión e Inglaterra están pensando en implementar proyectos análogos a éste, y seguro que algo nos llegará. Espero que no cometamos los errores de contratar a los investigadores de este proyecto (si llega) o de ningún otro usando una hoja Excel.

Me he extendido demasiado, pero puedo resumir esta editorial en una frase «valen más cinco minutos de entrevista que 100 hojas Excel y un índice h enorme».

Gracias por leer.

MIGUEL Á. SIERRA
Editor General de Anales de Química de la RSEQ

ENSAYO

CHIMIA and the Swiss Chemical Society

Gillian Harvey



G. Harvey

Chairperson of the CHIMIA
Editorial Board
E-mail: chimia.tr@bluewin.ch

Recibido: 03/08/2021
Aceptado: 06/09/2021

Gillian Harvey completed her chemistry education in the UK (BSc, University of East Anglia; Norwich, PhD, University of Aberdeen). After a year on a Royal Society Fellowship at the Zentralinstitut für Anorganische Chemie, Akademie der Wissenschaften der DDR, Berlin, in 1986, she moved to the ETH as a post-doc in the Institute for Crystallography and Petrography (1986-1988) and then as Oberassistentin at the Institute for Technical Chemistry (1989-1996). Since 2000, she has worked as the Technical Editor for CHIMIA and since 2019 she has also taken over the Chair of the Editorial Board.

CHIMIA

As the society journal of the Swiss Chemical Society (SCS), CHIMIA (chimia.ch) represents and informs the wider chemistry community in Switzerland: in academia, industry, education... and has done so for nearly 75 years, evolving and growing along the way. CHIMIA is published 10 times a year and each issue features scientific articles and extensive Society news. Each year two issues celebrate the Swiss Chemical Society prizewinners: the Junior Laureates in issue 4 and the Major Awards in issue 7/8. The remaining eight issues are dedicated to special topics chosen by the Editor-in-Chief and realised by a Guest Editor, who is an expert in the respective field and generally comes from Swiss Academia or Industry.

These scientific articles by invited authors are presented in topical issues that are subjects of current significance in chemical research. The topics covered reflect the increasingly interdisciplinary nature of chemistry; recent topics include Chemistry and the Environment, Swiss Start-ups, Radiochemistry, Colloidal Nanocrystals, Peptide Chemistry in

Switzerland. The articles are generally written in a review format to be accessible to the wider chemistry community and are peer-reviewed before acceptance

CHIMIA is the main information channel of the Swiss Chemical Society and this is reflected in recurring columns produced by the Divisions of the SCS, Community News and Events.

CHIMIA is published almost exclusively in English although the authors do have the option of writing their articles in one of the official Swiss languages (German, French, Italian, Romansh). German is most frequently used, although not often. The Swiss Chemical Society also communicates extensively in English to be inclusive for all its members: The Swiss universities welcome many foreign students and teach, after the first year, in English. Many graduates then go on to work in Swiss academia and industry and English frequently remains the common language for communication.

Swiss Chemical Society

The Swiss Chemical Society (scg.ch) is the publisher and owner of CHIMIA and represents scientists active in the chemical sciences and related disciplines in Switzerland and in 50 countries worldwide. The current membership is about 2700 and members receive CHIMIA as a printed journal as part of their membership. The key initiatives of the SCS include the organisation of scientific meetings, congresses and courses (15-20 events per year). For example, the SCS Fall Meeting is the biggest chemistry conference to take place annually in Switzerland with more than 1000 participants and offers junior scientists the opportunity to present oral and poster presentations, often for the first time. Due

to the Covid pandemic, the Fall Meetings successfully took place as online meetings in 2020 and 2021 with short videos in place of posters proving particularly popular, but the intention is to return to an in-person meeting in 2022. The Society promotes the exchange of scientific and technical knowhow and enables networking for academic and industrial chemists and current SCS key initiatives are aimed at creating contact to related scientific fields, such as: Chemistry and the Environment, Materials Sciences, Flow Chemistry, AI/Computational Chemistry. In addition, the SCS Academy offers training courses in the chemical and pharmaceutical sciences. The courses are conducted in collaboration with industrial partners and the intention is to expand the curriculum over the next years. The website of the SCS shows the extent of the networking to include 25 thematic and social communities. The Society represents the interests of its members in national (SCNAT, SATW) and international organisations (EuChemS) and is also an active member of Chemistry Europe, as part owner of *Helvetica Chimia Acta* and holds shares in further scientific journals.

Origins of CHIMIA

In 1946, the predecessor of the SCS, the Swiss Chemists' Association, voted to create a new journal with the name of CHIMIA to replace the *Schweizer Chemiker-Zeitung & Technik-Industrie*. The first issue was published at the beginning of 1947, with the declared objectives to aid in the training and further education of chemists, to inform them of scientific and technological advances, the economy, patent law, careers and politics, to publish scientific articles and reports. The objectives were ambitious and reflected the hope of new beginnings in the post-war era. CHIMIA has been published uninterrupted since then and all articles since 1990 are available online (Ingentaconnect.com) in open access and reflect the changing interests of academic and industrial research. The close association of the SCS to the chemical industry in Switzerland is an important aspect of the content that continues to this day.

In 2021, we are celebrating the 75th volume with invited contributions from representatives from research industry, education society etc. to present their future perspectives in chemistry and society. All the contributions will be gathered together in a single virtual issue at the end of the year and be made freely available.

Current Role of CHIMIA

Up to 2019 CHIMIA was a subscription journal, earning some of the income for its production through library subscriptions. Most of the remaining production costs were and are carried by the SCS. The move in Europe towards Open Science and Open Access for journals led to discussions in the SCS and the CHIMIA Editorial Board and it was decided to flip CHIMIA to a fully Open Access journal from January 2020 onwards. The Platinum OA model was cho-

sen, which means that there are no charges to our invited authors or to the readers of the online version. In 2020, the articles are subject to the CC_BY_NC 4.0 licence, from 2021 onwards the licence CC_BY 4.0 will apply to all scientific articles. The authors retain copyright of their work. The print version is produced as before and delivered to individual and institutional SCS members and is available as a print subscription. The full issue as a pdf is available to SCS individual and institutional members and subscribers.

The Swiss Chemical Society continually seeks to grow and expand its contacts to related scientific fields: Chemistry and the Environment, Material Chemistry, Flow Chemistry, AI/Computational Chemistry, etc. Where possible the activities of the Society are reflected in the content of CHIMIA, e.g. the Green and Sustainable Chemistry issue in September 2019 coincided with the same topic at the SCS Forum at ILMAC, the Basel chemistry trade fair held in partnership with the SSC, or the Chemistry and the Environment issue (3/2020) to mark the launch of the new SCS section 'Chemistry and the Environment' and the Spring Meeting in 2021 on the same subject. In addition there is an extensive column section where all Divisions are encouraged to produce short articles featuring innovations in their fields.

Information for the SCS membership is included in the Community News and Events sections and includes information about upcoming conferences, lectures, award programmes and news from the chemical industry.

The layout and front cover design of CHIMIA have been updated over the past two years and the guest editors are invited to provide a striking image for the front cover (Figure).

In the immediate future, the plan is to host the journal entirely on one online platform, which is scheduled to be completed at the beginning of 2022. This will enable one-stop access from submission through to online publication and all articles, columns and information will be visible and directly available for download. The new website will be based on the OJS system and CHIMIA is one of the few journals that will migrate its content (31 years of metadata and full text equivalent to 31'000 pages) to OJS using a technological approach. Except for the input format, there is no support by PKP, the producer of OJS, to supply scripts or plugins to ease migration. Therefore, the migration procedure and code is being developed by the Webeditor. This task is being undertaken by a member of the CHIMIA Editorial Board on a voluntary basis for an honorarium. There is only one person employed for the production of CHIMIA (the Technical Editor) supported by the SCS Head Office. All the other members of the EB donate their time and efforts freely and are vital to the smooth running of the journal.

The objective is to improve the visibility of CHIMIA online, far beyond the borders of Switzerland, generating interest in the excellent research being undertaken in academic and industrial labs in Switzerland. CHIMIA is listed in the most important databases: Current Contents/Physical, Chemical and Earth Sciences, Chemical Abstracts, Science Citation Index, Research Alert, Scisearch, Index Chemicus, Chemistry Citation Index, Current Chemical Reactions,

Reaction Citation Index, Biological Abstracts, and the Directory of Open Access Journals.

The Swiss Chemical Society and the Editorial Board are working together to ensure that CHIMIA will continue to thrive and evolve to its 100th anniversary and beyond. When CHIMIA was originally conceived, it was one of the main channels that chemists could access information about scientific progress, job opportunities and advances in industrial production and was certainly eagerly anticipated each month. In the 21st century, with a 24-hour news cycle and social media, the role of a Society journal and indeed the Society itself has to adapt. By maintaining the special

topic issues, we give established scientists the opportunity to write about their subject in a way that is interesting and comprehensible to a wide readership, new professors can present their research to their new colleagues in Switzerland and, in addition, the many networks of the SCS can present their activities directly to their members. All this is only possible thanks to the active and enthusiastic input from the Swiss chemical community: as authors, guest editors and members of the SCS and CHIMIA boards. We are grateful to everyone who has been involved in the past to get us where we are today and to anyone thinking of joining us: you are very welcome!

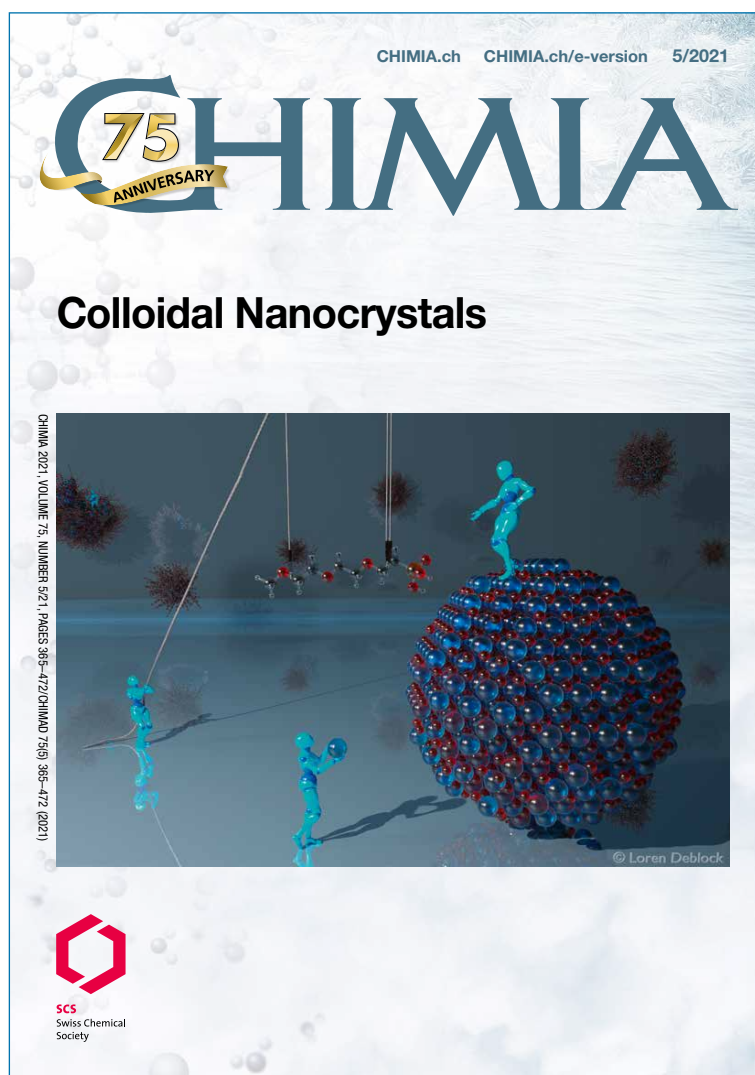


Figure caption. The front cover of CHIMIA 5/2021: 'Colloidal Nanocrystals' as an example of the excellent artwork provided by the guest editors and their coworkers, in this case Prof. Jonathan De Roo and Loren DeBlock, University of Basel.

ENSAYO



J. Elguero Bertolini

Instituto de Química Médica (CSIC)
C-e: iqmbe17@iqm.csic.es

Recibido: 23/06/2021

Aceptado: 24/06/2021

ORCID: 0000-0002-9213-6858

Algunas reflexiones sobre el futuro de la química computacional

José Elguero

Hace unos días, durante la reunión virtual del Grupo de Química y Computación de la RSEQ, pronuncié una charla titulada «Cara y cruz de la química computacional»; al final de ella, Fernando Cossío, más por amistad que por otra cosa, sugirió que se podría publicar en Anales si los censores lo consideran oportuno. Es evidente que no se trata de poner una tras otra las imágenes acompañadas de unos pequeños textos, así que esto es un intento de metaconferencia.

Para empezar y contrariamente a otras disciplinas de la química con nombres bien definidos reflejados en sus principales revistas, como es el caso, por ejemplo, de la química orgánica (*J. Org. Chem.*, *Eur. J. Org. Chem.*, *Org. Lett.*, *Org. Biomol. Chem.*, *Beilstein J. Org. Chem.*) o la inorgánica (*Inorg. Chem.*, *Inorg. Chim. Acta*, *Eur. J. Inorg. Chem.*) esta rama de la química tiene tres nombres: química computacional (*J. Comput. Chem.*), química teórica (*Theor. Chem. Acc.*) y química cuántica (*Int. J. Quantum. Chem.*), que se usan indistintamente, al menos cuando uno elige donde publicar, pero que son diferentes (¿qué tiene de cuántica la dinámica molecular en sí misma o parte del premio Nobel a Martin Karplus aparte del uso de parámetros para los campos de fuerza basados en cálculos cuánticos?). Incluso los hay híbridos (*Comput. Theor. Chem.*, *J. Chem. Theor. Comput.*) lo cual demuestra que son términos diferentes: cuántica es el más pequeño y definido, teórica es mayor y casi se confunde con el siguiente (¿cómo hacer teoría sin un ordenador?) y computacional es el mayor (Figura 1). Así que el nombre del Grupo está bien elegido.

La conferencia empezaba con un poco de historia, como no podría ser de otra manera dada la edad del conferenciante. Recordaba que en los veinte años que

trabajé en Montpellier no hubo ningún químico teórico ni en la Universidad, ni en la Escuela Superior de Ingenieros Químicos, ni en el CNRS, problema que no se resolvió hasta la llegada de Odile Eisenstein en 1996.

En el curso de mi tesis (1961) se planteó el problema de la tautomería anular de los pirazoles (en rojo), problema que pronto se extendió a todos los azoles (Figura 2), dando lugar a una publicación de 1969 (Figura 3).

En el célebre libro de 1939, *The Nature of the Chemical Bond*,^[1] Linus Pauling ya discute la tautomería de los pirazoles que, con los imidazoles y los bencimidazoles, pertenecen al grupo de la tautomería degenerada o autotropía (ambos tautómeros son idénticos salvo si llevan un sustituyente en la posición adecuada; en el caso de Pauling, el 3(5)-metil-1*H*-pirazol).

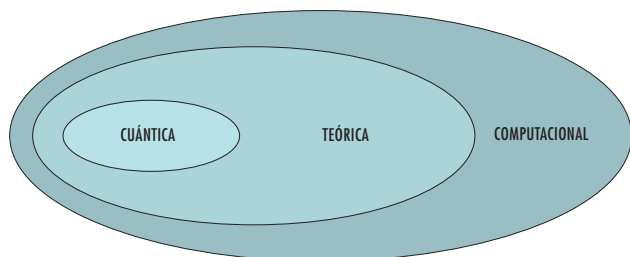


Figura 1. Los tres nombres de unas disciplinas relacionadas.

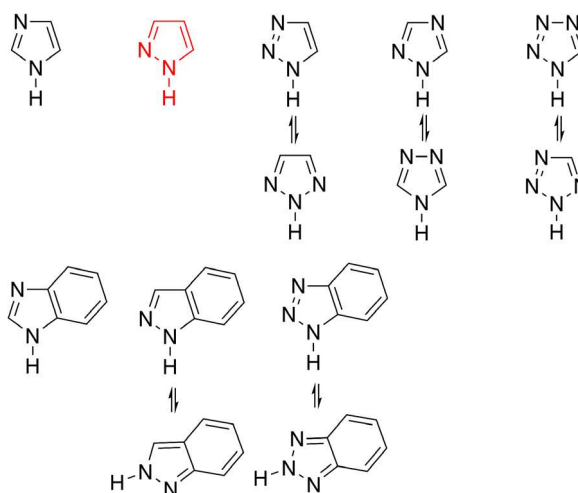


Figura 2. Los cinco azoles y los tres benzazoles.

Tetrahedron Letters No. 6 pp. 495-498, 1969. Pergamon Press. Printed in Great Britain.

RECHERCHES DANS LA SERIE DES AZOLES.

XLIII. ETUDE PAR RMN DE LA TAUTOMERIE DES AZOLES.

M. L. Roumestant, P. Viallefont, J. Elguero et R. Jacquier

(Service Chimie PC 1, Faculté des Sciences, Place Eugène Bataillon, 34-Montpellier)

avec la collaboration technique d'E. Arnal (E.N.S.C., 8, rue de l'Ecole Normale, Montpellier).

(Received in France 28 December 1968; received in UK for publication 2 January 1969)

Les pyrazoles, imidazoles, triazoles-1,2,3 et -1,2,4 et tétrazoles non substitués à l'azote présentent en RMN des signaux moyens dûs à un échange très rapide du proton entre les différents atomes d'azote. Ceci est vrai pour la plupart des solvants, même à basse température (*).

Figura 3. La publicación, ¡en francés! de *Tetrahedron Letters*.

La comprensión de la tautomería anular de los azoles no se podía alcanzar sin cálculos teóricos o, mejor dicho, las explicaciones cualitativas existentes en la literatura dejaban mucho que desear. A mi director de tesis, Robert Jacquier, se le ocurrió contactar con uno de los mejores teóricos franceses, André Julg, que era profesor en la Universidad de Marsella, ciudad situada a 170 km de Montpellier.

André Julg salía de la École Normale Supérieure de Paris, un centro con enorme prestigio (13 premios Nobel, 10 medallas Field), a mi entender irrepetible. Fue alumno de Louis de Broglie y mantuvo relaciones con Paul Dirac durante su tesis dirigida por Gaston Berthier a su vez alumno del matrimonio Pullman, Bernard y Alberte. Julg introdujo el método LCAO-SCF y lo aplicó con éxito a los hidrocarburos aromáticos no clásicos, pentaleno, fulveno y azuleno. Explorando sistemas aromáticos originales pasó del benceno al furano (clasificado como aromático por Robinson en 1925). Del furano al pirrol solo hay un paso y del pirrol al pirazol solo otro más.

Cuando Jacquier contactó con Julg este le indicó que la persona adecuada era Louis Pujol con quien había publicado el trabajo del furano.^[2] Así es que fui a Marsella a ver

a Pujol, del que luego comentaré algo. Este investigador, junto con su alumno Michel Roche, publicó entre 1969 y 1971 tres trabajos que fueron esenciales para nuestra comprensión de la tautomería de los azoles (Figura 4).

Unas palabras sobre Louis Pujol. Tuvo dos prestigiosos alumnos: Guy Pouzard (fallecido en 2020 fue Rector de la Universidad de Aix-Marsella) y Paul Tordo. Un día de 1959, André Julg paseaba por las colinas que rodean Marsella del otro lado del mar. Allí encontró a un pastorcillo con sus ovejas. Se dio cuenta de que, a pesar de no saber leer ni escribir, poseía una viva inteligencia. Así es que convenció a sus padres para que lo dejaran ir al colegio y que él se haría cargo de todos los gastos. El resultado fue espectacular. Pastor analfabeto a los 14 años, doctor en ciencias a los 21 (Tesis, Marsella, 1966). Un día abandonó la investigación porque, me dijo, no iba a alcanzar las metas que se había propuesto. Un exceso de autocrítica puede ser fatal.

Se cuenta de que Napoleón decía que sus soldados llevaban un bastón de mariscal en sus mochilas; los estudiantes de tesis deben llevar un premio Nobel en sus ordenadores. Si no, qué sentido tiene iniciar una carrera de científico. Pero si al cabo de algunos años después de acabar la tesis, digamos diez, ven que no van a alcanzar el premio Nobel, eso no les debe desanimar: ¡aún queda mucho sitio!

Yo, que desde entonces he conocido a tanta gente (he publicado con más de 2.000 coautores diferentes), no he vuelto a conocer a alguien como Louis.

Después de Louis he colaborado con muchos químicos teóricos, que inicialmente han tenido la generosidad de interesarse por nuestros problemas y posteriormente de establecer una colaboración duradera. He aquí algunos de ellos (las cifras no se deben sumar porque en muchos trabajos coinciden algunos). He puesto a Joan Bertrán el último para llamar la atención del respeto que le tengo.

Paso ahora a señalar las cruces y las caras de la química teórica (QT). Primero las cruces.

Demasiado barata. Puede parecer una broma, pero no lo es. He oído decir que cuanto más bajo es el PIB de un país mayor es la proporción de química teórica con relación a las químicas experimentales. Muy aproximadamente en España los proyectos de investigación de tres años son fi-

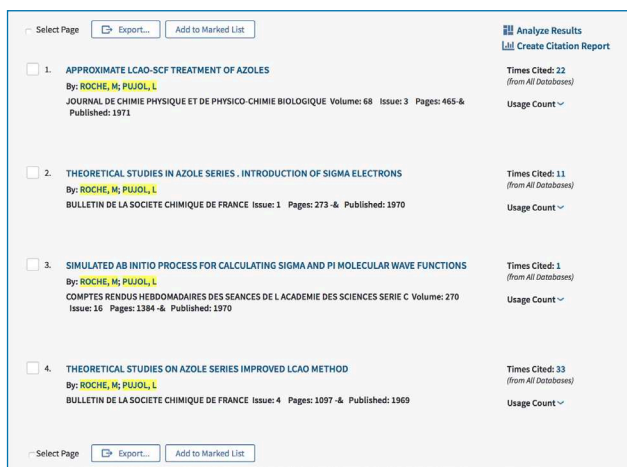


Figura 4. Los cuatro trabajos de Roche y Pujol.

Tabla 1. Investigadores(as) con los que he colaborado (n.º: número de publicaciones)

Investigador(a), país	n.º	Investigador(a), país	n.º
Ibon Alkorta, España	707	Michel Sana [†]	4
Janet del Bene, EE. UU.	138	Manuel Alcamí, España	4
Manuel Yáñez, España	109	Georges Leroy [†]	4
Otilia Mó, España	109	Daniel Liotard, Francia	4
Isabel Rozas, Irlanda	63	Markku R. Sundberg, Finlandia	4
Goar Sánchez-Sanz, Irlanda	63	Marina Sánchez, Argentina	4
Javier Catalán, España	54	Gustavo A. Aucar, Argentina	3
Fernando Blanco, España	49	Alain Dargelos, Francia	3
Cristina Trujillo, Irlanda	39	Jacques Teyssyre, Francia	3
M. M. Montero-Campillo, España	33	Leticia González, Austria	3
José Luis García de Paz [†]	26	Francisco Tomás, España	3
Marta Marín-Luna, España	21	Gonzalo Jiménez Osés, España	2
Rafael Notario, España	15	Obis Castaño, España	2
Krystof Zborowski, Polonia	15	Max Chaillet, Francia	2
Luis-Miguel Azofra	15	Zvonimir B. Maksic [†]	2
Oscar Picazo, España	12	Mirjana Eckert-Maksic, Croacia	2
Patricio F. Provasi, Argentina	11	Jordi Poater, España	2
Josep M. Oliva-Enrich, España	9	Miquel Solà, España	2
Oriana Brea, España	9	Vladimir I. Minkin, Rusia	2
Marta Ferraro, Argentina	8	José Antonio Dobado, España	1
Jean Arriau, Francia	8	Leo Radom, Australia	1
Carlos Jaime, España	8	Paul von Ragué Schleyer, EE. UU.	1
Rodney J. Bartlett, EE. UU.	7	Judith I. Wu, EE. UU.	1
Ajit F. Perera, EE. UU.	7	Michel Rajzman, Francia	1
Minh Tho Nguyen, Bélgica	7	Guy Pouzard [†]	1
Pablo Sanz, España	7	Henri Sauvaitre, Francia	1
Inés Corral, España	6	Santiago Olivella, España	1
Federico Gago, España	6	Mariona Sodupe, España	1
Stephan P. Sauer, Dinamarca	5	Fernando Cossío, España	1
José Ignacio G. Laureiro [†]	5	Ángel Martín Pendás, España	1
M'hammed Essefar, Marruecos	5	Jesús M. Ugalde, España	1
M. El Mouhtadi, Marruecos	5	Joan Bertrán, España	1

nanciados por persona con 100.000 € en el ámbito de la biomedicina, con 40.000 € en química orgánica y con 20.000 € en química teórica.

La frugalidad de la QT ha llevado a muchos países, modestos científicamente, a tener una actividad en química teórica, medida en publicaciones, considerable. Algunas son repeticiones de trabajos anteriores calculados a mejor nivel. En todo caso, no es bueno para la imagen de la disciplina.

Obliteración. Un trabajo teórico, cuando es repetido a nivel superior, deja de ser citado. Ya nadie cita los trabajos de Pujol. Los azoles han sido calculados muchas veces, cada vez a nivel más elevado. Para ser citados no basta ser los primeros ni que cualitativamente los resultados sean correctos. Hay que aportar algo más, aunque no sea muy original: efectos de disolvente específicos, estados excitados, nuevas metodologías... A continuación, algunos datos relevantes:

Tabla 2. Desaparición paulatina de la citabilidad de la publicación teórica original sobre los azoles.

Año	Nivel de teoría	Comentarios
1970	LCAO-SCF	Roche & Pujol
1984	INDO, STO-3G	Citan a Pujol
1986	6-31G*/6-31G	No citan a Pujol
1998	6-31G*	No citan a Pujol
2006	MP2/6-311++G(d,p)	No citan a Pujol
2010	M06-2X/6-311++G(d,p)	No citan a Pujol
2013	MP2/6-311++G(d,p)	No citan a Pujol
2020	DZVP-MOLOPT-SR-GTH	No citan a Pujol

Quitando la publicación de 1984, que es nuestra,^[3] muchos trabajos han estudiado el mismo problema olvidando que fueron Pujol y Roche los primeros en investigarlo.

Ahora una característica de la QT que es en parte cara y en parte cruz.

El peligro de la predicción. A los sintéticos no les gustará hacer la química que los teóricos hayan predicho. Hoy día ya es frecuente que no citen, como trabajo previo, una predicción teórica. Imagínense que Castells y Serratos, en vez de estudiar y publicar el $C_{60}H_{60}$ (el perhidrofullereno) en 1983, hubiesen dicho que el C_{60} debía ser estable y (con la ayuda de Santiago Olivella, por ejemplo) hubiesen calculado sus espectros que, probablemente, hubiesen coincidido con los medidos por Kroto, Curl y Smalley en 1985, lo que les valió el premio Nobel en 1996 (Figura 5).

No es lo mismo encontrar una cosa buceando en lo desconocido que sintetizar una cosa predicha *ab initio* para verificar si se cumplen las predicciones. Como ha escrito el gran Aleksander Isaakovich Kitaigorodskii «A first-rate theory predicts; a second-rate theory forbids and a third-rate theory explains after the facts».^[5]

Goal!
An Exercise in IUPAC Nomenclature

The power and the usefulness of the method recently described in THIS JOURNAL (52, 126 (1982)) to assign correct IUPAC systematic names to polyhedrals has been tested once again taking as the target molecule a highly interesting polyhedrane, the trivial name of which could be *footballane* or, alternatively, *soccerane*.

Footballane is a dodecahedrane, $C_{60}H_{60}$, with 90 carbon-carbon bonds and 32 faces (12 regular pentagons + 20 regular hexagons) and may be regarded as an "expanded dodecahedrane" especially suited to accommodate ions or atoms inside of its huge cavity.

Footballane is, in fact, one of the "hollow polyhedrals" that Leonardo da Vinci drew, as early as 1509, for the book "Divina proportione" by Luca Pacioli (Town and University Library of Geneva).

The structure of footballane, the corresponding Schlegel diagram, and the IUPAC systematic name are given below:

Hentriacontacyclo[29, 29, 0, 0, 2, 47, 0, 2, 45, 0, 4, 29, 0, 5, 27, 0, 6, 44, 0, 7, 42, 0, 8, 28, 0, 8, 24, 0, 16, 4, 1, 0, 11, 39, 0, 12, 23, 0, 13, 27, 0, 14, 22, 0, 15, 25, 0, 16, 23, 0, 17, 21, 0, 18, 31, 0, 19, 29, 0, 20, 25, 0, 22, 27, 0, 24, 29, 0, 26, 29, 0, 28, 27, 0, 29, 25, 0, 30, 23, 0, 31, 21, 0, 32, 19, 0, 33, 17, 0, 34, 15, 0, 35, 13, 0, 36, 11, 0, 37, 9, 0, 38, 7, 0, 39, 5, 0, 40, 3, 0, 41, 1, 0, 42, 1, 0, 43, 1, 0, 44, 1, 0, 45, 1, 0, 46, 1, 0, 47, 1, 0, 48, 1, 0, 49, 1, 0, 50, 1, 0, 51, 1, 0, 52, 1, 0, 53, 1, 0, 54, 1, 0, 55, 1, 0, 56, 1, 0, 57, 1, 0, 58, 1, 0, 59, 1, 0, 60, 1]hexacostane

Since the synthesis of dodecahedrane has been recently accomplished by Paquette and his coworkers at Ohio State University (*J. Amer. Chem. Soc.*, 104, 4503 (1982)), the synthesis of footballane appears as the next "goal." Good luck!

Josep Castells and Felix Serratos
University of Barcelona
Barcelona-28, Spain

Figura 5. La publicación de Castells y Serratos sobre el $C_{60}H_{60}$.^[4]

A esta definición hay que añadir una dimensión más: la dificultad intrínseca del problema (Figura 6). Cuanto más complejo es el problema más tarde llegarán las teorías que predicen.

Finalmente, paso a comentar la que, en mi opinión, es la cara más interesante en favor de la química teórico-computacional. Es un razonamiento un tanto largo, pero les invito a que lo recorran conmigo a través de una serie de preguntas y respuestas.

La química computacional y el final de la ciencia. Vamos a empezar preguntándonos cuántas moléculas sintetizarán los humanos antes de extinguirse. Los números no hay que tomárselos demasiado en serio. Son como los relativos a la conocida pregunta de si hay en el universo otras civilizaciones inteligentes. Son tantas las aproximaciones que cuando se multiplican el resultado es totalmente incierto. Multiplicar un número gigantesco por uno infinitesimal da cualquier resultado. La famosa ecuación de Drake^[6] da, o bien menos de una, o bien un millón de civilizaciones inteligentes.

Primera pregunta: ¿cuánto tiempo falta para que se extingan los humanos?

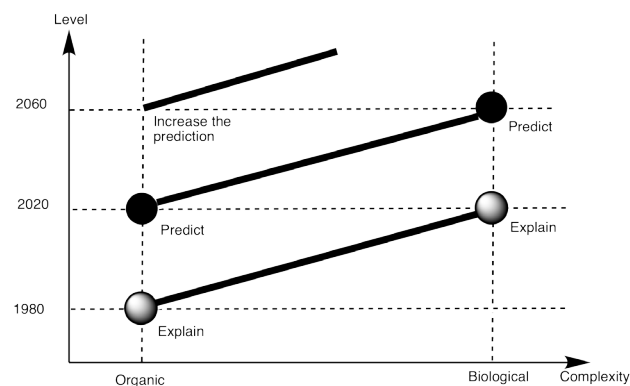


Figura 6. La complejidad del problema influye en el carácter predictivo de una teoría.

Respuesta: el sol se convertirá en una gigante roja en 5.000 millones de años, es decir, $5 \cdot 10^3 \cdot 10^6 = 5 \cdot 10^9$ años. Como un año tiene $3.2 \cdot 10^7$ segundos $\approx 2 \cdot 10^7$ segundos, el Sol se convertirá en una gigante roja en aproximadamente 10^{17} segundos.

Segunda pregunta: ¿cuánto tiempo falta para que se desaparezca el Universo?

Respuesta: entre 10^{14} y 10^{32} años. Es decir, según el razonamiento anterior, entre 10^{21} y 10^{39} segundos.

Tercera pregunta: ¿cuántas moléculas hay ahora?

Respuesta: ahora hay algo menos de 200 millones = $2 \cdot 10^8$.

Cuarta pregunta (múltiple): ¿Cuántas moléculas podrán sintetizar los humanos? ¿A qué velocidad las pueden preparar?

Respuesta: supongamos, como hipótesis atrevida, que todos los humanos pueden sintetizar unas 10^3 moléculas por segundo. En ese caso, podemos combinar los siguientes cálculos:

- El Sol engulle a la Tierra (s) x moléculas s^{-1} = 10^{20} moléculas
- El Universo se extingue (s) x moléculas s^{-1} = entre 10^{24} y 10^{42} moléculas, en promedio 10^{41} .

Por tanto, entre cuando ya no queden humanos y cuando ya no quede nada (sopa isotropa) se habrán preparado entre 10^{20} y 10^{41} moléculas.

Quinta pregunta (múltiple): ¿cuántas moléculas quedarán por descubrir? ¿Hay un número finito o infinito de moléculas posibles? ¿Es el infinito únicamente un concepto matemático?

Respuesta: Se han sintetizado moléculas enormes tales como el genoma de una bacteria con unos 600.000 pares de bases (enlaces P-O). También se ha secuenciado una molécula de $2,3 \cdot 10^6$ bases. La cuestión de si *hay un número finito o infinito de moléculas posibles* tiene una respuesta trivial: dado que el número de partículas elementales es finito (unas 10^{80}) no se pueden preparar un número infinito de moléculas. En una publicación de 2006 nosotros razonamos así.^[7] Copio la introducción:

A simple comparison between a $C_n H_{2n+2}$ alkane and its superior homologue $C_{(n+1)} H_{2(n+1)+2}$ allows to reach the following conclusions: the stability of, for instance, the central C-C bond cannot be identical for both molecules because only identical molecules have identical properties. It can increase monotonously, even by a minute amount, but this can be excluded *a priori* because it will lead to the absurd situation of an infinitely stable C-C bond. It can decrease and with a number n sufficiently big, the bond would be no longer stable and the unquestioned paradigm would prove wrong. The possibility of an alternation, say even/odd, so common in chemistry has no consequences for the problem since it corresponds to compare $C_n H_{2n+2}$ with $C_{(n+2)} H_{2(n+2)+2}$.

En última instancia este razonamiento es una falacia, pues queda una tercera posibilidad que es la conclusión

a la que llegamos y que recuerda la paradoja de Zenón de Aquiles y la tortuga: «cuando el número de carbonos aumenta, la energía de disociación del enlace CC central tiende asintóticamente a un valor constante» (es fácil de comprender: el enlace CC central de un alcano de un millón de átomos de carbono no se va a ver modificado por añadir un CH_3 al final de la cadena). Llamémoslo oscilación amortiguada.

Por tanto, como conclusión podemos afirmar: «hay un número infinito de moléculas teóricamente posibles, cuya síntesis efectiva solo está limitada por la cantidad de materia disponible».

Antes de concluir esta parte, vale la pena recordar los trabajos del químico suizo Jean-Louis Reymond (Universidad de Berna).^[8] Este autor se ha preguntado cómo están distribuidas las moléculas (limitadas a 17 átomos de C, N, O, S y los halógenos) en el espacio de muchas dimensiones que las caracterizan. Con ese «minúsculo» subconjunto, ha generado $2 \cdot 10^{11}$ moléculas (200 billones americanos). Un análisis en componentes principales para reducirlas a dos dimensiones muestra la distribución muy desigual de las moléculas, agrupadas en «clusters» y con enormes zonas vacías que reflejan más la historia de la química que una exploración racional.

Recordemos que el número de moléculas que podemos preparar antes de desaparecer está comprendido entre 10^{20} y 10^{42} , números gigantescos si se comparan con las conocidas (10^8) y con las del conjunto de Reymond (10^{11}).

Un hidrocarburo de talla relativamente modesta, $C_{167}H_{336}$ tiene más de 10^{80} isómeros. Relativamente modesta porque se han sintetizado el $C_{384}H_{770}$ (lineal) y el $C_{288}H_{576}$ (anillo). Con 15 hexágonos se pueden construir 74.107.910 bencenos condensados. Cuesta imaginarse las consecuencias de la explosión combinatoria.

Contar isómeros no es tarea de químicos teóricos sino de matemáticos o de químicos matemáticos, que tienen en *Match* una de sus principales revistas. El gran referente en este campo es George Pólya, un matemático húngaro,^[9] aunque contribuciones muy importantes son debidas a Alexandru T. Balaban.^[10]

En este escenario tan general, podemos concluir que es tarea de los químicos teóricos predecir las propiedades de las moléculas desconocidas, de tal manera que se sinteticen aquellas que tengan las propiedades deseadas, de modo que el factor limitante no será la capacidad de síntesis (mil por segundo) sino la capacidad de cálculo (¿millones por segundo?).

Como ya hemos comentado en la Figura 6 la capacidad de predicción es extremadamente variable. Pero tenemos millones de años por delante, salvo, claro, que cometamos un terrible error.

Lo que les pido no es nada fuera de lugar. Llevamos mucho tiempo haciendo predicciones, por ejemplo, usando modelos extratermodinámicos (Hammett, Taft, Kamlet, Abboud, Elguero...)^[11] que son a la química cuántica lo que el Calendario Zaragozano es al superordenador Cirrus de la AEMET (Figura 7).

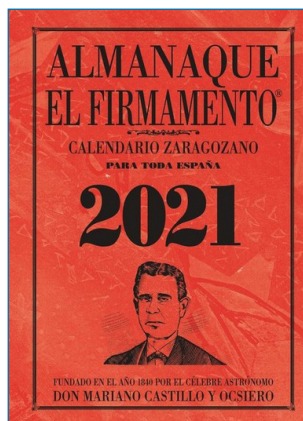


Figura 7. Dos maneras de predecir el tiempo.

Aquí vale recordar la frase de Manfred Eigen (NP, 1967): «A theory has only the alternative of being right or wrong. A model has a third possibility: it may be right, but irrelevant».^[12]

Para concluir, y medio en broma (de ahí el Moisés de Miguel Ángel), propongo diez mandamientos, voluntariamente incompletos para que cada uno los rellene según sus convicciones:

1. Darás preferencia a los trabajos metodológicos.
2. Tratarás de incorporarte a los colectivos que generan software.
3. Ayudarás a los químicos experimentales a que formulen sus preguntas correctamente.
4. Evitarás caer en la facilidad.
5. No confundirás trabajar mucho con pensar mucho.
6. Leerás las publicaciones de los mejores autores evitando caer en su imitación.
7. Evitarás estar ultra-especializado, ya que la ciencia se genera en las interfaces.
8.
9.
10.

Agradecimientos

A todos los miembros del Grupo de Química y Computación y en particular a su Presidente Ignacio Tuñón, a su Secretario Gonzalo Jiménez Osés y a su Tesorera Inés Corral por su amabilidad y apoyo. A Fernando Cossío por haber transformado un texto preliminar en algo correcto, se ve que saber euskera ayuda a escribir buen español.

Bibliografía

- [1] L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals*, Cornell University Press, 1939.
- [2] L. Pujol y A. Julg, *Theor. Chim. Acta*, **1964**, *2*, 125-133.
- [3] J. Catalán, J. L. G. de Paz y J. Elguero, *Chem. Scripta*, **1984**, *24*, 84-91.
- [4] J. Castells y F. Serratosa, *J. Chem. Educ.*, **1983**, *60*, 941.
- [5] Para la vida de A. I. Kitaigorodskii ver I. Hargittai, *Buried Glory, Portraits of Soviet Scientists*, Oxford University Press, Oxford, 2013.
- [6] Ecuación debida a F. Drake, Instituto SETI.
- [7] I. Alkorta y J. Elguero, *Chem. Phys. Lett.*, **2006**, *425*, 221-224.
- [8] J.-L. Reymond, *Acc. Chem. Res.*, **2015**, *48*, 722-730.
- [9] G. Pólya y R. C. Reed, *Combinatorial Enumeration of Groups, Graphs, and Chemical Compounds*, Springer-Verlag, Nueva York, 1987.
- [10] A. T. Balaban, J. W. Kennedy y L. V. Quintas, *J. Chem. Educ.*, **1988**, *65*, 304-313.
- [11] L. P. Hammett, *Physical Organic Chemistry*, McGraw-Hill, Nueva York, 1970.
- [12] M. Eigen en J. Mehra, *The Physicist's Conception of Nature*, Reidel, Dordrech, 1973.

LA QUÍMICA ESPAÑOLA VISTA POR SUS PROTAGONISTAS



Luis Oro

Departamento de Química
Inorgánica-ISQHC
Universidad de Zaragoza-CSIC
C-e: oro@unizar.es

Recibido: 06/09/2021

Aceptado: 07/09/2021

ORCID: 0000-0001-7154-7239

No solo química

Luis Oro 

En 2017, Miguel Ángel Sierra, editor general de *Anales de Química* me invitó a escribir un artículo en la sección titulada «La Química Española vista por sus protagonistas». Posteriormente en 2019 me solicitó el discurso que pronuncié con ocasión de mi nombramiento como Doctor honoris causa por la Universidad Complutense para su publicación en *Anales de Química*.^[1] Creía que con ese discurso, y algunas otras publicaciones o referencias anteriores realizadas con ocasión de mi 70 y 75 aniversario,^[2,3] mi modesta contribución a la química española quedaba suficientemente reflejada. El editor no compartió esta visión y por ello, y siguiendo sus sugerencias recientes, me he animado a resumir, para *Anales*, algunas actividades y contribuciones a la química y a la gestión científica de la investigación en las que he participado o de las que he sido testigo. Espero que el paso del tiempo no haya alterado en mi memoria algunas fechas y/o vivencias.

De CAICYT a CICYT

En 1982, la recuperación transitoria de las cátedras de Química General, me permitió regresar por traslado a la Universidad de Zaragoza, desde la cátedra de Química Inorgánica de la Universidad de Santander (hoy día, Universidad de Cantabria). Previamente había estado de Profesor Agregado en la Universidad Complutense de Madrid, e iniciado alguna colaboración con la Comisión Asesora de Investigación Científica y Técnica (CAICYT), cuyo gabinete de estudios dirigía un ilustre químico, Juan Francisco García de la Banda, fundador del Instituto de Catálisis y Petroquímica del CSIC. Mi colaboración se centraba en la evaluación y seguimiento de planes concertados de investigación con empresas, así como en un grupo de trabajo creado para el diseño del Programa Iberoamericano de Ciencia y Tecnología para el Desarrollo (CYTED), que formalmente se aprobaría en 1984. En 1983 Juan Rojo Alaminos, catedrático de Física de Estado Sólido de la Universidad Complutense, sustituyó a García de la Banda y procedió al nombramiento de coordinadores temáticos, incorporándome como coordinador del área de Química. Se estableció un riguroso proceso de evaluación por pares, que fue internacionalizándose progresivamente. Como coordinador me correspondía la gestión del proceso de evaluación y actuar como secretario de la ponencia de Química de la que fue presidente, en la primera etapa, José Barluenga. En cierto modo se produjo un relevo generacional no solo en la gestión, sino también, en muchos casos, en la responsabilidad de los investigadores principales. Debo decir que la metodología de evaluación establecida fue aceptada rápidamente entre la gran mayoría de los investigadores. No obstante, no me resultó fácil, en

algunos casos, comunicar la denegación de proyectos a algunos profesionales de renombre, particularmente cuando una de las razones de la denegación era la presentación de proyectos rutinarios carentes de objetivos razonables.

En 1985, Juan Rojo fue nombrado Secretario de Estado de Universidades e Investigación, sucediéndole como jefe del gabinete de estudios de la CAICYT, Roberto Fernández de Caleyá, que dos años más tarde fue el primer director de la ANEP. En conversaciones internas, y ante la evidente necesidad de irnos incorporando a las tendencias modernas de la investigación, comentamos la conveniencia de realizar reflexiones temáticas, eligiendo como primer candidato, la Química. Así surgió el encuentro celebrado en la Universidad Menéndez Pelayo, en julio de 1985,



Foto 1. Doctorado *Honoris Causa* por la Universidad Complutense de Madrid, 2019.



Foto 2. Con Juan Rojo, Secretario de Estado de Universidades e Investigación, 1987.

titulado «Tendencias Actuales en Química», auspiciado por la CAICYT y el CSIC. Como coordinador de Química de la CAICYT me correspondió la dirección del encuentro, actuando como eficaz secretario y co-redactor Pablo Espinet.

Tras una interesante ponencia de apertura, en la que José Elguero analizó de modo crítico la situación de la química española, se discutieron las tendencias actuales de las diversas áreas de la química, realizándose un conjunto de propuestas específicas que se recogieron en una publicación de amplia difusión.^[4] Fueron ponentes temáticos Ulises Acuña, Francesc Camps, Ernesto Carmona, Jaime Casabó, Manuel Cortijo, Marcial Moreno, Guillermo Munuera, Jesús Pajares y Miguel Valcárcel. También asistieron al encuentro, y participaron en las discusiones, José Barluenga, Gerardo Delgado, Roberto Fernández de Caleyá, Salvador Montero y Alfredo Sanz Medel. El encuentro tuvo una amplia repercusión y reacciones diversas. Algunas áreas o subáreas consideraron que su investigación no estaba suficientemente valorada, pero en general, a pesar de un cierto enojo inicial, las recomendaciones contenidas en ese documento, al cabo de poco tiempo, tuvieron un efecto positivo. En *Anales de Química*, han aparecido artículos y referencias a este encuentro, entre las que destacaría las realizadas por José Elguero,^[5,6] que en 2003 afirmaba que «muchas de las deficiencias que se señalaron entonces han sido subsanadas»,^[6] ya que en su ponencia de apertura en 1985 había mencionado que «de las cuatro ramas de la Química aquí presentes, yo diría que la Química Orgánica es la que tiene el nivel más homogéneo, la Química Inorgánica de calidad se concentra en tres o cuatro sitios, la Química Física es aceptable a nivel de métodos instrumentales y claramente deficiente en termodinámica; finalmente la Química Analítica española es un desastre».^[5] En el encuentro se realizaron propuestas de temas de investigación que debieran potenciarse y cuya representación en ese momento era insuficiente o nula, así como el abandono de investigaciones rutinarias, triviales y sin objetivos definidos. Estas recomendaciones, junto a la creciente inversión en investigación y en formación de personal investigador que se inició en aquellos años, fueron el catalizador del renacimiento e internacionalización de

la química española, en todas las áreas, que en aquellos momentos representaba, en el mundo, un exiguo 0,8%.

En 1986, se promulgó la Ley de la Ciencia,^[7] que en su artículo primero establecía el Plan Nacional de Investigación Científica y Desarrollo Tecnológico, y en el cuarto indicaba que «el Plan Nacional fomentará la investigación básica en los distintos campos del conocimiento a través de una financiación regular de la misma que haga posible el mantenimiento y la promoción de equipos de investigación de calidad, tanto en las universidades como en los demás centros públicos de investigación». Dicha Ley, en la que Alfredo Pérez Rubalcaba había participado activamente, establecía también una Comisión Permanente entre los miembros de la Comisión Interministerial de Ciencia y Tecnología (CICYT) que se haría cargo de los medios materiales y personales de la CAICYT, tras su extinción por Real Decreto en 1987. El mencionado decreto creaba la Secretaría General del Plan Nacional de Investigación Científica y Desarrollo Tecnológico y la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva (ANEP). La mencionada Comisión Interministerial de Ciencia y Tecnología consiguió introducir en la agenda política, quizá por primera vez en la historia de España, la importancia de la investigación científica y técnica. Como consecuencia la investigación adquirió una notable resonancia social y alumbró, en general, una atmósfera de euforia entre los científicos. Fue para mí una etapa grata e intensa en la que tuve la fortuna de colaborar, inicialmente como director general de Investigación Científica y Técnica y miembro de la Comisión Permanente de la CICYT en el período 1987-1988, y más tarde como secretario general del Plan Nacional de Investigación y secretario de la Comisión Interministerial de Ciencia y Tecnología entre 1988 y 1994.

Los años 1987 y 1988 fueron particularmente intensos en una dirección general de nueva creación con competencias en formación de personal investigador y establecimiento de un programa sectorial de promoción del conocimiento que contemplaba, junto a la evaluación y adjudicación de proyectos de investigación, la dotación de infraestructuras e intercambios científicos. Me acompañaron en estas tareas como subdirectores Ramón López de



Foto 3. Con Javier Solana, Ministro de Educación y Ciencia, en la Antártida, 1991.

Arenosa, químico físico de la Universidad Complutense y Salvador Montero, físico del Instituto de Estructura de la Materia del CSIC. A mis colaboradores más próximos aconsejé la lectura de las *Reglas y consejos sobre investigación científica* de Cajal y su reflexión todavía vigente en aquellos años «*de que no hay nada tan urgente como crear cerebros*»,^[8] así como la necesidad de promover investigación básica de calidad y disponer de adecuadas infraestructuras científicas. En la dirección general, establecimos un detallado programa plurianual de promoción general del conocimiento, que respondía al mandato del mencionado artículo cuarto sobre investigación básica y que supuso una inversión en el cuatrienio 1988-1991 de unos 33.000 millones de pesetas, así como un ambicioso programa de formación y perfeccionamiento de personal investigador que permitió en años posteriores la formación posdoctoral de varios miles de jóvenes en prestigiosos centros extranjeros y también la movilidad de investigadores establecidos.

En octubre de 1988, Javier Solana, que había sido nombrado ministro de Educación y Ciencia y presidente de la CICYT unos meses antes, propuso mi nombramiento como secretario general del Plan Nacional de I+D, donde me correspondió la gestión de los programas nacionales orientados correspondientes al I Plan Nacional de I+D 1988-1991. Dicho Plan Nacional, junto con los programas sectoriales integrados, supusieron una inversión total, en el cuatrienio, de 115.780 millones de pesetas. En estas labores me acompañaron como vicesecretarios, con gran eficacia y generosidad, dos químicos de la Universidad Complutense, Ramón González y Santiago Lago. Otra aportación de este período fue la creación de las oficinas de transferencia de resultados de investigación, la red OTRI, una iniciativa que propuse en 1988. Se produjo también un progreso importante de la investigación universitaria que fue favorecido por la puesta en marcha de los sexenios de investigación, complementos salariales basados en la productividad científica, y la incorporación especial de profesorado universitario mediante el denominado programa PROPIO. En unas décadas la investigación científica dejó de ser una actividad minoritaria para pasar a constituir parte esencial del quehacer cotidiano de la mayoría del profesorado universitario, contribuyendo de modo sustancial al incremento de la producción científica, tanto en cantidad como en calidad. A todo ello contribuyó de modo importante el liderazgo de Juan Rojo, Secretario de Estado de Universidades e Investigación, así como nuestra pertenencia, desde 1986, a la entonces denominada Comunidad Europea que influyó notablemente en la internacionalización de la investigación española que, desde entonces, se ha beneficiado de los Fondos Estructurales y su participación en los Programas Marco de I+D.

En 1992, Alfredo Pérez Rubalcaba sucedió a Javier Solana en el Ministerio de Educación y Ciencia, continuando con el apoyo decidido a la investigación científica. En dicho año, con mi colega de la Universidad de Zaragoza Alberto Lafuente, publicamos un libro que titulamos *El Sis-*

tema Español de Ciencia y Tecnología en el marco internacional: evolución y perspectivas^[9] en el que tuvimos la oportunidad de describir de manera ordenada la evolución del sistema. El crecimiento anual de las inversiones en I+D en moneda constante en el período 1985-1992 era del orden del 11,5%, un período en el que las inversiones en I+D crecían más que nuestra economía, recortando así parte de la distancia que nos separaba de Europa en esta materia. En aquellas fechas no era imprudente proyectar trayectorias de aproximación gradual al esfuerzo dedicado a la investigación por los países europeos. Sin duda nos dejamos llevar por los buenos deseos, ya que las políticas posteriores de consolidación presupuestaria frenaron el proceso de convergencia de inversión en I+D con Europa. En julio de 1993, Alfredo Pérez Rubalcaba, fue nombrado ministro de la Presidencia, siendo sustituido por Gustavo Suárez Pertierra, como ministro de Educación y Ciencia. Hacía tiempo que estaba considerando apropiado mi regreso a tiempo completo a la universidad y, en esa línea, unos meses más tarde, estando en vigencia el II Plan Nacional de I+D 1992-95, presenté mi dimisión, reintegrándome plenamente a la Universidad de Zaragoza a inicios de 1994.

Al escribir ahora sobre esos años en la administración científica española, me queda el recuerdo positivo de un período creativo e ilusionante, ajeno a intereses partidistas, que tal vez pudiera considerarse un fugaz espejismo, pero en cualquier caso estoy convencido que la investigación científica española se modernizó y dio un paso importante en pocos años. Todavía mantengo la esperanza de poder presenciar un período sostenido en el que la inversión en investigación en España sea mayor que su crecimiento económico y que nos permita recortar nuestro diferencial en I+D con la Unión Europea.

A título personal, mi actividad en la administración científica fue interesante, pero a la vez una experiencia dura ya que en todo momento mantuve la conexión con el laboratorio, a base de viernes y fines de semana con mis colaboradores en Zaragoza. Mis vacaciones familiares de verano, en esos años, tuvieron lugar en Sheffield y Cambridge, con acceso a las bibliotecas y laboratorios de sus



Foto 4. Con Helmut Werner, David Cole-Hamilton, Richard Schrock, Pierre Dixneuf y Jesús Pérez Torrente, Zaragoza, 2008.

universidades. No me cabe duda de que tengo una gran deuda con mi esposa e hijos a los que he distraído parte del tiempo que les pertenecía.

A mi regreso a Zaragoza, continué con actividades de cooperación internacional en el marco de la European Science Foundation (ESF), ya que en 1993 había sido elegido vicepresidente de dicha Fundación, con sede en Estrasburgo, cargo en el que continué hasta 1998, y desde donde tuve la oportunidad de promover la participación española en los *ESF Scientific Networks* y las *ESF European Research Conferences*. En particular, varias conferencias con amplia participación de químicos españoles como ponentes y/o organizadores se realizaron en sedes españolas, muy especialmente en Sant Felu de Guixols. Químicos españoles cooperaron en varias redes científicas; en particular, y fruto de una red europea sobre clúster metálicos en la que participamos, se publicaron en 1999, tres volúmenes bajo el título *Metal Clusters in Chemistry*, de los que fui coeditor.^[10]

RSEQ y más I+D

A finales de 1995, José Antonio Rodríguez Renuncio, presidente de la RSEQ, nos propuso a Carlos Seoane, que había sido anteriormente secretario general de la sociedad, y a mí, formar parte de una candidatura a la Junta de Gobierno como vicepresidentes. Ambos aceptamos y continuamos en el cargo hasta 1999, ya con Carlos Pico de presidente, que había iniciado su mandato en 1997. En ese mismo año de 1995, había sido distinguido con el Humboldt Forschungpreis, lo que me permitió realizar dos largas estancias en la Universidad de Würzburg. Allí tuve conocimiento detallado del proyecto de creación de revistas europeas de química, así como de la inminente apertura de la revista *Chemistry-A European Journal*, a sociedades científicas europeas. Dicha revista había sido iniciada, a instancias de Peter Göllitz,^[11] editor de *Angewandte Chemie*, por la Sociedad Química Alemana (GDCh, Gesellschaft Deutscher Chemiker). Mientras tanto, nuestra sociedad había iniciado en 1996 la publicación de *Anales de Química, International Edition*, con Jaime Casabó como editor, mediante un contrato con Springer-Verlag, una loable iniciativa, pero que implicaba un coste económico difícilmente asumible para las finanzas de la RSEQ. Ante esta situación, propuse explorar un proceso de integración en el proyecto europeo de revistas químicas que podría conllevar la desaparición de *Anales de Química*. El contacto con la GDCh, promotora del proyecto junto a Peter Gollitz y Eva Wille de Wiley-VCH, me fue sencillo ya que en ese momento mi colega Heindirk tom Dieck, catedrático de Química Inorgánica de la Universidad de Hamburgo, con el que había tenido contactos profesionales, era el secretario general de la sociedad alemana. Su propuesta inicial era difícilmente aceptable, ya que ofrecía una escasa participación en *Chemistry-A European Journal*, a compartir con la Sociedad Portuguesa de Química. Finalmente en una reunión celebrada en Madrid, en diciembre de 1996,

en la que participamos Heindirk tom Dieck, Carlos Pico, ya presidente electo, y yo mismo, se alcanzó un acuerdo por el que se reconocía el potencial de nuestra sociedad, y se aceptaba que la RSEQ podría tener un 10% de las acciones de *Chemistry-A European Journal*, un porcentaje igual al de las sociedades francesa o italiana de Química. En 1997, se aprobó formalmente la participación de la RSEQ con una inversión de 30.000 Ecus para la adquisición del mencionado 10%. Unos meses más tarde, se aprobó también nuestra integración en las revistas *EurJIC* y *EurJOC*, que tenía como condición la desaparición de las revistas nacionales. En la práctica, *Anales de Química, International Edition* todavía se publicó en 1998 y nuestra integración plena en el consorcio de revistas europeas se realizó definitivamente en 1999, año en el que cesó mi mandato como vicepresidente, aunque por delegación expresa del presidente Carlos Pico continué ocupándome de la participación de nuestra Sociedad en el consorcio de revistas europeas. Si bien *Anales de Química*, como revista científica desapareció, *Anales de la RSEQ*, con un nuevo formato, continúa siendo un lazo de unión entre los químicos españoles.^[12]

En octubre de 1999 se llevó a cabo una importante renovación en la Sociedad con la incorporación a la Junta de Gobierno de Antonio Echavarren como secretario general María Vallet y Josep Font como vicepresidentes y entre otros vocales, Pablo Espinet y Ulises Acuña, que habían participado en el mencionado encuentro «*Tendencias Actuales en Química*» celebrado en Santander. A ese proyecto de modernización de la RSEQ, me uní a finales del año 2000, presentando mi candidatura a la presidencia, acompañado por Ramón González como tesorero y Nazario Martín como editor general. Fui el primer presidente de la sociedad no domiciliado en Madrid. Mi mandato como presidente se renovó en 2002, de modo que abarcó el período 2001-2005. Mi prioridad, al inicio, fue regularizar la economía de la Sociedad, ya que el déficit era preocupante y nuestros incipientes retornos de las revistas europeas no permitían cubrirlo. Afortunadamente, recibimos apoyo del ministerio de Educación y Ciencia, lo que unido a un incremento de los retornos de las revistas europeas permitieron además de equilibrar la economía de la RSEQ, iniciar nuevas actividades, entre ellas



Foto 5. Centenario de las Reales Sociedades de Física y Química, Madrid, 2003.

asumir una participación en la revista de química analítica, *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, publicada por Springer-Verlag, atendiendo a una invitación de las sociedades francesa y alemana, y por acuerdo con la Sociedad Española de Química Analítica. En noviembre de 2001 se aprobó la propuesta de modificación y modernización de los Estatutos de la RSEQ que fue presentada por el secretario general, Antonio Echavarren, en la Junta General Extraordinaria celebrada en Madrid, en el marco de la XXVIII Reunión Bienal de la RSEQ, que presidió María Vallet. Durante nuestro mandato se crearon premios de investigación temáticos, patrocinados por diversas empresas e instituciones, se intensificaron premios de cooperación con otras sociedades científicas, se fomentaron la creación de nuevos grupos especializados de carácter interdisciplinar y se prestó especial atención a los jóvenes investigadores.

En el año 2003 se celebró el centenario de las Reales Sociedades de Física y Química. El centenario se inició en enero con un acto conmemorativo en el Paraninfo de la Universidad Complutense, donde un siglo antes se había fundado la Sociedad Española de Física y Química, que al celebrar su 25 aniversario fue distinguida con el título de Real. En 1978, con ocasión del 75 aniversario, siendo presidente un ilustre químico, José Miguel Gamboa, se estimó conveniente la separación de las sociedades de Física y Química que se produjo formalmente en 1980. La celebración principal del centenario se realizó en julio coincidiendo con la XXIX Reunión Bienal, en la que participaron un elevado número de científicos tanto nacionales como extranjeros, entre los que se encontraban tres premios Nobel de Química: Richard Ernst, Harold Kroto y Jean Marie Lehn. La sesión inaugural, que se compartió con la sociedad de Física, estuvo presidida por el actual Rey, entonces Príncipe de Asturias, D. Felipe de Borbón. Conté con la eficaz ayuda, entre otros, de Nazario Martín como presidente de la comisión organizadora de esa Bienal, y Javier de Mendoza y Antonio Echavarren, como presidente y secretario de su comité científico. La reunión fue un gran éxito y *Anales de Química* editó un número especial conmemorando dicha efeméride.^[13]

Mi vinculación a la RSEQ ha sido larga ya que, una vez finalizado mi mandato de presidente a final de 2005, los sucesivos presidentes, Nazario Martín (2006-2011), Jesús Jiménez Barbero (2012-2017) y el presidente actual Antonio Echavarren, mantuvieron mi representación en el consorcio europeo de revistas, hasta el año pasado. Fueron 25 años de dedicación a las revistas europeas. En los últimos tiempos, tras el retiro por jubilación en Wiley-VCH de Eva Wille y Peter Göllitz, y la sustitución en la GDCh de Heindirk tom Dieck por Wolfram Koch, era el último superviviente de aquel ilusionante proyecto editorial, un momento adecuado para ser sustituido.^[14] Nuestro consorcio, que se inició como una *Editorial Union of Chemical Societies* (EUChemSoc)^[15] y que se renombró en 2009 como *ChemPubSoc*, es responsable con la editorial Wiley-VCH de la publicación en estos momentos de 16 revistas científicas, entre ellas la revista *ChemCatChem* que fue una iniciativa de nuestra Sociedad, de la que fui promotor y

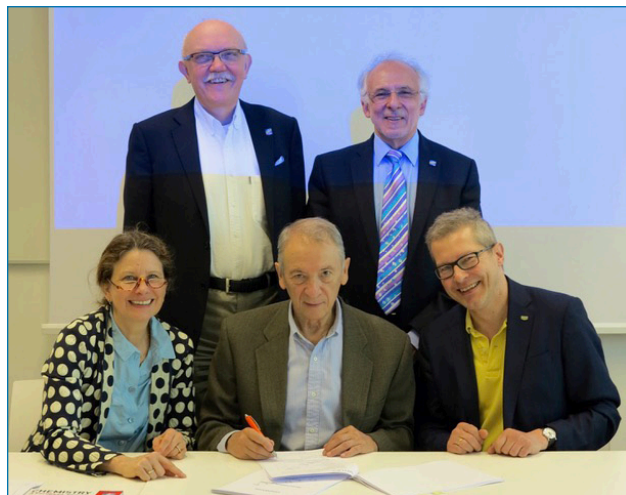


Foto 6. Con Eva Wille y Peter Göllitz (Wiley-VCH), y los co-presidentes Wolfram Koch y Franco De Angelis, en la firma de una nueva revista.

primer co-chairman y soy actualmente miembro de su honorary board. En 2002, ante el crecimiento en el número de revistas y actividades del consorcio, se estableció una estructura de cuatro copresidentes de modo que desde esa fecha y hasta 2020 fui presidente de *EurJIC*, *EurJOC*, *ChemCatChem* y *ChemPhotoChem*, responsabilidad que desde el año pasado corresponde a mi sucesor, Pedro Pérez. Con algunas leves oscilaciones los ingresos para nuestra sociedad de las revistas *ChemPubSoc*, recientemente renombrada como *Chemistry Europe*, han sido crecientes y el año pasado superaron los 160.000 €, lo que demuestra la validez de la apuesta científica y económica que realizamos hace 25 años.

He mencionado anteriormente que en los años 80 participé en un grupo de trabajo para el diseño del Programa Iberoamericano de Ciencia y Tecnología para el Desarrollo (CYTED). Años más tarde, algunas cooperaciones me impulsaron a proponer, en el marco del mencionado CYTED, una red temática sobre Catálisis Homogénea que estuvo activa entre 1997 y 2002 y de la que fui coordinador. En ella participaron varias instituciones españoles y centros de Argentina, Brasil, Chile, Colombia, Méjico, Portugal y Venezuela, realizándose diversas acciones de formación, un elevado número de intercambios y la publicación de un libro sobre catálisis homogénea.^[16]

Otra actividad internacional en la que tuve responsabilidades, a propuesta de la RSEQ y otras sociedades químicas europeas, fue *EuChemS* (European Chemical Society). En 2007 fui nominado para presidente, y tras la aceptación por su Asamblea, fui nombrado presidente de *EuChemS* entre 2008 y 2011.^[17] Durante mi mandato se realizó un importante cambio en su constitución, el traslado de la secretaria de Londres a Bruselas,^[18] y la intensificación de contactos con la Comisión y el Parlamento Europeo ante el que se presentó un extenso documento titulado «*Chemistry- Developing solutions in a changing world*».^[19] También se favoreció una creciente coordinación entre *EuChemS* y *ChemPubSoc*,^[20] y se realizaron variadas actividades con



Foto 7. Recibiendo la felicitación de Giovanni Natile al ser nominado presidente de EuChemS, Stavanger, 2007.

motivo de el Año Internacional de la Química 2011. En ese año, conmemorando dicha efeméride, e invitado por la revista Arbor, tuve ocasión de realizar una reflexión sobre la situación de la química española.^[21]

En un artículo publicado en *Anales de Química*, al que he hecho referencia anteriormente, titulado «*La Química Española: 1981-2003*»,^[5] José Elguero valoraba positivamente la presencia de la investigación química en revistas internacionales. Aunque el progreso en el área de química fue destacable, la mejoría se dio en todas las disciplinas científicas. Así, la producción científica internacional española se multiplicó por siete entre 1981 y 2003. En dicho período, la aportación española al total mundial pasó del 0,8% al 3%. En poco más de veinte años, los documentos científicos de autoría española recogidos en las bases de datos internacionales se incrementaron en un 600%, un incremento muy superior al que experimentó el conjunto de la Unión Europea (118%) o el total mundial (84%) en el mismo período, aunque deben tenerse en cuenta también los diferentes puntos de partida, muy bajos para el caso de España. Por otra parte, según datos del INE, en el período mencionado, 1981-2003, el número de investigadores a jornada completa se incrementó en un 480%. En poco más de veinte años la ciencia española había mejorado significativamente.

En 2003 las competencias en I+D estaban en el Ministerio de Ciencia y Tecnología, pero en el 2004, con la llegada al Gobierno del PSOE, dichas competencias regresan al Ministerio de Educación y Ciencia, iniciándose un crecimiento importante en los presupuestos dedicados a I+D, en parte asociado al lanzamiento adicional, en 2005, de la iniciativa INGENIO 2010 que complementaba el Plan Nacional de I+D. Una mirada retrospectiva a este corto y alegre período permite constatar la creación de programas e instituciones, que como otras inversiones en distintas áreas e infraestructuras, son difíciles de mantener, habida cuenta del acusado descenso presupuestario en materia de I+D a partir de 2010. En ese contexto, la Confederación de Sociedades Científicas de España (COSCE), en cuya

fundación participé en mi época de presidente de la RSEQ, realizó el informe denominado Acción CRECE (Comisiones de Reflexión y Estudio de la Ciencia en España)^[22] que presentamos en el Palacio de la Moncloa, en junio de 2005, ante la vicepresidenta primera del Gobierno, María Teresa Fernández de la Vega. El informe estaba estructurado en cinco comisiones: «Estructuras e instrumentos de la política científica», presidido por Andreu Mas-Colell; «Recursos humanos en la investigación», de la que fui presidente; «Ciencia y empresa», presidido por Amparo Moraleda; «España en Europa», presidido por Federico Mayor Zaragoza; y «Ciencia y sociedad», presidido por Rafael Pardo. Dicho informe^[22] presentaba detalladas propuestas para una mejora de la competitividad de nuestra investigación y nuestra incorporación progresiva a una economía moderna basada en el conocimiento.

En diciembre de 2011, en España, la I+D+i pasó a depender del nuevo Ministerio de Economía y Competitividad, cuyo titular era Luis de Guindos aunque en la práctica fue Carmen Vela, química y secretaria de Estado de Investigación, Desarrollo e Innovación, quien estuvo al frente de la gestión de la política científica hasta junio de 2018. Con Carmen Vela había coincidido a finales de los años 90 ya que ambos fuimos miembros de la *European Science and Technology Assembly*, establecida por la Comisión Europea. En 2012 se creó el Consejo de Política Científica, Tecnológica y de Innovación para la coordinación nacional, y el Consejo Asesor de Ciencia, Tecnología e Innovación del que fui miembro en el período 2012-2017. Con más retraso del previsto se creó en 2015 la Agencia Estatal de Investigación, cuyo máximo órgano rector, constituido en junio de 2016, está formado por diez altos cargos de la administración, un representante de los trabajadores y cuatro científicos y tecnólogos, entre los que desde el inicio me encuentro. Su estructura tiene poco parecido con la del European Research Council, modelo que muchos científicos continuamos añorando. La I+D española depende ahora del Ministerio de Ciencia e Innovación. En la primera comparecencia en el Congreso de Diputados, celebrada en



Foto 8. Presentando las reflexiones sobre recursos humanos en investigación en el Palacio de la Moncloa, 2005.

julio de 2018, el ministro anterior, Pedro Duque, afirmaba que «El objetivo de este Gobierno es que la inversión crezca de forma sostenida en el tiempo con el fin de volver al nivel de gasto en I+D+i de antes de la crisis y sin vaivenes presupuestarios, que tan difíciles son de asumir para el sistema».^[23] Esperemos que ese objetivo, complementado por los anunciados fondos europeos de recuperación y el recientemente aprobado Plan Estatal de Investigación Científica, Técnica y de Innovación 2021-2023, permitan que la investigación científica sea, por fin, una prioridad, algo que desde hace tiempo venimos demandando.^[24-26] Si el amable lector ha llegado hasta aquí, supongo que a la vista de mis variadas actividades no le sorprenda que una de mis canciones favoritas sea «Rolling on the River».

Química, inicios

La Química española actual tiene actualmente un nivel elevado y está bien situada en el escenario internacional. Los cambios experimentados desde el mencionado encuentro de 1985 han sido muy positivos, y entre otras áreas, la química organometálica se integró, hace varias décadas, en las corrientes internacionales del área. En una reunión del Editorial Advisory Board de *Organometallics*, el editor y fundador de la revista, Dietmar Seyferth, me comentó que nunca había visto un desarrollo con tanta calidad y en tan poco tiempo como el de la química organometálica española, que gozaba de una bien ganada credibilidad. No fue así desde el principio. Todavía recuerdo una comunicación que enviamos al *Journal of the American Chemical Society*, en los años 80, en el que uno de los evaluadores, que no parecía confiar en nosotros, escribió «*this paper, if true is very important*», tras nuestra réplica fue transferido y aceptado en *Organometallics*. En esta temática, en los últimos cuarenta años, hemos estudiado la síntesis y actividad catalítica homogénea de numerosos nuevos compuestos de metales de transición, principalmente, de rodio, iridio, rutenio y osmio. En su estudio hemos ahondado especialmente en la utilización de métodos estructurales, cinéticos y teóricos para la dilucidación de los mecanismos de las reacciones catalíticas. La arquitectura molecular y química de clusters han sido también temas de interés en nuestro laboratorio. Mi web personal en la Universidad de Zaragoza^[27] y las bases de datos proporcionan información detallada de las contribuciones realizadas, pero lo que no pueden recoger es las circunstancias en las que, con pocos medios y gran ilusión, se iniciaron los trabajos. Trataré de ilustrarlo en las líneas siguientes, limitando mis comentarios al período inicial.

En mi opinión, la química organometálica española es en parte deudora de la visión del catedrático de Química Inorgánica Rafael Usón, que, a su llegada a la Universidad de Zaragoza, envió a Inglaterra a dos de sus colaboradores, Pascual Royo, a finales de los 60, y Víctor Riera, al inicio de los 70, para trabajar con dos prestigiosos químicos británicos Ronald Nyholm (University College de Londres) y Gordon Stone (Universidad de Bristol). Mi entrada



Foto 9. Con Carmen Claver, co-chair del XIII International Symposium on Homogeneous Catalysis, Tarragona, 2002.

en esta área de la química, en la misma época, fue en parte accidental, ya que el tema de mi tesis, realizada en un laboratorio de física, se centraba en magnetoquímica de compuestos de cobalto, y fue seguida de una corta estancia posdoctoral en el Kamerlingh Onnes Laboratory de la Universidad de Leiden. La Fundación Juan March me concedió una beca de estudios en el extranjero con la que tenía previsto realizar una estancia posdoctoral trabajando en EPR. Sin embargo, mi asistencia a una Nato School on Frontiers of Inorganic Chemistry, en Italia, en la que participaron Jack Lewis, Earl Muetterties y Albert Cotton, entre otros, me llevó a interesarme por la química organometálica y, autorizado por la Fundación March, cambié de planes para realizar una estancia posdoctoral en la Universidad de Cambridge con Jack Lewis (1972-73). Allí me inicié en la química de rodio e iridio, una química que me ha proporcionado importantes satisfacciones, y adquirí conciencia plena de la relación entre investigación y competitividad universitaria.

A mi regreso tenía claro mi interés por una carrera universitaria y Víctor Riera, con el que había coincidido temporalmente en nuestras estancias posdoctorales en Inglaterra, aunque en distintas universidades, me ilustró cómo era el camino para acceder a una cátedra. Eran los tiempos de las cátedras únicas, y me dio a conocer el llamado escalafón de catedráticos con indicación de las fechas de jubilación próximas y consiguientes vacantes que se generarían. No obstante, la progresiva aparición de oposiciones a plazas de profesor agregado, que incluía la realización de siete ejercicios, incluyendo un ejercicio práctico de varios días, proporcionó oportunidades alternativas. Con vocación definida, me integré en el departamento de química inorgánica de la universidad de Zaragoza, que bajo la dirección de Rafael Usón ya trabajaba activamente en compuestos de oro y platino con el ligando pentafluorofenilo con el que Pascual Royo había experimentado en el University College. Los medios eran escasos y, al no disponer de espectrometría de masas y RMN, mi elección fue trabajar

con compuestos catiónicos de rodio (en aquel momento, no accesibles para la espectrometría de masas) y centrarme especialmente en ligandos N-dadores o O-dadores, ya que la actividad internacional se concentraba, en esos momentos, en ligandos de tipo fosfina. Con Carmen Claver, que fue mi primera doctora, desarrollamos nuevos compuestos de rodio con ligandos N-dadores (L), de formulación $[\text{Rh}(\text{COD})\text{L}_2]^+$ y $[\text{Rh}(\text{COD})\text{L}(\text{PR}_3)]^+$, e iniciamos algunas reacciones catalíticas de hidrogenación e hidroformilación. La síntesis de compuestos $[\text{Rh}(\text{COD})\text{L}(\text{PR}_3)]^+$ la publicamos en 1976 en *Journal Organometallic Chemistry*, y unos meses más tarde, en 1977, Robert Crabtree publicó, en la misma revista, el mismo tipo de compuestos por una ruta alternativa.

Visité a Crabtree en la Universidad de Yale para tratar de evitar solapamientos y me comentó que no iba a continuar con esa química de rodio, pero no mencionó que estaba desarrollando la química análoga con iridio, ni tampoco yo le señalé que estábamos trabajando ya en compuestos catiónicos de iridio. En esta ocasión llegamos tarde. Su grupo publicó la síntesis y actividad catalítica de complejos $[\text{Ir}(\text{COD})(\text{PR}_3)_2]^+$ e $[\text{Ir}(\text{COD})(\text{py})(\text{PPh}_3)]^+$ (catalizador de Crabtree). No obstante, aún pudimos mostrar la posibilidad de usar un complejo catiónico de iridio, similar al catalizador de Crabtree, para la hidrogenación asimétrica de olefinas tetrasustituídas, utilizando una fosfina quiral.^[28] Teníamos que suplir con ilusión los escasos medios disponibles, hasta el punto de recibir un claro mensaje del editor de *Journal Organometallic Chemistry*, al aceptar uno de nuestros trabajos, en el que nos urgía a tener acceso a RMN. Aún recuerdo un largo viaje en coche a Zurich para realizar medidas de RMN, en el ETH, por gentileza de Luigi Venanzi y Paul Pregosin, y mis viajes a Madrid al Instituto de Catálisis y Petroleoquímica para continuar una colaboración, iniciada durante mi época de profesor agregado en la Complutense, sobre reacciones catalíticas homogéneas. Miguel Ciriano y Daniel Carmona, que se habían doctorado con Rafael Usón y realizado estancias posdoctorales en Bristol y Zurich, formaron parte del equipo de trabajo de esa época y fueron importantes para la estabilización inicial del mismo.

Por otra parte, algunos de mis colaboradores doctorados entre finales de los 70 e inicios de los 90, tras realizar estancias posdoctorales en prestigiosos centros se reincorporaron al laboratorio aportando experiencia y conocimiento. Varios de ellos, lideran desde hace tiempo sus grupos de investigación y continúan en activo. Citaré a título de ejemplo, y por orden de fecha de lectura de sus tesis, Carmen Claver, M.ª Angeles Garralda, Mercedes Sanaú, Fernando Lahoz, Javier Cabeza, Pilar Lamata, Miguel Esteruelas, Cristina Tejel, Fernando Viguri, Eva Villarroya, Javier Modrego, Jesús Pérez Torrente, Ana Elduque, Ana López de Lama, Eduardo Sola o Victoria Jiménez. Afortunadamente, los fondos para investigación que se movilizaron a mediados de los años 80 nos permitieron disponer de acceso a RMN y también a difracción de rayos X, técnica en la que se formó Fernando Lahoz en Parma y Cambridge, y que nos abrió las puertas a estudios de arquitectura

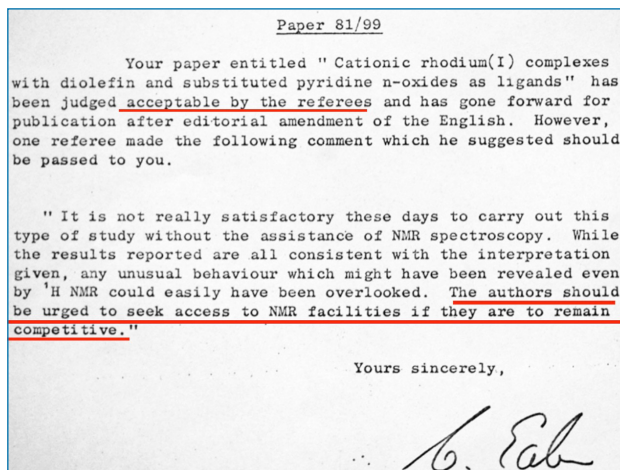


Foto 10. Informe del editor de *Journal of Organometallic Chemistry*, 1981.

molecular y cluster metálicos, área desarrollada con Ciriano, Carmona, Tejel, y Pérez-Torrente. *Angewandte Chemie* era nuestra revista de preferencia para publicar artículos en esta temática.

En ese período, iniciamos algunas colaboraciones con colegas extranjeros entre la que destacaría especialmente la larga cooperación con Helmut Werner, Universidad de Würzburg, con quien publicamos, a finales de los años 80, los primeros ejemplos de actividad catalítica de complejos de $\text{Os}(\eta^2\text{-H}_2)$ en *Angewandte Chemie* y *Journal of the American Chemical Society*, una química en la que Esteruelas ha continuado trabajando. En Zaragoza, también en los años 80, cooperamos con Carlos Cativiela, en reacciones enantioselectivas, y con José Luis Serrano en metalo-cristales líquidos. En esta última área, con Serrano y Sola, describimos el primer cristal líquido de iridio por simple coordinación de ligandos no mesogénicos. Con Carlos Cativiela y Daniel Carmona la cooperación en procesos enantioselectivos se mantuvo durante varias décadas. Estas son algunas pinceladas del inicio de nuestro grupo en unos primeros tiempos un tanto difíciles, que afortunadamente son ya pasado. El resto, consecuencia del trabajo de más de cien doctorandos y posdoctores de varias nacionalidades, así como prestigiosos colegas en sabático, que han pasado por nuestro laboratorio, ha dado lugar a numerosas contribuciones, que están recogidas en las bases de datos,^[29] y de modo resumido en mi web personal en la Universidad de Zaragoza.^[27]

Comentarios finales: en gerundio

El gerundio es una de las formas no personales del verbo. Me gustaría acabar este artículo, tan personal, me temo, en gerundio: en primer lugar, agradeciendo a mis colaboradores y alumnos su enorme y excepcional colaboración. Son ellos los que han hecho posible que nuestra investigación haya adquirido un cierto prestigio y a ellos debo una parte de las distinciones recibidas. No me cabe duda,



Foto 11. Grupo de investigación en 2013.

que he sido aupado a hombros de gigantes. Sin ellos, el camino andado no hubiera sido el mismo. Porque hoy día, el progreso en ciencia y tecnología, como el gerundio, no es algo personal sino más bien fruto del esfuerzo colectivo de un equipo; un equipo y un entorno adecuado como el que, con algunas sombras, se ha ido generando en nuestro sistema de ciencia y tecnología, muy diferente del que teníamos en los años 70.

Sí, tengo que concluir este artículo agradeciendo: la vida ha sido generosa conmigo. Nunca hubiera podido imaginar cuando, siendo estudiante, empecé a practicar esquí de fondo que sería llamado al equipo nacional; tampoco cuando descubrí las montañas en los Pirineos imaginé que realizaría ascensiones en el Himalaya; cuando la democracia llegó a nuestro país, que tendría responsabilidades en la administración científica española, o cuando me inicié en investigación, que llegaría a ser miembro de las Academias de Ciencias de Alemania y Francia, o que recibiría prestigiosas distinciones. La más reciente, el premio Lord Lewis es un tanto especial para mí, no solo por haber sido el primer químico no británico en recibirla, sino porque lleva el nombre del que fue Presidente de la Royal Society of Chemistry y eso cierra un círculo: cuarenta y cinco años antes Jack Lewis (entonces aún no era lord) fue mi supervisor posdoctoral en Cambridge, donde me inicié en química organometálica.

La química continúa interesándome y, con el estatus de profesor honorario, sigo trabajando en la Universidad de Zaragoza y formando parte de varios consejos y comités científicos nacionales e internacionales. Una de mis recientes actividades en química ha sido la edición, este año, de un libro con la doctora Carmen Claver, titulado *Iridium*

Catalysts for Organic Reactions,^[30] que acaba de publicarse por Springer-Nature. Entre sus contenidos se presentan dos capítulos escritos con recientes colaboradores, Francisco Fernández-Álvarez y Manuel Iglesias. Esta edición actualiza, en parte, un libro anterior que publicamos en 2009 titulado *Iridium Complexes in Organic Synthesis* (Wiley-VCH).^[31]

Además de la química, ahora tengo más tiempo para mis aficiones deportivas de escalada, esquí y bicicleta de montaña. En verano, es un placer poder escalar, en el valle de Benasque, con mi hijo y nietos, así como esquiar en invierno. La pandemia ha impedido un proyectado nuevo viaje al Himalaya, que espero poder realizar en el futuro. De momento, hay que esperar. No se debe tentar muchas veces a la suerte y ya el año pasado estuve esquiando en Dolomitas, los primeros días de marzo, cuando la pandemia asolaba Italia. Pero tampoco puedo esperar mucho. Tengo 76 años, y aunque me encuentro físicamente bien, el tiempo pasa inexorablemente. Pero, mientras pueda, seguiré viviendo de la única forma que sé: en gerundio, escalando, aprendiendo, trabajando, investigando, disfrutando...

Hace unos veinte años, me impresionó la lectura de un libro titulado *El tío Tungsteno. Recuerdos de un Químico Precoz*, escrito por el prestigioso neurólogo, Oliver Sacks. Desde entonces he seguido algunas de sus brillantes contribuciones. En 2013, al cumplir los 80 años, escribía que la vejez era una época de ocio y libertad, liberado de urgencias pasadas y recordaba la reacción de Francis Crick cuando le comunicaron que tenía una enfermedad mortal. Crick miró al techo y pronunció «todo lo que tiene un principio tiene que tener un final», y continuo, en gerundio, trabajan-

do. Dos años más tarde, al ser diagnosticado de un cáncer terminal, Sacks se despedía con un artículo en *The New York Times* en el que, entre otras cosas, expresaba un último deseo para el tiempo que le quedaba de vida y era «adquirir nuevos niveles de comprensión y conocimiento».^[32] Y es así, debería ser así, mientras estemos vivos. Esa, la renuncia a la comprensión y al conocimiento, debería ser nuestra última renuncia en esta gran aventura y enorme privilegio que es la vida.

Bibliografía

- [1] Luis Oro, Doctor honoris causa por la Universidad Complutense. *Anal. Quim.* **2019**, *115*, 273-278.
- [2] F. J. Lahoz and J. J. Pérez Torrente, In Honour of the 70th Birthday of Professor Luis A. Oro, *ChemCatChem*, **2015**, *7*, 2282-2295.
K. Hindson, Birthday Issue, *Eur. J. Inorg. Chem*, **2015**, 2771-2773.
- [3] <https://rseq.org/muchas-felicidades-al-prof-oro-en-su-75-cumpleanos/>
https://www.chemistryviews.org/details/ezine/11246262/75th_Birthday_Luis_Oro.html
- [4] *Tendencias Actuales en Química*, **1986**, CAYCT-CSIC, 106 págs., ISBN 8400061810.
- [5] J. Elguero, La Química Española: 1981-2003, *Anal. Quim.*, **2003**, *99*, 11-17.
- [6] J. Elguero, La Química española vista por sus protagonistas, *Anal. Quim.*, **2015**, *111*, 25-28.
- [7] La denominación oficial de la llamada coloquialmente Ley de la Ciencia, era Ley 13/1986 de Fomento y Coordinación General de la Investigación Científica y Técnica.
- [8] S. Ramón y Cajal, *Reglas y consejos sobre investigación científica. Los tónicos de la voluntad*, **2005**, Edición CSIC, Madrid.
- [9] A. Lafuente y L. A. Oro, *El Sistema Español de Ciencia y Tecnología en el marco internacional: evolución y perspectivas*, **1992**, FUNDESCO, Madrid, 135 págs.
- [10] *Metal Clusters in Chemistry*, P. Braunstein, L. A. Oro and P. R. Raithby, Editors, **1999**, Wiley-VCH, Weinheim, 3 vol., 1798 págs.
- [11] P. Göllitz, Cutting a Gordian Knot: The Founding of Chemistry A European Journal, *Chem. Eur. J.*, **2020**, *26*, 9-10.
- [12] J. Jiménez Barbero y P. Espinet, ¿Adónde fue a parar la vieja revista Anales de Química?, *An. Quím.*, **2010**, *106*, 66-69.
- [13] *An. Quím.*, **2003**, *99*, 1-265.
- [14] W. Koch, Three Chemistry Europe Council Members Retiring, *Chem. Eur. J.*, **2021**, *27*, 9-11.
- [15] L. A. Oro, Greeting, A Jubilee Issue, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2007**, 2514.
- [16] *Fundamentos y Aplicaciones de la Catálisis Homogénea*, L. A. Oro y E. Sola, Ed., **2002**, Prensas Universitarias, Zaragoza, 222 págs.
- [17] V. Köster, L. Oro: EuChemS Past President, *ChemViews Mag.* **2012**, *10*.1002/chemv.201200008.
- [18] L. A. Oro, Moving from London to Brussels, *Chemistry in Europe*, *EuChemS*, **2020**, *4*, 34.
- [19] <https://www.yumpu.com/en/document/read/19547556/developing-solutions-in-a-changing-world-euchems>
- [20] L. A. Oro, Creating a European Identity through Conferences and Journals, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2016**, *55*, 10924-10925.
- [21] L. A. Oro, La Química Española en el Año Internacional de la Química, *Arbor*, **2011**, *CLXXXVII EXTRA*, 169-172.
- [22] *Acción CRECE*, COSCE, Madrid, **2005**, 168 pgs. DL: B-30.855-5-05. <https://cosce.org/accioncrece/>
- [23] Pedro Duque se compromete a recuperar el nivel de inversión en ciencia anterior a la crisis, *El País*, 12 de julio de 2018.
- [24] L. A. Oro, Un gran pacto de Estado en I+D, *El País*, 21 de diciembre de 2012, pág. 4.
- [25] L. A. Oro, *La Investigación Española en la Encrucijada*, **2013**, Prensas Universitarias, Zaragoza, pág. 53.
- [26] L. A. Oro y A. J. Schumacher, Una emergencia inaplazable, *El País*, 16 de enero de 2020, pág. 13.
- [27] <http://personal.unizar.es/oro/>
- [28] *Homogeneous Hydrogenation*, P. A. Chaloner, M. A. Esteruelas, F. Joó and L. A. Oro, **1994**, Kluwer Academic Publ., Dordrecht, The Netherlands, pág. 32.
- [29] Daniel Carmona, Miguel Ciriano, Miguel Esteruelas o Jesús Pérez-Torrente son coautores en unos cien artículos; Fernando Lahoz en cerca de trescientos.
- [30] *Iridium Catalysts for Organic Reactions*, L. A. Oro y C. Claver, Ed., **2021**, Book Series: Topics in Organometallic Chemistry, Springer Nature, Berlín, pág. 456.
- [31] *Iridium Complexes in Organic Synthesis*, L. A. Oro y C. Claver, Ed., **2009**, Wiley-VCH, Weinheim, 396.
- [32] O. Sacks, My own life, *The New York Times*, 19 de febrero de 2015.

INVESTIGACIÓN
QUÍMICA



S. Álvarez Reverter

Departament de Química Inorgànica i Orgànica -Secció de Química Inorgànica- e Institut de Química Teòrica i Computacional.

Universitat de Barcelona Martí i

Franquès, 1-11

08028 Barcelona

C-e: santiago@qi.ub.es

Recibido: 11/03/2021

Aceptado: 04/06/2021

ORCID: 0000-0002-4618-4189

Formas y conformaciones de anillos y clústeres inorgánicos de cuatro átomos

Un estudio estructural mediante medidas continuas de forma

Santiago Álvarez

Resumen: Se presenta un estudio CShM (medidas continuas de forma) de estructuras de cuatro átomos de elementos de los bloques *s* y *p*. Entre las *formas* de un grupo de *N* puntos, definida cada una por $3N$ coordenadas cartesianas, las *formas de referencia* son polígonos y poliedros regulares, así como sus combinaciones. El estudio CShM clasifica la mayoría de las estructuras, bien por su proximidad a una forma de referencia, bien estableciendo de forma cuantitativa sus posiciones a lo largo de caminos de mínima distorsión entre dos formas regulares. Las formas descritas por cada camino se agrupan genéricamente como una *conformación molecular*.

Palabras clave: Medidas de forma, estereoquímica, conformación molecular, poliedros, clústeres, estructura molecular.

Abstract: A structural perspective of groups of four atoms of the *s* and *p* block elements is presented, with the help of a continuous shape measures (CShM) analysis. Among the *shapes* of a group of *N* points, defined by $3N$ Cartesian coordinates, the *reference shapes* are regular polygons and polyhedra, together with univocally defined combinations thereof (e.g., two coplanar or perpendicular edge-sharing squares). This study classifies most of the structures either by their closeness to a regular shape, or by quantifying their positions along minimal interconversion pathways between two regular shapes. The many shapes described by a given pathway are generically grouped as a *molecular conformation*.

Keywords: Shape measures, stereochemistry, ring conformation, polyhedra, molecular structure, clusters.

Dedicado a Ronald J. Gillespie,
In Memoriam

Introducción

Los químicos somos a menudo traicionados por las representaciones de moléculas tridimensionales en un plano.^[1] Sin embargo, imaginar la forma en que una molécula plana puede abandonar Planilandia^[2] hacia el mundo tridimensional es un *gedanken experiment* (experimento hipotético) del que podemos aprender mucho sobre estereoquímica, enlace químico, isomería e incluso caminos de reacción. Anteriormente se ha mostrado cómo, en el terreno de la Química Orgánica, la pérdida de planaridad de anillos de seis átomos en la conformación de silla se puede describir elegantemente mediante el camino de mínima distorsión entre el hexágono regular, propio del benceno y el octaedro platónico; los anillos con una conformación de bote, a su vez, se encuentran sobre (o cerca de) el camino entre el hexágono y el prisma trigonal regular característico del prisma.^[3] Análogamente, los anillos de ciclobutano tienen formas intermedias entre el cuadrado regular y el tetraedro platónico, representados por el ciclooctadiendiuro y el tetraedrano, respectivamente, mientras que el ciclooctano y sus variantes insaturadas cubren diversos tramos del camino entre el octágono y el cubo platónico.

En química inorgánica se conoce una gran variedad de anillos y clústeres,^[4] con un amplio surtido de composiciones y formas, que nos ofrecen la oportunidad de explorar más a fondo las conexiones entre estructuras 2D

poligonales y 3D poliédricas. La aplicación de un análisis de medidas continuas de simetría (CShM) nos debe permitir una mejor descripción de sus estructuras, cuantificando sus desviaciones de las geometrías ideales, ya que las estructuras experimentales habitualmente se describen de forma muy ambigua, con adjetivos como *distorsionado*, *torcido*, *corrugado* o *aplanado*, que intentamos matizar a menudo con adverbios como *ligeramente*, *de forma significativa*, *fuertemente* o *severamente*. La metodología CShM nos permitirá también descubrir nuevos caminos y nuevas relaciones entre moléculas aparentemente muy diferentes. Las medidas continuas de forma^[5] han demostrado ofrecer una destacable caja de herramientas para el análisis estereoquímico de esqueletos moleculares mediante su comparación con polígonos y poliedros regulares o semi-regulares,^[6] o con sus distorsiones.^[7] En estudios anteriores sobre clústeres de metales de transición con ocho,^[8] nueve,^[9] once,^[10] y doce^[11] átomos se han investigado algunos caminos de distorsión, aunque de forma no exhaustiva. El presente trabajo se ceñirá a las agrupaciones de cuatro átomos de elementos de los bloques *s* y *p*, con excepción del carbono, incluyendo agrupaciones de cuatro moléculas de agua unidas por enlaces de hidrógeno.

Para una descripción detallada de la metodología de las CShM, el lector puede consultar algunos artículos des-

tacados,^[3,5,7] pero para facilitar la comprensión de este trabajo, permítaseme resumir brevemente los principales conceptos que se utilizan en él. La medida de forma de un grupo de átomos relativa a una forma de referencia (por ejemplo, el tetraedro, abreviado de acuerdo con la IUPAC como T-4), calibra mediante un único parámetro $S(T-4)$ las distancias de esos átomos a las que deberían ocupar en la estructura de referencia. Por tanto, una medida de cero, $S(T-4) = 0.00$, indica que esa agrupación tiene exactamente la forma ideal. Por tanto, una molécula perfectamente tetraédrica es aquella que tiene $S(T-4) = 0.00$, mientras que tetraedros distorsionados tendrán valores tanto mayores cuanto mayor sea la distorsión. En general, valores de unas pocas décimas reflejarán distorsiones pequeñas, mientras que valores superiores a la unidad revelan desviaciones importantes de la forma de referencia.

Puesto que una medida de forma mide la magnitud, pero no el tipo de distorsión, resulta práctico comparar una determinada estructura con dos formas de referencia diferentes. A partir de ellas se puede determinar la desviación del camino, que calibra la distancia de la estructura al camino de mínima distorsión que separa las dos formas de referencia. Una desviación del 0% indica que la estructura se encuentra directamente sobre el camino, aunque valores de hasta el 5 o 10% resultan en general aceptables para describir la estereoquímica de la molécula como intermedia entre las dos referencias. Además, se puede calcular su posición a lo largo del camino mediante la *coordenada generalizada de distorsión*, que puede adoptar valores del 0 al 100% de la longitud del camino.

Obsérvese que a lo largo de este artículo llamaremos formas de referencia a aquellas que están unívocamente determinadas, como los polígonos y poliedros regulares. En cambio, las estructuras semejantes que están alineadas a lo largo de un tramo del camino de mínima distorsión entre dos formas de referencia las agrupamos con el nombre de *conformación*. En el caso de los anillos de seis átomos como el ciclohexano, por ejemplo, las conformaciones de silla y bote son los conjuntos de formas que se encuentran a lo largo de los caminos del hexágono al octaedro, y del hexágono al prisma trigonal, respectivamente. En otras palabras, cada conformación corresponde a una familia de geometrías moleculares que ocupan una misma región de la *hiperesfera de formas de N puntos*.^[12]

Para designar las formas de referencia, usamos las abreviaturas en mayúsculas propuestas por la IUPAC para los poliedros de coordinación,^[13] seguidas del número de vértices del poliedro. Así, SP-4 se refiere al cuadrado regular (de *square planar*), T-4 al tetraedro, etc. Para otras formas de referencia que vamos introduciendo a lo largo de nuestros estudios, empleamos las abreviaturas estándar modificadas con prefijos en minúscula. De manera que una vacante en una figura regular se señala mediante una «v», y dos vacantes por el prefijo «dv» (de divacante), de modo que un octaedro divacante abreviado dvOC-4 define de forma unívoca una forma de caballete de referencia. De la misma forma, para una figura que resulta de añadir un vértice a una de las aristas de un poliedro (el *augmentado de*

arista)^[14] se emplea el prefijo «ec» (*edge capped*, cofiado de arista) y para el cofiado de una cara usamos simplemente «c». En este artículo, por ejemplo, introduciremos el triángulo equilátero con una arista aumentada, *ecTP-4* para definir un rombo formado por dos triángulos equiláteros coplanares que comparten un lado, que llamaremos de forma simplificada *biciclo*.

Grupos E_4 entre el tetraedro y el cuadrado

Para cartografiar la estereoquímica de anillos y clústeres inorgánicos de cuatro átomos, podemos empezar con las moléculas que contienen un grupo P_4 , ya sea neutro o iónico. Con ese fin, representamos sus datos estructurales en un mapa de forma relativo al tetraedro y el cuadrado (Figura 1). En él se aprecian cuatro familias de moléculas que ocupan diferentes regiones a lo largo del camino de mínima distorsión, según el grado de sustitución de los átomos de fósforo y de la carga neta de la agrupación P_4 . Esas familias se desglosan en el Esquema 1, en el que los intervalos de las coordenadas de distorsión que presenta cada familia se indican por el porcentaje de conversión de un cuadrado (0%) en un tetraedro (100%).

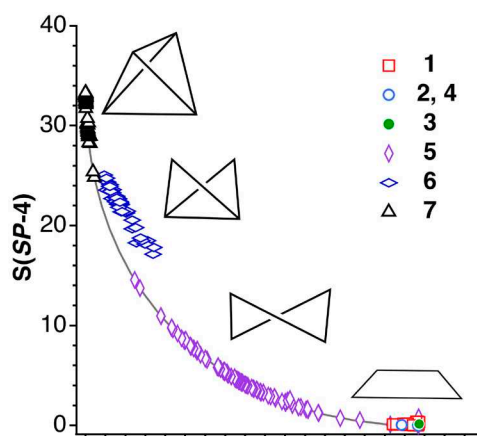
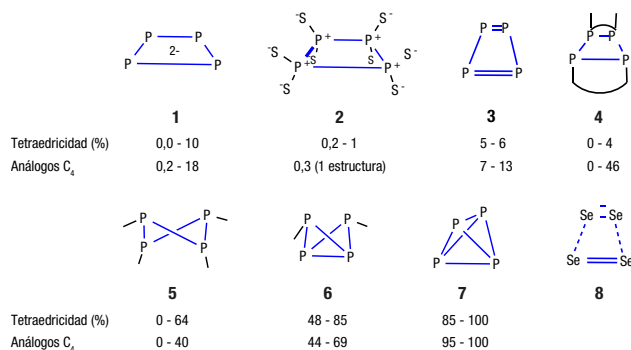


Figura 1. Estructuras encontradas de moléculas con un grupo P_4 que se pueden describir mediante geometrías intermedias entre el cuadrado regular (derecha, $S(T-4) = 33.3$) y el tetraedro (izquierda, $S(T-4) = 0.0$). Los sustituyentes de los grupos P_4 se omiten en aras de la simplicidad. Los números de los símbolos corresponden con la numeración de las fórmulas estructurales del Esquema 1.

Empezando por el extremo inferior derecho de la Figura 1, encontramos cuatro familias de compuestos con desviaciones muy pequeñas de la geometría plano cuadrada. La primera familia está formada por anillos aromáticos de P_4^{2-} (**1**), isoelectrónicos con el dianión ciclobutadienuro, con desviaciones hacia el tetraedro del 10% o menos (Esquema 1). Merece la pena anotar que todos esos anillos aparecen coordinados a metales de transición en las estructuras encontradas. El segundo grupo de estructuras, próximas al cuadrado, son las de tres sales del anión $P_4S_8^{4-}$ (**2**),^[15] isoelectrónico con el ciclobutano. A continuación, en un tercer grupo, hallamos algunos anillos descritos como tetrafosfaciclobutadieno (**3**), que se en-



Esquema 1. Fórmulas estructurales genéricas de moléculas con una agrupación P₄, cuyos intervalos de conversión del cuadrado al tetraedro (porcentaje de tetraedricidad) se indican al pie de cada familia, así como los valores correspondientes a los sistemas orgánicos análogos. Para (Se₄)²⁺ y especies isoelectrónicas no se dan valores de tetraedricidad, ya que son rectángulos alargados, lejos del camino hacia el tetraedro.

cuentran coordinados a metales de transición,^[16] y cuyas desviaciones del cuadrado regular, aunque pequeñas, responden a formas rectangulares y se correlacionan con el cociente entre el lado largo y el corto del rectángulo. Por último, tenemos una familia de tetrafosfaciclobutanos, en los que los substituyentes de los átomos de fósforo forman difosfaciclos (**4**).^[17]

Más a la izquierda en la Figura 1 encontramos un gran número de anillos de fórmula general P₄R₄ (**5**), la mayoría de los cuales presentan diversos grados de pérdida de planaridad (0-64% de tetraedricidad). Vale la pena resaltar que cada eslabón PR del anillo es electrónicamente equivalente al grupo (PR₂)⁺, como se muestra en **9a**, ya que el electrón de menos en el átomo de fósforo debido a la carga positiva se reemplaza por el que aporta el radical del segundo substituyente. La familia **5**, por lo tanto, incluye también los cationes (P₄R₅)⁺ y (P₄R₆)²⁺. En realidad, sólo algunos miembros de esa familia tienen formas muy próximas al cuadrado (con tetraedricidades menores del 12%), comportamiento que debe atribuirse sin duda a efectos estéricos, ya que en todos esos casos los substituyentes de los átomos de fósforo son grupos voluminosos, como NiPr₂, tBu, SiMe₃ o ferrocenilo.

Muy lejos ya del cuadrado aparece la familia de los biciclo(1.1.0)-tetrafosfanos (**6**), con forma de mariposa y tetraedricidades de entre el 48 y el 85%, si bien esos valores deben tomarse como aproximados sólo, ya que esas estructuras se desvían del camino de mínima distorsión entre un 6 y un 15%. Es interesante hacer un inciso para observar que en esta familia de estructuras las más próximas al tetraedro son las que tienen sólo dos substituyentes, y se acercan más a la forma plana a medida que aumenta el número de substituyentes, de manera que las estructuras más próximas al tetraedro corresponden a los aniones As₄²⁻ y Sb₄²⁻ coordinados a dos metales,^[18] mientras que la más aplanada (42% de tetraedricidad) corresponde al compuesto (PiPr₂)₂(BC₆HMe₄)₂, con seis substituyentes en el esqueleto P₂B₂.^[19] De hecho, ese anillo forma parte de una familia de compuestos (PR₂)₂(BR)₂ cuyas geometrías muestran además el efecto de las diferentes voluminosidades de los substituyentes (Figura 2).

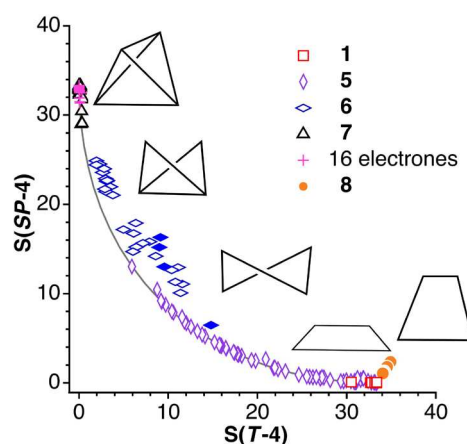
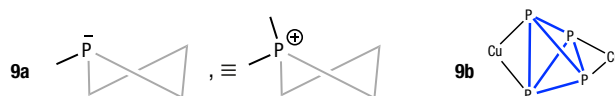


Figura 2. Geometrías encontradas para moléculas con grupos E₄ de elementos de los grupos 13 al 16, descritas como distorsiones del cuadrado regular (derecha, S(T-4) = 33.3) hacia el tetraedro (izquierda, S(T-4) = 0.0). Los substituyentes de los anillos se omiten en aras de la simplicidad. Los números de los símbolos corresponden con la numeración de las fórmulas estructurales del Esquema 1; los rombos rellenos resaltan una familia de anillos P₂B₂.^[19]

Por último, los grupos neutros P₄ sin substituyentes, característicos del fósforo blanco (**7**), que pueden estar también coordinados a metales de transición en unos cuantos compuestos, aparecen muy próximos a la forma tetraédrica (parte superior izquierda de la Figura 1). Sin embargo, aunque el propio fósforo blanco^[20] tiene un 99% de tetraedricidad, los grupos hallados en la CSD presentan desviaciones del tetraedro perfecto pequeñas pero no despreciables, de manera que los grupos coordinados aparecen con un abanico de formas que oscila entre el 87 y el 100 % de tetraedricidad. El tetraedro más perfecto de esta familia es el grupo P₄ enjaulado dentro de un contenedor orgánico,^[21] mientras que los dos tetraedros más distorsionados aparecen en dos estructuras^[22] coordinados de modo bis(bidentado) a dos átomos de cobre (**9b**), de manera que las dos aristas coordinadas son 0,20 Å más largas que el resto. Los grados de tetraedricidad cubiertos por compuestos de tipos **1 - 7** (Esquema 1) son parecidos a los encontrados para grupos C₄ orgánicos análogos. En el caso de la estructura **2**, la única molécula orgánica análoga cuya estructura ha sido determinada por rayos X^[23] es C₄(OH)₈, con un 0,3 % de tetraedricidad.



Si generalizamos el análisis incluyendo cualquier otro elemento de los grupos 13-16 excepto el fósforo, encontramos una distribución muy similar (Figura 2) de estructuras a lo largo del camino del cuadrado al tetraedro. Vemos, por ejemplo, que una versión perfecta de este poliedro platónico está representada por la molécula As₄ en fase gas^[24] o co-cristalizada con otras moléculas,^[25] mientras que versiones casi perfectas se hallan coordinadas a un átomo de un metal de transición,^[26] de la misma

manera que hace su análogo de fósforo. También encontramos tetraedros prácticamente perfectos de tetrasil-^[27] y tetragema-tetraedranos,^[28] y de aniones $(E_2M_2)^{2-}$ ($E = As, Sb, Bi; M = Ge, Sn, Pb$).^[29] Otros tetraedros incorporan en los vértices combinaciones de grupos isoelectrónicos, como Sb, Bi, ER ($E = Si, Ge$), o E^- ($E = Si, Ge, Sn$), dando lugar a grupos de 20 electrones de valencia, de los cuales 12 participan en el enlace del grupo. Es interesante observar que existe una familia de compuestos deficientes de electrones de fórmula general E_4R_4 , siendo E cualquier elemento del grupo 13, que forman también tetraedros próximos a la perfección, pero con un número totalmente diferente de electrones de valencia (16), de los cuales sólo 8 sostienen los enlaces E-E.

Igual que en el caso del fósforo, encontramos tetraedros algo más distorsionados en la familia de moléculas análogas al biciclobutano (**6**), representadas por los aniones E_4^{2-} y las moléculas $E_2(ER)_2$ ($E = As, Sb$), con 22 electrones de valencia y conformación de mariposa. A continuación, se ven una gran cantidad de anillos que contienen los fragmentos $GaR_2^-, NR_2^+, AsR, SbR, SbL^+, Sb^-, Se, Se,$ and Te , todos ellos isoelectrónicos con CH_2 , y cuyas combinaciones forman anillos con 24 electrones de valencia. Esos anillos cubren una amplísima porción del camino entre el cuadrado y el tetraedro, desde cuadrados casi perfectos hasta anillos con tetraedricidades del 60%.

Tal como es de esperar, un grupo de iones moleculares isoelectrónicos con $C_4H_4^{2-}$, los dianiones E_4^{2-} ($E = As, Sb$)^[31] y el dicatión Te_4^{2+} ,^[32] todos ellos especies de 22 electrones de valencia, aparecen como perfectamente cuadrados. Por el contrario, especies relacionadas con 26 electrones tienen geometrías rectangulares, que aparecen en el mapa de forma (Figura 2) alineadas más a la derecha de la posición del cuadrado regular. Se trata de los cationes $E_4R_4^{2+}$ ($E = Se, Te$).^[33] Su clara forma rectangular se debe a la existencia de dos enlaces débiles de tres electrones entre dos radicales (**8**), con un total de 10 electrones para 4 enlaces σ entre los átomos del anillo. Los dímeros del radical TCNE⁻, con el mismo número de electrones,^[34] presentan una geometría análoga, la misma que se encuentra en una especie destacable de 28 electrones, Se_4Br_4 .^[35]

Existe también un gran número de grupos E_4 de más de un elemento que no se muestran en la Figura 2 en aras de la claridad, la mayoría de los cuales aparecen repartidos por el camino de mínima distorsión, desde cuadrados regulares a anillos con una pérdida significativa de la planaridad, mientras que otros muchos tienen geometrías rómbricas y se agrupan cerca de la posición del tetraedro en el mapa de forma. Todos esos resultados se resumen en la Figura 3. En ella observamos que la geometría de grupos de cuatro átomos puede variar de rectangular a cuadrada, a bicíclica no plana, o tetraédrica, dependiendo del número de electrones de valencia. Es también destacable que especies de 22 electrones como el anión As_4^{2-} pueden existir con dos formas diferentes, que se corresponden con sendos estereoisómeros, cuadrado^[30] (**1**) o bicíclico en forma de mariposa (**6**),^[36] según se distribuyan los electrones del esqueleto en los sistemas σ y π (Figura 3). La misma

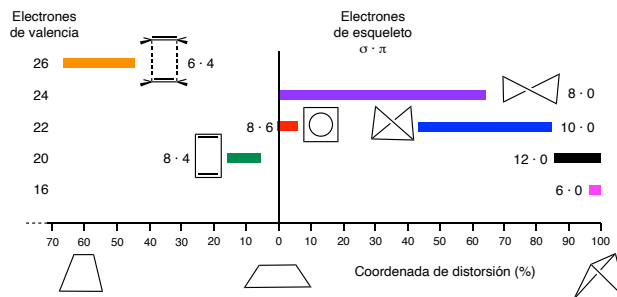


Figura 3. Distribución de geometrías moleculares de grupos de 4 átomos de los bloques s y p a lo largo de los caminos de mínima distorsión del cuadrado al tetraedro regular (del cero hacia la derecha) y a un rectángulo de referencia (del cero hacia la izquierda). Código de colores como en la Figura 1.

situación se encuentra para los aniones análogos de fósforo y de antimonio. Otro posible caso de estereoisomería aparece para agrupaciones de 20 electrones, que pueden tener forma rectangular con dos dobles enlaces (**3**), o de tetraedro. No se han podido localizar en este estudio ejemplos inorgánicos de este tipo de isomería que, en cambio, aparece nítidamente en los correspondientes isómeros orgánicos C_4R_4 , el butadieno y el tetraedrano [$R = tBu$;^[37] $R_4 = (SiMe_3)_3(C_6F_5)$].^[38]

Otras geometrías de grupos E_4

En la sección anterior se han analizado sólo las formas de aquellos grupos E_4 que se desvían como máximo un 10% del camino del cuadrado al tetraedro, o del cuadrado a un rectángulo, excepto para los rombos de P_4 doblados (**6**, Figura 1), para los que se admitieron desviaciones de hasta el 15%. Esa restricción ha dejado fuera de la discusión un 26% de moléculas cristalográficamente independientes de un total aproximado de 4.800. ¿Qué podemos decir de las estructuras de esas moléculas? Para responder a esta pregunta se ha investigado el mapa de forma de conversión de un rombo bicíclico (ecTP-4 de forma abreviada) en un tetraedro, que se presenta en la Figura 4a, restringido a compuestos cercanos al camino de mínima distorsión. Dicho camino consiste simplemente en doblar los dos triángulos alrededor del enlace E-E central hasta que los vértices no compartidos se acerquen a la distancia de enlace. Como se ve en el mapa, hay una clara discontinuidad en la distribución de estructuras cerca del tetraedro que separa las moléculas fuertemente dobladas con cinco enlaces E-E ($4 \leq S(ecTP-4) \leq 26$) de aquellas que tienen seis enlaces y forma tetraédrica ($33 \leq S(ecTP-4) \leq 38$). Un punto que aparece en tierra de nadie ($S(ecTP-4) = 28$) corresponde a la estructura del anión $Si_4R_3^-$ con sustituyentes voluminosos ($R = SiMe(CH(tms)_2)_2$).^[35] En el que una de las distancias Si-Si (2,73 Å) es mucho más larga que el resto (2,32 (2) Å), de manera que las medidas de forma describen una crisálida tetraédrica a punto de abrirse para convertirse en una mariposa.

Si representamos ahora todas las estructuras E_4 en el mismo mapa de forma, sin restricciones (Figura 4b),

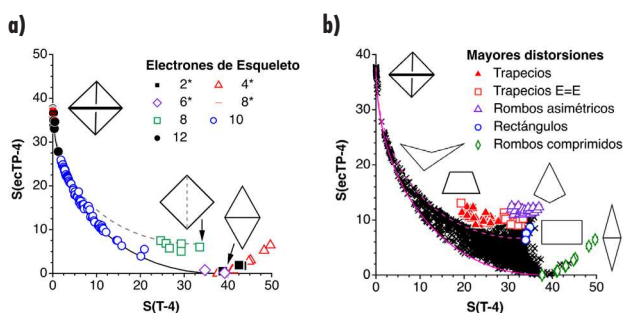


Figura 4. Estructuras de grupos E_4 en el mapa de forma relativo a la forma bicíclica ($ecTP-4$) y al tetraedro ($T-4$). (a) Limitado a compuestos que se desvían como máximo un 10% del camino de mínima distorsión (círculos), compuestos que están en el camino que va del tetraedro al cuadrado (cuadrados) y los que se alejan del camino hacia la forma de rombo alargado (triángulos). Los símbolos indican el número de electrones de esqueleto de cada familia, y un asterisco indica compuestos deficientes de electrones. La línea de trazos representa las estructuras ideales a lo largo del camino de mínima distorsión entre el tetraedro y el cuadrado. (b) El mismo mapa incluyendo todas las moléculas halladas.

podemos hacer varias observaciones: (i) La discontinuidad entre el tetraedro y las mariposadas se mantiene. (ii) Hay un gran número de estructuras alejadas tanto del camino del tetraedro al cuadrado, como del tetraedro al doble triángulo. Muchas de ellas, sin embargo, ocupan la zona intermedia entre ambos caminos, que presentan simultáneamente los dos tipos de distorsión: una apertura del tetraedro y una elongación de la bisagra E-E. (iii) Otras estructuras aparecen a la derecha y por encima de los caminos estudiados, y el análisis de las mismas permite establecer los tipos de formas a que corresponden (de izquierda a derecha en la Figura 4b): (iii-a) trapecios, (iii-b) trapecios con un enlace doble E=E, (iii-c) rombos alargados asimétricos, (iii-d) rectángulos y (iii-e) rombos comprimidos. En la Figura 5 se pueden ver ejemplos de algunos grupos E_4 representativos de esas distorsiones. Por supuesto, también se pueden encontrar estructuras con combinaciones de dos o más de esas distorsiones, lo que resulta en una fuerte dispersión de puntos en varias regiones del mapa. Para evitar confusión en la interpretación de la Figura 4b se debe recordar que dos estructuras que ocupan el mismo punto del mapa sólo tienen la misma forma si están sobre el camino de mínima distorsión entre las dos formas de referencia del mapa. Si no, su coincidencia en el mapa indica únicamente que están a la misma distancia de las dos formas ideales, aunque pueden estar muy distantes una de otra. Sucede lo mismo que la representación de la posición de un avión en un mapa, que puede estar miles de metros por encima del punto que lo representa en un mapa.

Agrupaciones de cuatro moléculas de agua

En muchas estructuras cristalinas las moléculas de agua de cristalización no aparecen aisladas, sino formando agrupaciones de varias moléculas, unidas entre sí por enlaces de hidrógeno. Entre las agrupaciones de cuatro moléculas se encuentra una gran diversidad estructural. Como ejemplo se muestra un mapa de forma (Figura 6a) en el que

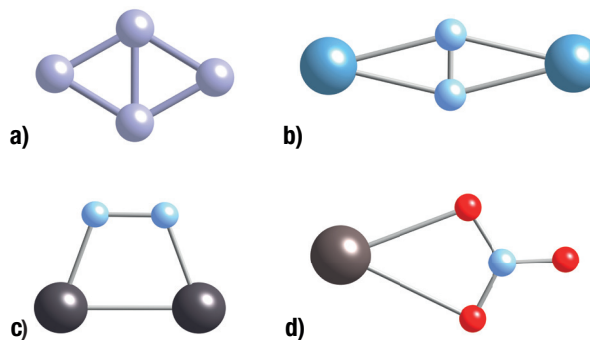


Figura 5. Estructuras de algunos grupos E_4 , que incluyen (a) un grupo B_4 con forma de triángulo cofiado en una arista ($ecTP-4$) en el compuesto $B_4(NMe_2)_{139}$ y otros que se desvían sensiblemente de los caminos de distorsión analizados en las Figuras 1, 2 y 4a; (b) un rombo Li_3N comprimido en el catión $[(thf)_2Li]_2N_3^{2+}$; (c) un trapecioide Sn_4N_4 en $(Sn(o-CH_2NMe, Bz))_4(SnPh)_2^{417}$ y (d) un anillo quelato $Pb(NO_3)_4$ en catena- $[(m-2,2'-(1H-imidazol-3-ilo-1,3-dil)diacetato)-(NO_3)_2Pb]_n$.

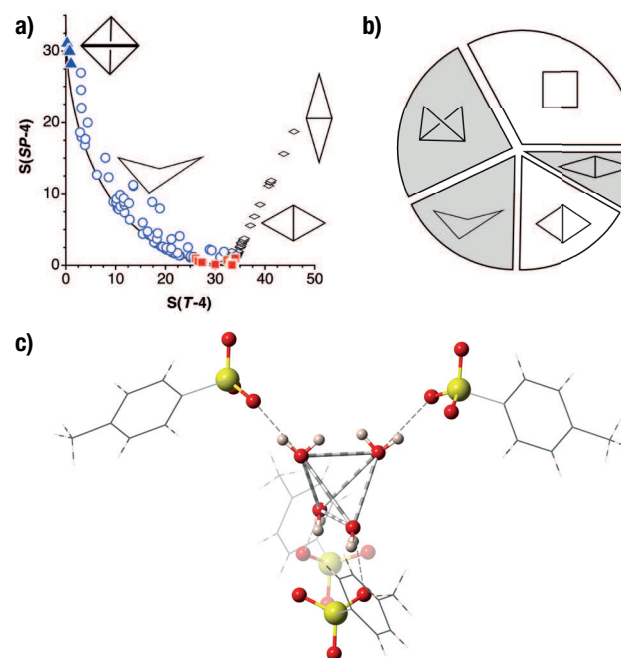


Figura 6. (a) Mapa de forma para agrupaciones $(H_2O)_4$ respecto del tetraedro y el cuadrado. (b) Proporción de grupos $(H_2O)_4$ que presentan dos formas de referencia (fondo blanco) o conformaciones a lo largo de caminos de distorsión (porciones sombreadas). (c) Agrupación tetraédrica de moléculas de agua que conectan cuatro grupos sulfonato de aniones tosilato.^[44]

se aprecia la existencia de clústeres tetraédricos, plano-cuadrados y bicíclicos, así como conformaciones intermedias entre las dos primeras formas, y entre el cuadrado y un rombo comprimido. En la Figura 6b se resumen las proporciones en que se encuentran varias formas y conformaciones. Aunque las agrupaciones tetraédricas no son muy frecuentes (0,8%) y no se aprecian en el diagrama de distribución, se han podido localizar cuatro de ellas,^[43] de las cuales el mejor ejemplo (Figura 6c) es un clúster tetraédrico con distancias $O \cdots O$ de 2,96 – 3,13 Å, del que cada molécula de agua se une mediante un enlace de hidrógeno fuerte^[44] (2,73 Å) a un oxígeno de un anión tosilato.

Conclusiones

El estudio presentado muestra la relación entre forma, conformación y recuento de electrones en grupos de cuatro átomos de elementos de los grupos principales. Se ha podido observar, por ejemplo, que los grupos con 22 electrones de valencia se encuentran tanto como cuadrados aromáticos como en conformaciones rómbicas no planas de tipo mariposa; la diferencia está en cómo se distribuyen esos electrones de valencia. En los anillos aromáticos, 8 electrones forman los enlaces con cuatro sustituyentes, 8 más forman los cuatro enlaces σ E-E y 6 ocupan el sistema π . En cambio, en las mariposas hay 12 electrones implicados en enlaces con seis sustituyentes, y los diez restantes forman los cinco enlaces σ E-E. Una relación diferente se da entre las mismas mariposas y los rectángulos alargados (**8**) de dímeros de radicales, semejantes a los que forma el ión radical tetracianoetileno(-). Ambos sistemas tienen 10 electrones de esqueleto, pero difieren en el número total de electrones de valencia, 22 y 26, respectivamente. Por otro lado, también encontramos sistemas que con diferente número de electrones tienen la misma forma, como los tetraedros que aparecen en dos variantes, una que cumple las reglas de recuento de electrones, con veinte electrones de valencia, y otra deficiente de electrones con tan solo 16 electrones de valencia (Figura 3). Finalmente, se ha cartografiado la estereoquímica de clústeres de cuatro moléculas de agua, que muestran también una gran variedad estructural.

Metodología

Las búsquedas estructurales se han hecho en la CSD,^[45] versión 5.42, para grupos de 4 átomos que forman como mínimo cuatro enlaces en forma de anillo independiente, sin formar especies bi- o policíclicas que incluyan a otros átomos. También se han realizado búsquedas más restringidas en las bases de datos de sólidos inorgánicos ICSD^[46] y la de gases MOGADOC.^[47] Las estructuras con desorden se han descartado sólo en los casos en que el desorden afecta a los átomos del grupo E_4 . Para las búsquedas de clústeres formados por cuatro moléculas de agua unidas por enlaces de hidrógeno se han tenido en cuenta todas las estructuras con cuatro átomos de oxígeno a distancias de entre 1,6 y 3,2 Å, excluyéndose las que contienen un contacto a un quinto átomo de oxígeno. En ese caso las búsquedas se han limitado a estructuras sin desorden y con un factor R menor de 5%. Las medidas de forma se obtuvieron a partir de los datos estructurales con el programa Shape, versión 2.2.^[48] Las formas de referencia se han definido en todos los casos con todas las aristas de la misma longitud, a diferencia de trabajos anteriores en el campo de la química de coordinación, en que se definen con todas las distancias al centro de la forma iguales, aunque en algunos casos ambas definiciones son equivalentes, como en el tetraedro y en el cuadrado.

Agradecimientos

El autor agradece la financiación de los proyectos PGC2018-093863-B-C21 por parte de MINECO, MDM-2017-0767 del programa María de Maeztu, y 2017-SGR-1289 de la AGAUR.

Bibliografía

- [1] S. Álvarez, C. R. *Chimie* **2019**, *22*, 437-444.
- [2] E. A. Abbott, *Flatland. A Romance of Many Dimensions*, Dover, Nueva York, 1992.
- [3] S. Álvarez, J. Echeverría, *J. Phys. Org. Chem.* **2010**, *23*, 1080-1087.
- [4] R. J. Gillespie, *Chem. Soc. Rev.* **1979**, *8*, 315-351; R. Steudel, M. Kustos, en *Encyclopedia of Inorganic Chemistry*, R. B. King, Ed.; John Wiley & Sons, Chichester, **1994**, vol. 7, 4009-4038; R. Steudel, *The Chemistry of Inorganic Ring Systems*, Elsevier, Amsterdam, 1992; M. Driess, H. Nöth, *Molecular Clusters of the Main Group Elements*, Wiley-VCH, Weinheim, 2004; T. Chivers, en *Comprehensive Inorganic Chemistry II*, 2.ª ed., J. Reedijk, Poepplmeier K. (eds.), Elsevier, Amsterdam, 2013, vol. 1; P. Braunstein, L. A. Oro, P. R. Raithby, *Metal Clusters in Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim, 1999.
- [5] M. Pinsky, D. Avnir, *Inorg. Chem.* **1998**, *37*, 5575-5582; S. Álvarez, D. Avnir, M. Lluell, *New J. Chem.* **2002**, *26*, 996-1009.
- [6] S. Álvarez, *An. Real Soc. Esp. Quím.* **2003**, *99*, 29-44.
- [7] S. Álvarez, P. Alemany, D. Casanova, J. Cirera, M. Lluell, D. Avnir (coords.), *Chem. Rev.* **2005**, *249*, 1693-1708; S. Álvarez, E. Ruiz, en *Supramolecular Chemistry, From Molecules to Nanomaterials*, J. W. Steed, Gale P. A. (eds.), John Wiley & Sons, Chichester, Reino Unido, 2012, vol. 5, págs. 1993-2044.
- [8] D. Casanova, M. Lluell, P. Alemany, S. Álvarez, *Chem. Eur. J.* **2005**, *11*, 1479-1494.
- [9] A. Ruiz-Martínez, D. Casanova, S. Álvarez, *Dalton Trans.* **2008**, 2583-2591.
- [10] S. Álvarez, J. (coord.), *Chem.* **2018**, *71*, 590-600.
- [11] S. Álvarez, *Inorg. Chim. Acta* **2010**, *363*, 4392-4398.
- [12] D. Casanova, J. Cirera, M. Lluell, P. Alemany, D. Avnir, S. Álvarez, *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 1755-1763.
- [13] N. G. Connelly, T. Damhus, R. M. Harisborn, A. J. Hutton; *Nomenclature of Inorganic Chemistry*. IUPAC Recommendations 2005; RSC Publishing: Cambridge, 2005; pág. 176.
- [14] S. Álvarez, *Dalton Trans.* **2005**, págs. 2209-2233.
- [15] E. K. Badeeva, D. B. Krivolapov, A. T. Gubaidulin, L. A. Litvinov, E. S. Bateeva, O. G. Sinyashin, *Mendeleev Commun.* **2005**, *22-23*; A. T. Gubaidulin, E. K. Badeeva, D. B. Krivolapov, L. A. Litvinov, E. S. Bateeva, O. G. Sinyashin, *J. Struct. Chem. (Zh. Strukt. Khim.)* **2007**, *48*, 954-959.
- [16] F. Spitzer, C. Gral, G. Balazs, E. Madl, M. Keilwerth, E. M. Zoinhofer, K. Meyer, M. Scheer, *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 2716-2721; S. Yao, N. Lindenmaier, Y. Xiong, S. Inoue, T. Szilvási, M. Adelhardt, J. Sutter, K. Meyer, M. Driess, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 1250-1254.

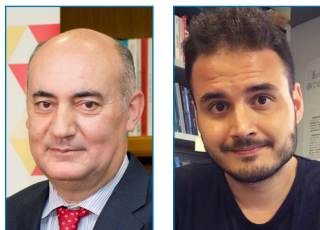
- [17] S. Du, J. Yang, J. H. Hu, Z. Chai, G. Luo, Y. Luo, W.-X. Zhang, Z. Xi, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 6843-6847; G. Hierlmeier, P. Coburger, M. Bodensteiner, R. Wolf, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 16918-16922; B. Geissler, S. Barth, U. Bergsträsser, M. Slany, J. Durkin, P. B. Hitchcock, P. Binger, J. F. Nixon, P. v. R. Schleyer, M. Regitz, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1995**, *34*, 484-487.
- [18] S. Heinel, M. Scheer, *Chem. Sci.* **2014**, *5*, 3221-3225; L. Tsucher, C. Ganesamoorthy, D. Blässer, S. Schulz, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 10657-10661.
- [19] D. Scheschkewitz, H. Amil, H. Gornitzka, W. W. Schoeller, D. Bourissou, G. Bertrand, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2004**, *43*, 585-587.
- [20] A. Simon, H. Borrmann, H. Craubner, *Phosphorus Sulfur Rel. Elem.* **1987**, *30*, 507-510.
- [21] T. Jiao, L. Cheh, D. L. Yang, X., G. Wu, P. Zeng, A. Zhou, Q. Yin, Y. Pan, B. Wu, X. Hong, X. Kong, V. M. Lynch, J. L. Sessler, H. Li, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 14545-14550.
- [22] F. Spitzer, M. Sienka, M. Latronico, P. Mastroilli, A. V. Virovets, M. Scheer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 4392-4396; L. C. Forfar, T. J. Clark, M. Green, S. M. Mansell, C. A. Russell, R. A. Sanguramath, J. M. Slattery, *Chem. Commun.* **2012**, *48*, 1970-1972.
- [23] C. M. Bock, *J. Am. Chem. Soc.* **1968**, *90*, 2748-2751.
- [24] Y. Morino, T. Ukaji, T. Ito, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1966**, *39*, 64-71.
- [25] C. Schwarzmaier, A. Schindler, C. Heindl, S. Scheuermayer, E. V. Peresypkina, A. V. Virovets, M. Neumeier, R. Gschwind, M. Scheer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 10896-10899; D. Yang, J. Zhao, L. Yu, X. Lin, W. Zhang, H. Ma, A. Gogoll, Z. Zhang, X.-J. Yang, B. Wu, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 5946-5951.
- [26] C. Schwarzmaier, A. Y. Timoshkin, M. Scheer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 7600-7603.
- [27] N. Wiberg, C. M. M. Finger, H. Auer, K. Polborn, *J. Organomet. Chem.* **1996**, *521*, 377-386; F. Meyer-Wegener, S. Scholz, S. Sängler, F. Schödel, M. Bolte, M. Wagner, H.-W. Lerner, *Organometallics* **2009**, *28*, 6835-6837.
- [28] N. Wiberg, W. Hochmuth, H. Noth, A. Appel, M. Schmidt-Amelunxen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1996**, *35*, 1333-1334.
- [29] F. Lips, I. Schellenberg, R. Pottgen, S. Dehnen, *Chem. Eur. J.* **2009**, *15*, 12968-12973; S. C. Critchlow, J. D. Corbett, *Inorg. Chem.* **1985**, *24*, 979-981; K. Mayer, J. V. Dums, W. Klein, T. F. Fässler, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 15159-15163; S. Mitzinger, L. Broeckert, W. Massa, F. Weigend, S. Dehnen, *Nature Commun.* **2016**, *7*, 10480.
- [30] T. Hanauer, F. Kraus, M. Reil, N. Korber, *Monatsh. Chem.* **2006**, *137*, 147-156.
- [31] S. C. Critchlow, J. D. Corbett, *Inorg. Chem.* **1984**, *23*, 770-774.
- [32] J. Beck, M. Zink, Z. Anorg. *Allgem. Chem.* **2009**, *635*, 692-699; C. Schulz, J. Daniels, T. Bredow, J. Beck, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 1173-1177.
- [33] B. Mueller, H. Poleschner, K. Seppelt, *Dalton Trans.*, 2008, págs. 4424-4427; H. Poleschner, K. Seppelt, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 12838-12842.
- [34] J. J. Novoa, P. Lafuente, R. E. Del Sesto, J. S. Miller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2001**, *40*, 2540-2545.
- [35] V. Janickis, M. Necas, Z. Anorg. *Allgem. Chem.* **2010**, *636*, 818-823.
- [36] C. Schwarzmaier, A. Y. Timoshkin, G. Balázs, M. Scheer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 9077-9081.
- [37] H. Imgartinger, M. Nixdorf, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1983**, *22*, 403-404; H. Imgartinger, A. Goldmann, R. Jahn, M. Nixdorf, H. Rodewald, G. Maier, K.-D. Malsch, R. Emrich, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1984**, *23*, 993-994.
- [38] Y. Inagaki, M. Nakamoto, A. Sekiguchi, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 16436-16439; M. Nakamoto, Y. Inagaki, M. Nishina, A. Sekiguchi, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 3172-3173.
- [39] A. Maier, M. Hofmann, H. Prtitzkow, W. Siebert, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2002**, *41*, 1529-1532.
- [40] J. Ho, R. J. Drake, D. W. Stephan, *J. Am. Chem. Soc.* **1993**, *115*, 3792-3793.
- [41] Z. Padelkova, M. S. Nechaev, A. Lycka, J. Holubova, T. A. Zevaco, A. Ruzicka, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2009**, 2058-2061.
- [42] C. N. Babu, P. Suresh, K. Srinivas, A. Sathyanarayana, N. Sampath, G. Prabusankar, *Dalton Trans.* **2016**, *45*, 8164-8173.
- [43] G. Smith, U. D. Wermuth, Z. *Kristallogr. Cryst. Mater.* **2018**, *233*, 145-151; M. Zhu, L. Han, Q.-Q. Wang, M.-J. Wei, T. Su, C.-Y. Sun, X.-L. Wang, Z.-M. Su, *Inorg. Chem. Commun.* **2018**, *96*, 153-158; M. S. Grigor'ev, I. A. Charushnikova, A. M. Fedoseev, *Radiochem. (Engl. transl. of Radiokhim.)* **2016**, *458*, 349-359; Y. Ma, A.-L. Cheng, E.-Q. Gao, *Cryst. Growth. Des.* **2010**, *10*, 2832-2834.
- [44] G. R. Desiraju, T. Steiner; *The Weak Hydrogen Bond*; Oxford University Press, Oxford, 1999; pág. 13.
- [45] C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot, S. C. Ward, *Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Cryst. Cryst. Chem.* **2016**, *72*, 171-179.
- [46] A. Belsky, M. Hellenbrandt, V. L. Karen, P. Luksch, *Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Cryst. Cryst. Chem.* **2002**, *58*, 364-369.
- [47] J. Vogt, B. Mez-Starck, N. Vogt, W. Hutter, *J. Mol. Struct.* **1999**, *485-486*, 249-254.
- [48] *SHAPE. Program for the Stereochemical Analysis of Molecular Fragments by Means of Continuous Shape Measures and Associated Tools (2.2)*, M. Llunell, D. Casanova, J. Cirera, P. Alemany, S. Álvarez, Universitat de Barcelona, Barcelona, 2013.

Innovación educativa en Física y Química en tiempos de pandemia

Una iniciativa para destacar la labor del profesorado en una etapa histórica singular

ENSEÑANZA
DE LA QUÍMICA

Gabriel Pinto Cañón  y Luis Moreno Martínez 



G. Pinto^{1,2}

L. Moreno^{1,3}

¹ Grupo Especializado en Didáctica e Historia, Reales Sociedades Españolas de Física y de Química, Ciudad Universitaria, 28040 Madrid.

² Universidad Politécnica de Madrid, 28006 Madrid.

³ CEIPS Vicente Aleixandre, 28792 Miraflores de la Sierra (Madrid).

C-e: gabriel.pinto@upm.es

Recibido: 06/07/2021

Aceptado: 30/07/2021

ORCID: 0000-0002-8961-7255

ORCID: 0000-0002-4540-5752

Resumen: El presente trabajo expone las principales características de los «Premios a la innovación educativa en Física y Química en tiempos de pandemia» convocados por el Grupo Especializado en Didáctica e Historia de la Física y la Química, común a las Reales Sociedades Españolas de Física y de Química. A través de los proyectos premiados se presentan diferentes recursos educativos y experiencias didácticas de interés para la enseñanza de las materias de Física y Química de Educación Secundaria Obligatoria y Bachillerato. Los trabajos galardonados ilustran la creatividad de los docentes y la diversidad de metodologías didácticas que conviven en nuestras aulas, incluyendo desde herramientas digitales a experimentos caseros. Se pretende así difundir buenas prácticas educativas para el futuro, a la par que reconocer la destacada labor realizada por el profesorado de enseñanza secundaria durante la pandemia de COVID-19.

Palabras clave: COVID-19, Enseñanza Secundaria, Física y Química, innovación educativa, premios al profesorado.

Abstract: This paper presents the main features of the «Educational Innovation in Physics and Chemistry during Pandemic Times Awards» driven by the Specialized Group on Didactics and History of Physics and Chemistry of the Spanish Royal Societies of Physics and Chemistry. By the study of the awarded projects, this work offers a wide range of educational resources and didactic experiences of interest for Physics and Chemistry teaching in secondary education. The awarded projects also pointed out the creativity of high school teachers and the diversity of pedagogical methodologies in Spanish classrooms, such as digital tools or homemade experiments. Hence, several educational practices are presented in order to highlight the outstanding work of secondary education teachers during the COVID-19 pandemic.

Keywords: Awards for teachers, COVID-19, educational innovation, Physics and Chemistry, Secondary Education.

Introducción

En este trabajo se exponen las características principales de la convocatoria que bajo el nombre de «Premios a la innovación educativa en Física y Química en tiempos de pandemia» se desarrolló en España entre diciembre de 2020 y junio de 2021 a instancias del Grupo Especializado en Didáctica e Historia de la Física y la Química (GEDH), común a las Reales Sociedades Españolas de Física y de Química (RSEF y RSEQ). Los objetivos que se pretenden en este artículo son:

- Presentar las características principales de la convocatoria (atendiendo a las etapas, el desarrollo, las bases, la participación, la evaluación y la repercusión), como ejemplo potencialmente de interés para otros colegas e instituciones que se planteen destacar la labor del profesorado de distintas áreas y etapas.
- Difundir los proyectos docentes desarrollados por los premiados para conocimiento de otros colegas con interés en la innovación educativa.
- Homenajear al colectivo de docentes de las distintas etapas educativas y, de forma singular, al profesorado de Física y Química de enseñanza secundaria por la labor llevada a cabo en un período singular marcado por el confinamiento causado por el COVID-19.
- Dar a conocer buenas prácticas educativas para el futuro, especialmente en modalidades de enseñanza presencial y semipresencial.

Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física y la Química



GEDH (RSEF + RSEQ) | 1986 · 2021

35 AÑOS DIFUNDIENDO LA FÍSICA Y LA QUÍMICA

Figura 1. Logotipo del Grupo Especializado en Didáctica e Historia de la Física y la Química (GEDH), común a las RSEF y RSEQ, con motivo del XXXV aniversario de su creación.

Se trata de una iniciativa enmarcada en la conmemoración del XXXV aniversario de la creación del GEDH, cuyo logotipo se recoge en la Figura 1. El lema conmemorativo adoptado, «35 años difundiendo la física y la química», ilustra el compromiso del grupo especializado con el profesorado de enseñanza secundaria de estas materias a través de iniciativas como los premios que en este artículo se abordan.

Convocatoria de Premios a la labor del profesorado de Física y Química en un tiempo singular

La pandemia que ocasionó el virus SARS-CoV-2 también conocido como COVID-19 o simplemente «coronavirus» se originó en Wuhan (República Popular China) en diciembre de 2019. Tras una rápida propagación, la Organización Mundial de la Salud reconoció la pandemia el 11 de marzo de 2021, cuando ya se habían producido cerca de 5.000 muertes y más de cien mil casos en 114 países.^[1] A partir de esa fecha, multitud de países declararon estados de confinamiento de la población de diversa índole y durante diferentes periodos de tiempo. Como indicaron Trujillo Sáez *et al.*:

La crisis sanitaria provocada por el coronavirus ha alterado la vida de millones de personas de todo el mundo, generando retos en todos los ámbitos. Y el educativo es uno de los que está sufriendo consecuencias de forma más acusada: colegios cerrados, transición de una enseñanza presencial a una digital e incertidumbre en torno a los procesos habituales del sistema educativo.^[2]

En marzo de 2020 en España, como casi todos los países, el sistema educativo tuvo que amoldarse en cuestión de días, de la enseñanza presencial habitual a un modelo telemático, en todas las etapas educativas. Posteriormente, durante el curso 2020-2021, con la experiencia adquirida y, lamentablemente, por la continuidad de la pandemia, hubo que seguir con actividades tanto telemáticas (como las desarrolladas en muchas universidades) como semipresenciales en las etapas no universitarias, adoptando medidas de seguridad (uso de mascarillas, distancia social...) que impedían la normal relación entre alumnado y profesorado.

El profesorado acometió una labor de adaptación al nuevo contexto sin precedentes en la historia reciente a fin de lograr el mayor beneficio educativo para el alumnado. No obstante, el acomodo al nuevo contexto no estuvo exento de problemas ni de incertidumbres. Así, durante el confinamiento se pusieron de manifiesto las diferentes realidades personales y familiares que conviven en las aulas, dada la escasez de medios por parte de muchas familias para seguir las clases en su modalidad digital durante la recta final del curso 2019-2020.^[3] Durante el curso 2020-2021, el cierre puntual de aulas por contagios o las consecuencias del cierre del curso anterior sin

presencialidad, fueron algunas de las muchas situaciones a las que el profesorado tuvo que hacer frente. En el caso de las materias de Física y Química, existió el problema añadido de cómo afrontar las enseñanzas prácticas inherentes al carácter de estas ciencias experimentales, entre otros muchos aspectos.^[4]

Para poner en valor la destacada labor desarrollada por el profesorado de Física y Química de enseñanzas no universitarias de todo el territorio nacional y resaltar la tarea ejemplar de los docentes de estas materias desde el inicio del confinamiento en marzo de 2020, el GEDH convocó en febrero de 2021 los «Premios a la innovación educativa en Física y Química en tiempos de pandemia». Esta convocatoria se inscribe en una dilatada tradición de premios y concursos impulsados por el GEDH. En esta línea cabe destacar el «Premio Salvador Senent» al mejor trabajo divulgativo sobre didáctica o historia de la física o de la química que se publica en las revistas *Anales de Química* o la *Revista Española de Física* y se convoca cada dos años, desde 2006. Asimismo, en 2019 el GEDH convocó el concurso escolar «Nuestra Tabla Periódica», con motivo de la celebración del «Año Internacional de la Tabla Periódica de los Elementos Químicos», concurso que sirvió como precedente del aquí abordado.^[5]

La iniciativa de los premios a la innovación educativa se discutió y se aprobó en la reunión de la Junta de Gobierno del GEDH celebrada el 14 de diciembre de 2020, en la que se planteó la necesidad de reconocer públicamente la labor del profesorado de enseñanza secundaria en el contexto de la pandemia.

Las bases de la convocatoria fueron:^[6]

- Título: Premios para Docentes a la «Innovación Educativa en Física y Química en Tiempos de Pandemia».
- Entidad organizadora: Grupo Especializado en Didáctica e Historia de la Física y la Química, común a las Reales Sociedades Españolas de Física y de Química.

1. Los premios están destinados a docentes de Física y Química en etapas no universitarias que hayan realizado acciones educativas exitosas como respuesta a los cambios impuestos por la pandemia del COVID-19 durante 2020 y 2021. Pueden presentarse de forma individual o en equipo (en este caso, debe figurar de forma clara un representante).
2. Los participantes enviarán una presentación (formato PDF con alta resolución) realizada en Power Point o similar: máximo de 10 diapositivas donde figure el título de la actividad, el centro educativo y su localidad, el profesorado que se presenta y la descripción, que puede incluir imágenes o enlaces a vídeos de las acciones desarrolladas (elaboración, evidencias de los resultados...).
3. La presentación se enviará por correo electrónico. En el mensaje debe figurar: título de la actividad, nombre y localidad del centro, nombres y apellidos

de los docentes y datos (teléfono y dirección de correo electrónico) del representante. En el asunto del mensaje debe constar: «Premios Innovación FyQ». Se enviará acuse de recibo.

4. Plazo de presentación: del 24 al 28 de mayo de 2021.
5. El jurado estará compuesto por expertos designados por la Junta de Gobierno del Grupo Especializado. Como criterios de selección de los premios se tendrán en cuenta los resultados, la innovación educativa, la implicación de profesorado y alumnado, la calidad y la originalidad (tanto del contenido del trabajo como de su presentación).
6. No podrán participar los miembros de la Junta de Gobierno del Grupo Especializado.
7. Se establecen ocho premios que conllevan diploma acreditativo y material escolar o tecnológico por valor de: 800 € (primer premio), 500 € (segundo premio), 300 € (tercer premio) y 150 € (cinco menciones de honor). Cada premio se articulará a través del pago de una o dos facturas.
8. El fallo del jurado, que será inapelable, se publicará en el Boletín Informativo del Grupo y en redes sociales de la RSEF y RSEQ. Se intentará que la entrega de premios sea presencial y circunscrita a la conmemoración del XXXV Aniversario del Grupo.
9. Los premiados que sean miembros del Grupo a través de cualquiera de sus dos sociedades (RSEF o RSEQ) antes del 28 de mayo de 2021 (lo que se hará constar en el correo remitido), recibirán una ayuda económica para asistir al acto de entrega de premios.
10. La entidad organizadora se reserva el derecho de difusión y publicación de fotografías y partes de los trabajos presentados al concurso, así como de su autoría, por lo que, al remitirse, se entiende que son aptas para ello.

Se elaboró un cartel en dos formatos, uno breve (ver Figura 2) y otro más extenso al que se podía acceder siguiendo la dirección web que se fue actualizando durante el período del concurso.^[6] La información se difundió principalmente a través de distintos portales web y redes sociales (Twitter, Facebook, LinkedIn...), de diversos organismos, como la RSEQ y la RSEF. El efecto multiplicador fue inmediato por la cantidad de interacciones y preguntas que se recibieron.



Figura 2. Cartel anunciador de los premios.



Figura 3. Localización de los centros educativos donde trabajan los premiados.

Trabajos premiados

Se recibieron candidaturas de gran nivel, lo que dificultó la labor del jurado, que estuvo integrado por los expertos en el tema: María Victoria Alcázar Montero, María Araceli Calvo Pascual, Almudena de la Fuente Fernández, José María Hernández Hernández, José Antonio Martínez Pons, Luis Moreno Martínez, Marisa Prolongo Sarria, y Gabriel Pinto Cañón, que ejerció de presidente. Para dar una idea de la amplia distribución geográfica de las candidaturas, se recoge en la Figura 3 la localización de los centros educativos del profesorado premiado.

A continuación, se ofrece un sucinto apunte biográfico sobre los docentes premiados, presentados en la Figura 4. También se facilita información sobre los proyectos propuestos por cada uno de ellos, así como enlaces para acceder a los recursos didácticos que elaboraron. Toda la información ha sido amablemente facilitada por los galardonados.

Primer premio: Iris Morey Sierra, del IES Son Rullan (Palma, Islas Baleares)

Graduada en Química por la Universitat de les Illes Balears (UIB, 2013), Máster en Ciencia e Ingeniería de los Alimentos por la Universitat Politècnica de València (UPV, 2014) y Máster en Formación del Profesorado por la UIB (2015). Funcionaria de carrera desde 2018, se declara una fiel seguidora de las metodologías activas en el aula, como la gamificación, el aprendizaje basado en juegos (ABJ) y el trabajo cooperativo. También imparte docencia de «Investigación e Innovación educativa» en el Máster en Formación del Profesorado.

El trabajo premiado, «El robo del examen final», consistió en un *escape room* (breakout) digital dividido en 15 pruebas diseñadas para repasar de forma lúdica los contenidos del currículo de la materia de Física y Química



Figura 4. Fotografías de los premiados. De izquierda a derecha y de arriba a abajo: Iris Morey, Nuria Muñoz, Patricia Fernández, Antonio José Sánchez, Ernesto Boixader, Carolina Crespo, Pablo Ortega, Juan José Sanmartín y Raquel Veira.

(nivel 4.º de la ESO - 1.º de Bachillerato). A través de una temática atractiva para el alumnado (el robo ficticio de un examen) y de acertijos variados, se consiguió recuperar su motivación entre tanta incertidumbre que supuso el confinamiento de marzo-mayo de 2020. Gracias a redes sociales como Instagram y Twitter, más de 7.000 alumnos y docentes pudieron participar. Para ampliar la información, visítese: <https://bit.ly/3hmqCca>

Segundo premio: Nuria Muñoz Molina y Patricia Fernández Galindo, del Colegio La Inmaculada (Algeciras, Cádiz)

Nuria Muñoz es Licenciada en Ciencias Químicas por la Universidad de Granada (1993) y Máster en Formación del Profesorado por la misma (1994). Además de su labor docente, se ha involucrado especialmente en la divulgación científica, con diversos premios de ámbito nacional e internacional. Es socia fundadora y vicepresidenta de la Asociación Amigos de la Ciencia, Diverciencia, y embajadora de la red europea de profesores STEM, *Science on Stage*. Patricia Fernández es estudiante del Grado en Química en la Universidad de Granada. Se ha involucrado especialmente en la divulgación científica, con diversos premios de ámbito nacional e internacional. Es miembro de la Asociación de Amigos de la Ciencia, Diverciencia.

El trabajo premiado, «Enseñar Física y Química, en tiempos de pandemia, fuera del laboratorio escolar», consta de dos partes. La primera de ellas consistió en

una colección de retos basados en hitos de la historia de la química que fueron elaborados de forma conjunta por ambas autoras. Estos retos se enviaron al alumnado de 4.º de la ESO y 1.º de Bachillerato y se publicaron en redes sociales durante el período de confinamiento del curso 2019-2020. La segunda parte, desarrollada por Nuria Muñoz durante el curso 2020-2021, consistió en la elaboración de una serie de trabajos experimentales relacionados con situaciones cotidianas del alumnado de 3.º de la ESO. Las dos partes fueron llevadas a cabo en las cocinas de los estudiantes, con materiales caseros y de forma autónoma. Más información está disponible en: <https://bit.ly/3x2L5cG>

Tercer premio: Antonio José Sánchez Arroyo, del Colegio Virgen de Atocha-Fundación Educativa Santo Domingo (Madrid)

Licenciado en Ciencias Químicas (2013), Máster en Ciencia y Tecnología Química (2014) y Doctor en Química Orgánica por la Universidad Complutense de Madrid (2019), obtuvo también el Máster en Formación del Profesorado por la Universidad Isabel I de Castilla (2018). Su actividad investigadora ha estado centrada en la producción fotosensibilizada de oxígeno singlete y su aplicación en síntesis química y terapia fotodinámica. Ha participado frecuentemente en actividades de divulgación en la Semana de la Ciencia, la Noche Europea de los Investigadores, la Feria Madrid por la Ciencia y el curso «Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad», así como en la organización de las Olimpiadas de Química. Ha publicado artículos en revistas como el *Journal of Chemical Education*.

El trabajo premiado, «¿No podríamos cerrar un rato las ventanas? Enseñanza STEM y aprendizaje por investigación guiada de problemas» tiene como idea central la ventilación de las aulas que ha sido necesaria en el curso 2020-2021. Por medio de una investigación guiada se analizó con alumnos de 1.º de Bachillerato cómo aumenta la concentración de dióxido de carbono en una clase que tuviese la puerta y las ventanas cerradas, dependiendo del tamaño de la clase y del número de alumnos en su interior. De esa manera se pudo cuantificar cuál sería el máximo tiempo que podría pasar hasta superarse el límite de seguridad. El proyecto se enmarca dentro de la dinámica STEM, que busca la aplicación transversal de conocimientos científicos, tecnológicos y matemáticos. Puede consultarse la información de la actividad en: <https://bit.ly/3jp1Lap>

Mención de honor: Ernesto Boixader Gil, de la Fundación Flors (Vila-Real, Castellón)

Es licenciado en Ciencias Químicas por la Universitat de València (1988). «Aprender es divertido, aburrir en clases de Física y Química es un crimen», ese es su «mantra». Después de 2 años en la industria cerámica descubrió que su verdadera vocación era la docencia, y tras casi 30

años decidió difundir sus experiencias en las redes sociales, recibiendo una calurosa acogida. El Instituto Nacional de Tecnologías Educativas y Formación del Profesorado (INTEF) publicó su proyecto «Viajer@s del Tiempo» en la categoría Experiencias Educativas Inspiradoras, y también publicó en la revista *Educación 3.0*. En este curso ha realizado la formación de docentes de distintos centros en lo que denomina la clase diNvertida (una metodología basada en la gamificación y *flipped classroom*).

El trabajo premiado, «CSI Flors. Aprender es divertido» fue puesto en práctica durante el curso 2020-2021, en el que el alumnado ha asistido en días alternos a clase, con el objetivo de que cada cual aprendiese y avanzase a su ritmo. Más información: <https://bit.ly/3hqJHKy> y <https://www.eboixader.com/>

Mención de honor: Carolina Crespo Migoya, del IES Barrio Loranca (Fuenlabrada, Madrid)

Ingeniera Industrial por la Universidad de Cantabria (2007) y Máster en Ingeniería Avanzada de Fabricación por la Universidad Nacional de Educación a Distancia (2013), es profesora en secciones bilingües de inglés y francés, involucrada en el desarrollo de proyectos y actividades STEAM en el aula, así como actividades CLIL en el seno de materias de ciencias y tecnología. Embajadora Scientix desde 2018, ha participado en eventos relacionados con la divulgación de STEAM.

El trabajo premiado, «Del laboratorio al aula virtual», ha consistido en la adaptación de las experiencias de laboratorio presenciales durante el confinamiento del curso 2019-2020 al aula virtual. Dada la importancia de la experimentación en una asignatura como Física y Química en 2.º de la ESO, y teniendo en cuenta que se trata de la primera aproximación de los alumnos a esta materia, hubo que adaptar las experiencias reales efectuadas en el laboratorio del Instituto al aula virtual. Los alumnos pudieron realizar sencillas experiencias con materiales disponibles en cualquier casa a partir de la teoría y las instrucciones reflejadas en el aula virtual, y posteriormente compartir mediante fotos, documentos y/o vídeos el resultado de sus experiencias, así como sus reflexiones sobre la realización de las prácticas caseras. Más información sobre esta iniciativa en: <https://bit.ly/3h7yjnT>

Mención de honor: Pablo Ortega Rodríguez, del IES Villa de Mijas (Mijas, Málaga)

Licenciado en Química por la Universidad de Málaga (2004) y Certificado de Aptitud Pedagógica (CAP) por la Universidad de Granada (2005), es profesor de Física y Química desde el año 2006. Es un firme defensor del juego como herramienta de aprendizaje, siendo esta la base desde la que pone en práctica diferentes metodologías y estrategias educativas, especialmente el Aprendizaje Basado en Juegos (ABJ). Le encanta generar experiencias lúdicas

inmersivas como el *Breakout Edu* para sus alumnos y utiliza distintas herramientas digitales con las que potenciar la estética y dotarlas de interactividad. Actualmente compagina su labor docente con el diseño de juegos de mesa educativos y, además, comparte sus experiencias y aprende de las de sus compañeros a través de las redes sociales.

El trabajo premiado, «Mi laboratorio sostenible. Una propuesta para 2.º la de ESO», emplea el Aprendizaje Basado en Proyectos (ABP) para el diseño y fabricación de distintos instrumentos de laboratorio, simuladores de modelos teóricos y dispositivos en los que se evidencien principios fundamentales de la física y la química, entre otros, empleando para ello materiales reciclados y poniendo al alumnado en el centro de su aprendizaje. Mediante una serie de proyectos vinculados por este hilo conductor se ha podido continuar con la realización de experiencias prácticas en clase, a pesar de las restricciones sanitarias a causa de la COVID-19, evidenciado además una mayor participación del alumnado y la adquisición de aprendizajes significativos. Más información sobre el proyecto en: <https://bit.ly/2SB17LU>

Mención de honor: Juan José Sanmartín Rodríguez, del Colegio Plurilingüe Vila do Areteiro (O Carballiño, Ourense)

Licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de Santiago de Compostela (1998) y Máster en Formación del Profesorado por la misma Universidad (1999), es también Técnico Superior en Prevención de Riesgos Laborales. Ha participado en Congresos nacionales e internacionales exponiendo la metodología que aplica en su clase, Flipped Classroom o Aula Invertida. Ha publicado artículos en prensa y revistas especializadas sobre dicha metodología en matemáticas, física y química, siendo los últimos relativos a su adaptación a la pandemia. Durante este período ha realizado diferentes *webinars* a nivel internacional para explicar su forma de trabajar a otros docentes, exponiendo las herramientas utilizadas en la docencia y evaluación. También ha participado como ponente en formación de profesores iberoamericanos que regresan a la presencialidad. Es coordinador desde 2011 de las Olimpiadas Gallegas de Química como miembro de la junta directiva conjunta del Colegio y la Asociación Gallega de Químicos.

El trabajo premiado, «Implantación de *Flipped Learning* en Física y Química», se centra en la explicación de la utilización de la metodología *Flipped Learning*, que ha implantado en su aula desde 2014 y su adaptación a la pandemia. Dicha metodología permitió en el momento del confinamiento continuar de una manera «normal» la docencia a través de las videoconferencias ya que el alumnado estaba acostumbrado al uso de las herramientas virtuales de las que se hacía uso en el aula previo al confinamiento. Cabe destacar que la web de recursos que tiene elaborada ha sido subvencionada por el Ministerio de Educación y que los recursos que en ella aparecen han sido utilizados por miles de docentes. Más información en: <https://bit.ly/3hnKycv>

Mención de honor: Raquel Veira Díaz, del Centro Público Integrado Plurilingüe O Cruce (Cerdeza, A Coruña)

Licenciada en Ciencias Físicas por la Universidad de Santiago de Compostela (2001), DEA (2003) y CAP (2005), es profesora de física y química en centros públicos desde 2013 y funcionaria de carrera de la Xunta de Galicia desde 2017. En la actualidad es, además, jefa de estudios de secundaria y coordinadora del Club de Ciencia del centro en el que tiene destino. Ha participado en múltiples actividades y proyectos relacionados con STEM.

El trabajo premiado, «Ciencia en casa», consistió en la propuesta desarrollada entre marzo y mayo de 2020 de un experimento diario para realizar en casa en familia, difundidos a través de las redes sociales del Club de Ciencia. Posteriormente, los experimentos se recopilaron en un libro que los clasifica por dificultad y que se puede descargar en gallego y castellano. Toda la información se encuentra disponible en: <https://bit.ly/3hiWObI>









Conclusiones

Los proyectos docentes premiados son una clara muestra de la creatividad del profesorado de Física y Química de enseñanza secundaria, materializada en la diversidad de aproximaciones metodológicas empleadas, que incluyen el Aprendizaje Basado en Juegos (ABJ), el Aprendizaje Basado en Proyectos (ABP), las prácticas experimentales, el uso didáctico de la historia de la ciencia, la investigación guiada o la clase invertida, tal y como ilustra la Tabla 1.

Como puede comprobarse, cinco de los ocho proyectos docentes premiados han promovido una aproximación experimental a la enseñanza de la ciencia, algo fundamental en las materias de Física y Química; lo que adquiere un especial significado al inscribirse en un periodo en el que la presencialidad en las aulas y las posibilidades de docencia en el laboratorio se vieron reducidas hasta el mínimo. Es por ello que estos proyectos cobran un valor pedagógico singular al ofrecer experiencias didácticas reales basadas en productos y materiales cotidianos que pueden ser realizadas por otros docentes. También cabe destacar que si bien todos los proyectos docentes hicieron uso de las Tecnologías de la Información y la Comunicación como medio para la presentación o la realización de las actividades por parte del alumnado, tres de los ocho proyectos premiados utilizaron herramientas enteramente digitales para la enseñanza de la física y la química, combinando en muchas ocasiones la dimensión didáctica con la dimensión lúdica y motivacional, como bien ejemplifica el proyecto ganador.

Todos los aspectos anteriores ilustran la variedad de metodologías y recursos que conviven en nuestras aulas. Su disponibilidad para todo el profesorado en los enlaces facilitados pone de manifiesto otro de los objetivos del GEDH y de los premios convocados: el papel que pueden desempeñar instituciones como la Real Sociedad Española de Física y la Real Sociedad Española de Química para

Tabla 1. Aproximaciones metodológicas e información adicional de los proyectos docentes premiados.

Proyecto docente	Aproximación metodológica	Información adicional
El robo del examen final	Aprendizaje basado en el Juego mediante <i>Escape room</i>	
Enseñar Física y Química, en tiempos de pandemia, fuera del laboratorio escolar	Aprendizaje experimental. Aprendizaje basado en el uso didáctico de la historia de la ciencia	
¿No podríamos cerrar un rato las ventanas?	Aprendizaje basado en investigación guiada para la resolución de problemas	
CSI Flors. Aprender es divertido	Aprendizaje basado en el juego mediante pruebas y desafíos	
Del laboratorio al aula virtual	Aprendizaje experimental	
Mi laboratorio sostenible	Aprendizaje basado en proyectos	
Implantación de <i>Flipped Learning</i> en Física y Química	Aprendizaje por <i>Flipped Learning</i> (aula invertida)	
Ciencia en casa	Aprendizaje experimental	

dar voz a la gran labor realizada por el profesorado de enseñanzas no universitarias, línea de actuación que puede ser de especial interés para otras instituciones y sociedades científicas interesadas en apoyar y reconocer públicamente la labor del profesorado. Un profesorado que ha acometido –sin tiempo para la adaptación, de forma extraordinaria y en ocasiones sin los recursos necesarios–, una sobresaliente labor. Aunque la pandemia de COVID-19 ha supuesto un capítulo de nuestra historia que no nos hubiese gustado vivir, este ha subrayado la importancia central de la ciencia para las sociedades contemporáneas. En este marco, la labor de alfabetización científica ciudadana emprendida por los docentes de ciencias de enseñanza secundaria se revela todavía más fundamental para el beneficio de la ciudadanía y de la propia ciencia, que encuentra en los y las jóvenes estudiantes de la ESO y de Bachillerato su futuro. Los «Premios a la innovación educativa en Física y Química en tiempos de pandemia» del GEDH visibilizan el gran esfuerzo del profesorado en tiempos especialmente convulsos, al que se desea homenajear públicamente. Todavía son muchas las incertidumbres que ofrece el curso 2021-2022 y no menos los retos que afrontará la educación científica en las próximas décadas. Los proyectos docentes desgranados en las páginas anteriores constituyen magníficos ejemplos de buen hacer que podrán seguir inspirando en la ansiada «nueva normalidad».

Agradecimientos

Se agradece la colaboración de los miembros del jurado (citados en el texto) y del profesorado que participó en

la iniciativa. También se agradecen las ayudas recibidas por parte de las Reales Sociedades Españolas de Física y de Química, de la Universidad Politécnica de Madrid (Proyecto de innovación educativa IE1920.0502 «Fomento del aprendizaje STEAM basado en la indagación») y de la Obra Social «La Caixa» (proyecto divulgativo «La ciencia y la tecnología al alcance de tod@s»).

Bibliografía

- [1] Organización Mundial de la Salud (OMS), «Alocución de apertura del Director General de la OMS en la rueda de prensa sobre la COVID-19 celebrada el 11 de marzo de 2020», 11 de marzo de 2020, <https://bit.ly/3Ac06Li> (visitada el 04/07/2021).
- [2] F. Trujillo-Sáez, M. Fernández-Navas, M. Montes-Rodríguez, A. Segura-Robles, F. J. Alaminos-Romero, A. Y. Postigo-Fuentes. *Panorama de la educación en España tras la pandemia de COVID-19: La opinión de la comunidad educativa*. FAD, Madrid, 2020. Accesible en <https://bit.ly/2UftcE4> (visitada el 04/07/2021).
- [3] P. Gutiérrez del Álamo, «Reflexiones de la nueva era. Entrevista a Javier Murillo», 14 de abril de 2020, <https://n9.cl/mgrsn> (visitada el 04/07/2021).
- [4] A. Pérez Vicente, «La enseñanza de la física y la química en tiempos de pandemia», *An. Quím.* **2021** 117(2), 150-155.
- [5] G. Pinto, «El concurso escolar “Nuestra Tabla Periódica”: Una iniciativa para fomentar la motivación de profesorado y alumnado en áreas STEAM», *An. Quím.* **2019** 115(4), 332-343.
- [6] «Premios a la innovación educativa en Física y Química en tiempos de pandemia», <https://bit.ly/3jiHVvj> (visitada el 04/07/2021).



ENSEÑANZA
DE LA QUÍMICA



F. Rojas Melgarejo

Universidad de Murcia
Grupo de Química de Carbohidratos,
Polímeros y Aditivos Industriales E047-01
C-e: projasme@um.es

IES Dos Mares. San Pedro del Pinatar
(Murcia)
C-e: francisco.rojas@murciaeduca.es

Recibido: 23/12/2020
Aceptado: 29/06/2021

ORCID: 0000-0002-9659-4354

<https://www.melocoton.es> Un dominio seguro de nuestra huerta

Francisco Rojas Melgarejo

Resumen: Estudiamos la maduración del melocotón y la evolución de la cantidad y características de su pectina. Utilizamos melocotones sanos en avanzado estado de madurez y jibiones de sepia, para obtener dulce de melocotón que conserva el sabor y aroma característicos de la fruta empleada. Reutilizamos y damos valor al excedente de producción y un residuo de dos empresas ubicadas en Cieza (Murcia). Sólo podemos encontrar unas pocas recetas caseras para elaborar este postre, todas utilizando una alta cantidad extra de agentes gelificantes. No encontraremos dulce de melocotón en tiendas ni en supermercados.

Palabras clave: Melocotón, pectina, pectina metilesterasa, bajo metoxilo, puentes de calcio.

Abstract: We study the ripening of the peach and the evolution of the quantity and characteristics of its pectin. We use healthy peaches at an advanced stage of ripeness and cuttlefish cutlets, to obtain peach candy that preserves the characteristic flavour and fragrancy of the fruit used. We reuse and give value to the surplus production and a residue from two companies located in Cieza (Murcia). We can only find a few homemade recipes to elaborate this dessert, all of them using a high amount of extra gelling agents. We will not find peach candy in shops or supermarkets.

Keywords: Peach, pectin, pectin methylesterase, low-methoxyl, calcium bridges.

Introducción

En este trabajo utilizaremos una fruta de temporada de nuestra huerta, el melocotón, estudiaremos uno de sus hidratos de carbono constituyentes, las pectinas, y sus modificaciones durante el proceso natural de maduración, para establecer unas condiciones óptimas de reacción que permitan el procesado de esta fruta, la gelificación de su pectina y obtener un producto final completamente natural, saludable, de fácil conservación y, en este caso, novedoso entre los postres habituales propios de la dieta mediterránea.

Las pectinas, que sirven como cemento en las paredes celulares de todos los tejidos de las plantas, consisten, principalmente, en ésteres metilados del ácido poligalacturónico, y están formadas por cadenas de 300 a 1.000 unidades de ácido D-galacturónico (Figura 1) conectadas por enlaces $\alpha(1 \rightarrow 4)$.^[1,2,3,4] El grado de esterificación^[1,3] afecta a las propiedades gelificantes de la pectina. La pectina es un ingrediente importante para conservas de frutas, jaleas, mermeladas y en nuestro caso en la elaboración del dulce

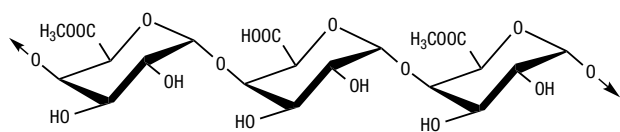


Figura 1. Cadena de pectina.

de melocotón. Sin embargo, el melocotón presenta un bajo contenido de pectina (0,1-0,9% del peso seco)^[5] lo que imposibilita o dificulta la formación de geles consistentes sin la adición de agentes gelificantes externos.

Fundamentación didáctica y pedagógica

Este trabajo ha sido realizado durante el curso escolar 2019-2020 por alumnos y alumnas de 4.º de la ESO que han dedicado tres horas a la semana correspondientes a la asignatura optativa de Cultura Científica para conocer las labores propias y habituales del trabajo científico tanto en el laboratorio como el necesario para la búsqueda y selección de la información requerida. Tiene su base en los conocimientos adquiridos y resultados obtenidos en un trabajo anterior,^[6] con un método de trabajo que venimos desarrollando con estudiantes de nuestro centro en los últimos años^[6,7] y se enmarca en las actividades propuestas por el departamento de Física y Química de nuestro centro para atender al alumnado de altas capacidades y alto rendimiento escolar dentro del programa experimental de centros de especialización en la mejora de la promoción del talento,^[8] para el que fue seleccionado durante el curso escolar (2018-2019). Sin embargo, la metodología

empleada por nuestro departamento para atender a este alumnado parte, en su origen, de una estrecha colaboración con nuestro Departamento de Orientación por lo que su carácter inclusivo, de propuestas abiertas, permite que todo el alumnado que cursa esta optativa pueda acceder al trabajo que realizamos, siendo, en la medida de sus posibilidades, protagonistas de una parte de los resultados obtenidos.

En este trabajo ponemos el acento sobre la importancia de nuestra huerta como patrimonio cultural y natural de nuestra tierra y la importancia del aprovechamiento sostenible de todos sus recursos, así como en la reutilización de residuos generados en otros sectores de la industria alimentaria. El propósito es acercar a nuestro alumnado, con edades comprendidas entre quince y dieciséis años, toda la tradición atesorada en nuestra tierra para la elaboración de un producto novedoso (dulce de melocotón) a partir de un excedente de una fruta típica y apreciada de la geografía murciana y de un residuo de una empresa alimentaria, también local. Profundizaremos en la base química que explica los pasos seguidos, las propiedades y funciones de cada componente añadido y de los productos de reacción obtenidos durante las reacciones químicas realizadas en cada una de las etapas de la elaboración de este producto artesanal, así como los beneficios que para la salud en humanos conlleva su consumo. Todo ello de una manera sencilla, segura, económica y reproducible.

Materiales

Melocotones (*prunus pérsica*) de la variedad catherina, fueron recogidos directamente de una huerta en el paraje de El Acho de la localidad de Cieza en la comarca natural de la Vega Alta del Segura (Murcia), caparazones calizos de jibias (jibiones o sepiones), fueron suministrados por la empresa New Concisa, S. L., ubicada en Cieza (Murcia), CaCl_2 fue suministrado por Panreac Química S.A.U. y azúcar blanco de Pfeifer & Langen GmbH & Co. KG. Exprimidor BRAUN citromatic MPZ-2, batidora de vaso UFESA BS4798, medidor de pH Checker®Plus HI98100, con electrodo de pH HI1271, placa de inducción portátil BRANDT T11FSOFT (2000 watos), waterproof digital multi thermometer TP3001 y cronómetro de laboratorio KKF002.

Metodología

El melocotón de la variedad catherina es una fruta de temporada (junio-julio)^[9] que presenta una pequeña cantidad de pectina con alto contenido de metoxilo (PHM, $\text{GE} \geq 50\%$)^[2,3,4] en comparación con otras frutas, por lo que se requeriría la adición de una cantidad extra de pectina comercial u otros agentes gelificantes para lograr el grado de gelificación deseado,^[1,3] un medio ácido (2,8-3,2),^[1,4,10,11] y entre el 80-100% en masa de sacarosa^[2,3,4] con respecto a la masa de fruta utilizada. Todo ello favorecerá las interacciones intercadena^[3] mediante la formación de puentes de hidrógeno

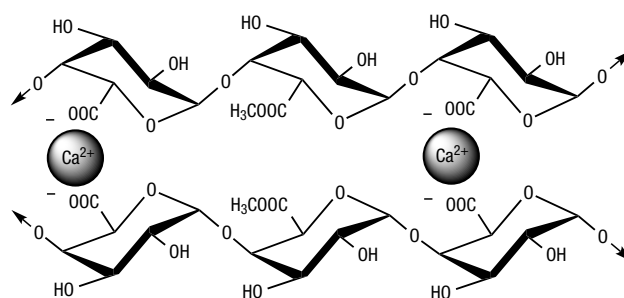


Figura 2. Puentes de calcio entre cadenas de pectina de bajo metoxilo (PBM, $\text{GE} < 50\%$).

y de intensas interacciones hidrofóbicas.^[1,4,5] Sin embargo, en frutas con pectina de bajo contenido de metoxilo (PBM), los iones calcio (Ca^{2+}) constituyen puentes de calcio^[1,2,5,12] (Figura 2) entre dos grupos funcionales de ácido carboxílico pertenecientes a restos de ácido D-galacturónico^[2] próximos para conseguir la gelificación del producto, siendo necesario un pH de 2,5-6,5^[1,10,11] para garantizar que los grupos carboxilos se encuentren en forma ionizada, lo que se conseguirá con la adición de la cantidad necesaria de citrato de calcio ($\text{Ca}_3[\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7]_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$).^[13,14] No se requerirá utilizar una cantidad elevada de sacarosa y se añadirá sólo la necesaria para que tenga lugar el proceso de caramelización. Se utilizó azúcar blanco para no aportar una coloración extra a nuestro producto final.

El proceso de caramelización,^[15] liberará al medio de reacción protones^[16] que provocarán la disminución del pH del medio de reacción. Este hecho, que es beneficioso para la obtención de geles consistentes a partir de PHM pues mantiene a los grupos carboxilo en forma no ionizada, en nuestro caso resulta contraproducente. La presencia del anión citrato en el medio de reacción favorecerá la captura de los protones liberados,^{17,18,19} mantendrá el pH de trabajo en un rango adecuado a la vez que liberará la cantidad necesaria de iones calcio para conseguir la correcta gelificación de nuestra PBM. Por ambos mecanismos, dependiendo de la fruta elegida y del tipo de pectina presente, se conseguirá obtener geles de pectina con un grado de consistencia similar.^[1,5,20]

Preparación de la materia prima

Melocotones

La pequeña cantidad de PHM que presenta el melocotón⁵ desaconseja seguir el procedimiento habitual para conseguir su gelificación. Sin embargo, una cantidad similar de PBM podría dar lugar a geles con un grado de consistencia adecuado en presencia de iones calcio, debido a la naturaleza cooperativa de las interacciones Ca^{2+} /PBM.^[1,11,12] Para conseguirlo, sería necesaria la utilización de la enzima pectina metilesterasa (PME, EC 3.1.1.11) que hidroliza los grupos metilo que esterifican las unidades de ácido D-galacturónico de cadenas de PHM y la transforman en

cadena de PBM.^[1,11,12] Durante el proceso de maduración del fruto, la actuación de glicosidasas y PME provocará la solubilización y desesterificación de las cadenas de PHM, dando lugar a la liberación de metanol y la transformación de las cadenas de PHM en cadenas de PBM, sobre las que actuarán endopoligalacturonas (EC 3.2.1.15, endoPG) y exopoligalacturonas (EC 3.2.1.67, exoPG), provocando su hidrólisis y siendo responsable del reblandecimiento del fruto durante su senescencia.^[5,12] El reto es por lo tanto recoger piezas de fruta, pasadas varias semanas después de su campaña natural de recolección para garantizar un estado de madurez óptimo a la vez que su integridad y conservación es la adecuada para ser utilizada en la elaboración de un producto alimenticio. Este estado óptimo de madurez vendrá determinado por el momento en que ya han actuado las enzimas glicosidasas y PME, que permiten obtener las cadenas de PBM necesarias, pero aún no han actuado las enzimas endoPG y exoPG que hidrolizan dichas cadenas de PBM y dan lugar al reblandecimiento del fruto.

Los melocotones utilizados para este trabajo se recogieron el día 3 de julio de 2019 (Figura 3, izquierda), una semana posterior a la campaña de recolección de esta variedad de melocotón, para, evitar entorpecer en las labores habituales de su recolección y además seleccionar y recoger piezas de melocotón en perfecto estado de conservación, pues aún estaban en los árboles, pero con el grado de madurez avanzado que es requerido para el desarrollo de este trabajo y que verificamos a partir del color, aroma, tacto y aspecto que presentan. En el laboratorio de química de nuestro centro, se separaron los melocotones que se encontraban en peor estado de conservación dejando el resto en una caja a temperatura ambiente (27°C) para conseguir un mayor grado de madurez en el melocotón a utilizar.^[9] Al día siguiente (aproximadamente 22-24 horas a temperatura ambiente), se volvieron a seleccionar los melocotones a utilizar en función de su buen estado y grado de madurez, y se guardaron en el frigorífico a una temperatura de 5°C para su correcta conservación hasta el día siguiente en que fueron utilizados.

Caparazones calizos: jibiones

También el día 3 de julio de 2019, un número de 20-30 jibiones obtenidos de la limpieza de jibias recién descongela-das para su procesado, fueron suministrados por la empresa New Concisa, S. L., (Figura 3, derecha). Para facilitar su transporte y buena conservación, previamente habían sido refrigeradas e introducidas en una caja de polietileno expandido. En nuestro centro, los jibiones fueron guardados en el frigorífico a una temperatura de 5°C. Al día siguiente, se lavaron con abundante agua del grifo y se sometieron a cocción durante 15 minutos para reducir el olor característico de este tipo de residuo. Estos jibiones son un residuo habitual en la empresa New Concisa, S. L. por lo que se hace necesario gestionar su eliminación, a través de una empresa especializada con el consiguiente



Figura 3. Melocotones maduros variedad catherina (izquierda). Caparazones calizos, jibiones o sepiones (derecha).

coste económico para la empresa (Dato suministrado por New Concisa, S. L.). Su alta composición en carbonato de calcio (CaCO_3 , 60%) permite obtener una media de 24 g de calcio por cada 100 g de jibión,^[21] por lo que lo utilizaremos como fuente de iones calcio (Ca^{2+}) imprescindibles para la gelificación de PBM. Esto supondría un ahorro económico para la empresa, que evitaría los gastos de eliminación de un residuo generado, y podría ser una fuente de ingresos si se vendiera como materia prima a empresas externas interesadas en la obtención de iones calcio para la elaboración del producto que presentamos en este proyecto o bien para otros fines.

Obtención de ácido cítrico

Varios limones de nuestra huerta (6-8 limones) recién cortados, fueron lavados con abundante agua del grifo y utilizados sin almacenado previo para ser exprimidos con un exprimidor BRAUN citromatic MPZ-2 y obtener 530 mL de jugo de limón. El jugo fue convenientemente colado para eliminar restos de pulpa, granillos y otra materia sólida que pudiera contener y que no pueden estar presentes en nuestro producto final. El pH fue medido con un medidor de pH Checker®Plus HI98100, previamente calibrado mediante calibración automática en dos puntos con disoluciones tampón de pH 4,01 y 7,01, obteniendo un valor de pH 2,33 para nuestra disolución. La acidez del ácido cítrico favorecerá la reacción con el carbonato de calcio de los jibiones y la extracción de iones calcio en forma de citrato de calcio.

Preparación de citrato de calcio

Varios jibiones con una longitud de $21,1 \pm 0,6$ cm, una anchura de $8,3 \pm 0,4$ cm y una masa de $75,0 \pm 9,9$ g, se utilizaron como fuente de iones calcio (Ca^{2+}). Cada pieza se cortó en trozos más pequeños y se introdujeron en un cristallizador de vidrio de 1000 mL que contenía un volumen conveniente de jugo de limón recién exprimido (pH = 2,33), comprobando que todos los trozos de jibión quedaron totalmente sumergidos. Una fracción de 100 ml de jugo de limón exprimido se separó del resto y se dejó como blanco, sin contacto con los trozos de jibión, para evaluar la evolución del pH de una segunda fracción que sí estuvo en contacto con los trozos de jibión. La formación de

espuma blanca debido a la liberación de CO_2 del medio de reacción indicó que la reacción del ácido cítrico con el carbonato de calcio presente en los trozos de jibiones se produjo de forma adecuada con la consiguiente formación de citrato de calcio. La reacción se dejó proceder durante 30 minutos a temperatura ambiente (27°C), tras lo cual se almacenó en el frigorífico a una temperatura de 5°C hasta el próximo día, junto con la fracción blanco de jugo de limón. Después de 24 horas de almacenado, ambas fracciones se sacaron del frigorífico y se dejaron atemperar. La medida del pH dio un valor de 2,76 para la fracción blanco y de 4,76 para la fracción guardada con los trozos de jibión. El aumento de pH de esta segunda fracción es debido a la desaparición del ácido cítrico y su conversión a citrato de calcio, siendo este valor de pH una medida del alto grado de conversión obtenido.^[22] Los trozos de jibión se sacaron del cristizador y el jugo de limón se coló mediante un colador con malla de acero inoxidable para obtener jugo de limón con abundante polvo blanco finamente dividido en suspensión y precipitado debido a la relativa baja solubilidad ($0,95 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$, a 25°C)^[17] del citrato de calcio formado. A esta última fracción recogida se añadió los 100 mL de la fracción blanco, que pudo ser reutilizada y por lo que el pH final de la suspensión de citrato de calcio fue de 4,23 sin que esto suponga una merma significativa en la cantidad de citrato de calcio añadida al medio de reacción que pueda afectar negativamente al proceso de gelificación de nuestra fruta. La fracción se dejó a temperatura ambiente (27°C) hasta que fue nuevamente utilizada unos minutos después para la realización de la siguiente etapa de nuestro trabajo.

Homogeneización de la fruta

Con la ayuda de un cuchillo, los melocotones seleccionados se pelaron y cortaron en pequeños trozos evitando que restos leñosos del hueso o de fibra que suelen estar en contacto con éste acabaran en la masa de melocotón a procesar, para evitar que aparezcan irregularidades a la vista y al paladar en el producto final procesado. La masa total de melocotón a procesar fue de 1.360 g que se trituraron en una batidora de vaso UFESA BS4798 hasta lograr su completa homogeneización, quedando finamente troceada y con un agradable color anaranjado. Para ello se añadió la fruta en trozos pequeños, poco a poco, con intervalos de intensa agitación entre adición y adición. Finalmente, se añadió 200 mL de suspensión de citrato de calcio ($\text{pH} = 4,23$) previamente agitada para conseguir la mezcla completa del medio. El homogeneizado de melocotón y la suspensión de citrato de calcio se agitaron brevemente en la batidora para facilitar la mezcla de ambos medios. La jarra de la batidora con la masa de fruta homogeneizada se almacenó en el frigorífico a una temperatura de 5°C , hasta que fue nuevamente utilizada. La baja temperatura y el citrato de calcio presente actuarán de conservantes (E 333 iii)^[19] durante todo este tiempo de almacenado.

Gelificación de la pectina

Tras un fin de semana de almacenado en el frigorífico (72 horas, aproximadamente), la masa de fruta se trasvasó a un recipiente donde tendría lugar la gelificación de la pectina de melocotón. No se observó aumento en la coloración de la masa de fruta después del tiempo de almacenado. La masa de fruta homogeneizada se puso a calentar lentamente a una temperatura próxima a los 70°C . Durante el calentamiento se añadió 136 g de sacarosa y se mezcló vigorosamente hasta conseguir una mezcla homogénea. Después de 20 minutos de cocción se aumentó gradualmente la temperatura hasta $70\text{-}100^\circ\text{C}$,^[3] se añadió otros 136 g de sacarosa y se agitó durante otros 20 minutos. El tiempo de cocción de esta primera fase fue de 40 minutos, asegurando una temperatura de 100°C durante los últimos 5 minutos. La masa de sacarosa añadida (272 g) corresponde a aproximadamente un 20%^[11,23] de la masa de fruta empleada (1.360 g). A esta temperatura de trabajo se garantiza que la caramelización de sacarosa no tiene lugar ($T > 120^\circ\text{C}$).^[16] Después de 5 minutos de reposo a temperatura ambiente (29°C) se volvió a calentar durante otros 40 minutos a una temperatura de $100\text{-}110^\circ\text{C}$, evitando que un intenso burbujeo del medio de cocción produjera derrames sobre la placa de calentamiento. La presencia del citrato de calcio ($\text{pH} = 4,23$) a temperaturas próximas a los 100°C , provocará la correcta gelificación de las cadenas de PBM debido a una lenta liberación de los iones calcio^[13] que evitará la sinéresis de las cadenas de PBM,^[10,11,12] aunque para ello será necesario un mayor tiempo de gelificación. El valor de pH que aporta al medio de reacción, facilitará la inversión de sacarosa^[15,24] dando lugar a cantidades equimoleculares de glucosa y fructosa, que favorecerá la no cristalización de sacarosa^[15] y mejorará la palatabilidad de nuestro producto final. La inversión de sacarosa se inhibe por encima de $\text{pH } 6,0$ con un $\text{pH}_{\text{óptimo}}$ para su estabilidad entre $8,0\text{-}8,5$.^[25,26] Además se podrá iniciar la caramelización^[15] de fructosa que dará lugar a las sustancias responsables del aroma, sabor y color característicos de este proceso,^[15,16] similares, en algunos casos, a los obtenidos en la reacción de Maillard,^[15] pero evitando, gracias a las bajas temperaturas empleadas, que esta tenga lugar hasta etapas muy avanzadas de la reacción que podrían dar lugar a productos de reacción no saludables.^[15,16] Mantendremos el poder edulcorante e higroscópico de sacarosa gracias a la fructosa formada.^[15] El poder antioxidante de los productos de la caramelización de fructosa ayudará a la conservación de nuestro producto final elaborado.^[15] Las bajas temperaturas de reacción empleadas impedirán la descomposición del citrato de calcio ($T_d = 100\text{-}120^\circ\text{C}$),^[17,22] lo que garantiza la conservación de las mismas condiciones de reacción durante todo el tiempo de procesado de nuestro producto. El producto final se dejó enfriar durante 5 minutos a temperatura ambiente (29°C), se trasvasó a un recipiente de polipropileno y se guardó en el frigorífico a una temperatura de 5°C hasta que estuvo listo para ser servido (Esquema 1). Si el grado de consistencia alcanzado no es el deseado, es po-



Esquema 1. Diagrama de flujo del dulce de melocotón.

sible corregir la formulación inicial añadiendo un volumen adicional de suspensión o disolución saturada de citrato de calcio y calentando a 100°C durante períodos de 20 minutos hasta alcanzar el grado de consistencia deseado.

Una pequeña fracción del producto final resultante en el apartado anterior, se ensayó para comprobar el efecto de una mayor cantidad de sacarosa sobre la consistencia y propiedades organolépticas del gel formado. A 183 g de producto se añadió 37 g de sacarosa, lo que supone un 20% de sacarosa extra. Se calentó durante otros treinta minutos a una temperatura de 100°C. Finalmente, se dejó enfriar a temperatura ambiente durante 5-10 minutos, se trasvasó a un envase de polipropileno y se guardó en el frigorífico a 5°C hasta nuevo uso ($m = 109$ g). El empleo de una cantidad extra de sacarosa será adecuado cuando el grado de conversión de PHM a PBM en el melocotón utilizado no ha sido suficiente, pues favorecerá las interacciones hidrofóbicas entre las cadenas de PHM aún presentes.^[6] Sin embargo, una alta concentración de sacarosa puede dar lugar a cristalizaciones no deseables en la masa del gel obtenido.^[10]

Presentación de nuestro producto final elaborado

La gelificación de nuestra fruta en las condiciones descritas en los apartados anteriores dio lugar a un dulce de melocotón ($m = 652$ g) que después de almacenado en el frigorífico a 5°C durante un tiempo de dos semanas pudo ser sacado del molde de polipropileno y colocado en un molde de acero inoxidable para completar su proceso de secado, almacenado en el frigorífico a 5°C durante cuatro semanas más, tras el cual se comprobó que el gel obtenido era lo suficiente consistente para mantener la forma y aspecto requeridos, pero su alta pegajosidad,^[12] en ocasiones, dificultaba la tarea de corte. Este hecho llevó a modelar el gel obtenido utilizando un cortador de canapés y preparar trozos de tamaño adecuado para ser comidos de un solo bocado pero con una forma que resultara atractiva para el consumidor. Se cortaron trozos con forma de

corazones, cuadrados, círculos y flores, que se colocaron en pequeños moldes de magdalenas fabricados con papel decorado ($d_{\text{base-molde}} = 3,5$ cm). Para facilitar la obtención de las porciones con la forma deseada bien definida, se reutilizaron bases de tarrinas blancas de queso fresco, fabricadas en polipropileno, recortadas con la forma deseada que se utilizaron junto con el cortador de canapés para extraer las porciones. Algunas fracciones obtenidas tras el almacenado, se guardaron a temperatura ambiente (26°C) en un desecador con CaCl_2 durante dos semanas más, lo que aceleró el proceso de secado y mejoró el aspecto final del producto obtenido, facilitando la tarea de corte para su presentación o consumo. La fracción preparada con un 20% de sacarosa extra también presentó la consistencia adecuada para ser cortada. Las diferentes porciones obtenidas se utilizaron para preparar un plato de postre convenientemente decorado para que su consumo resultara apetecible. El plato se recubrió con una lámina de parafilm transparente y se guardó en el frigorífico a 5°C hasta su presentación y consumo (Figura 4). Este postre también es adecuado para ser presentado sobre una base de queso fresco o bien acompañado de una porción de yogurt natural.

Melocotones recogidos el 10 de julio de 2018 con un estado de madurez aparente más avanzado, sometidos a igual proceso de selección, homogeneización y gelificación con una suspensión de citrato de calcio, que los descritos en apartados anteriores, dio lugar a un gel de mayor consistencia que pudo ser presentado en forma de tableta, apta para ser cortada sin ninguna dificultad en lonchas alargadas o cuadraditos pequeños de aproximadamente 1 cm³. Esto puede ser debido a la presencia, en la fruta de esta cosecha, de una cantidad más adecuada de PBM para el proceso de gelificación que pretendemos realizar. Después de un año de almacenado en el frigorífico a una temperatura de 5°C, la muestra mantiene su estado de conservación, muestra un buen sabor y conserva un claro matiz ácido debido al jugo de limón que tiene en su formulación.



Figura 4. Dulce de melocotón: presentación final.

Resultados y discusión

Melocotones no aptos para la venta al público por su avanzado grado de madurez, pero bien conservados, fueron adecuados para obtener geles consistentes a partir del contenido de PBM que presentan. Los caparazones calizos de jibia mostraron ser una adecuada fuente para extraer iones calcio con el ácido cítrico presente en el jugo de limones recién exprimidos. El citrato de calcio formado (pH = 4,23) gelificó de forma satisfactoria la PBM presente en los melocotones utilizados. Las bajas temperaturas de cocción empleadas evitan la descomposición del citrato de calcio manteniendo las propiedades que aporta al medio de reacción y favorece la conservación de nuestro producto final. Sólo un 20% de sacarosa fue necesario utilizar para alcanzar la adecuada gelificación de las cadenas de pectina de nuestro fruto. Si el grado de consistencia alcanzado no es el deseado, es posible corregir la formulación inicial añadiendo un volumen adicional de suspensión o disolución saturada de citrato de calcio y calentando a 100°C durante períodos de 20 minutos hasta alcanzarlo. La adición de un 20% de sacarosa extra, también permitirá obtener un dulce de melocotón con mayor consistencia. El análisis y determinación de la cantidad inicial de PBM presente en el melocotón utilizado permitirá calcular las cantidades de calcio y sacarosa necesarias para su correcto entrecruzamiento, estableciendo una adecuada secuencia de tiempos y temperaturas de calentamiento.

Adaptamos la presentación del dulce de melocotón en función de la consistencia del gel obtenido. Cuando se obtuvo un gel de consistencia alto se presentó en forma de tableta que pudo ser cortada, o se moldeó cuando la consistencia y pegajosidad del gel desaconsejaron la tarea de corte. Muestras almacenadas durante un año en el frigorífico a una temperatura de 5°C, mantienen un buen estado de conservación y sabor. El resultado de este trabajo fue presentado al equipo directivo y a otros miembros de nuestra comunidad educativa como D. Juan Luis Cánovas Pérez, investigador en el Centro Tecnológico Nacional de la Conserva y la Alimentación de Molina de Segura (2006-2016), además de a la alcaldesa de San Pedro del Pinatar, D.ª Visitación Martínez Martínez, así como a D. Jesús Sánchez Villa, dueño de New Concisa, S. L. y a D.ª Faustina Fernández Lucas, responsable de calidad de la empresa. En todos los casos el producto presentado fue valorado positivamente, destacando su intenso sabor a melocotón fresco, un dulzor agradable y poco empalagoso, gracias al sutil sabor cítrico que se percibe y a que no se ha abusado del azúcar en su realización, junto con una estructura compacta, que resulta fina y suave en boca.

Conclusiones

Profundizamos en la química de alimentos para conocer y entender sus mecanismos y, así, resolver un problema planteado, en principio cotidiano, que ha dado lugar a la obtención de un nuevo producto final elaborado.

Este proyecto recoge los resultados obtenidos en trabajos realizados durante dos cursos académicos con dos diferentes cosechas de melocotones de la variedad catherina, recolectados con diferente punto de madurez, lo que pone de manifiesto que el proceso propuesto en este trabajo es reproducible. Preparamos un dulce a partir de melocotones maduros fuera de la temporada natural de recolección y que ya no tendrían buena acogida por parte del consumidor habitual, utilizando caparazones calizos (jibiones) obtenidos como residuo de la limpieza de jibias, contribuyendo al reciclado y reutilización de ambas materias para elaborar un producto alimenticio novedoso que en la actualidad no podemos encontrar en los supermercados debido a la dificultad de su elaboración, con lo que conseguimos dar un valor e interés comercial a dos residuos alimentarios. Se trata de un proceso flexible, lo que permite adaptar la presentación final del producto obtenido a las condiciones particulares de los melocotones recogidos en cada cosecha. Así, dependiendo de la temporada y del grado de madurez del melocotón recolectado se pudo obtener un dulce de melocotón con un grado de dureza óptimo que se pudo cortar con facilidad para ser servido, o bien se obtuvo un dulce consistente pero que resultó más difícil de cortar por su elevada pegajosidad, por lo que se decidió moldear convenientemente utilizando un cortador de canapés que permitió dar diferentes formas a nuestro dulce de melocotón, lo que facilitó su presentación. En ambos casos se obtuvo un producto final donde se aprecia con claridad el sabor y aroma característicos del melocotón utilizado para su elaboración, y de fácil conservación incluso durante largos períodos de almacenado en frigorífico (1 año a 5°C). El producto preparado sólo utiliza la cantidad de pectina natural que contiene el melocotón y requiere una mínima cantidad de sacarosa en comparación con la requerida en la actualidad para la preparación de productos similares a escala industrial. Esto confiere a nuestro producto la característica de mínimamente procesado y le hace especialmente atractivo desde el punto de vista nutritivo y dietético. La baja cantidad de sacarosa empleada hace a este producto apto para ser consumido por personas que deben reducir la ingesta de azúcar. Otros trabajos deberán realizarse para mejorar el proceso y optimizar los resultados que aquí presentamos, sobre todo si se consideraran interesantes para ser llevados a escala industrial.

Agradecimientos

A mis alumnos y alumnas Á. Bellido Solano, J. Bernad Egea, L. Cano Martínez, S. Castejón Albaladejo, J. F. de la Fuente Arboleda, P. Egío López, A. Gómez García, A. Isofii Cetulean, D. Isofii Cetulean, S. I. Loo Ojeda, V. López Lombó, C. Martínez Ballester, P. Moráis Cruz y M.ª J. Pérez Rodríguez por la ilusión y esfuerzo mostrados durante todas las fases del trabajo realizado. A la empresa New Concisa, S.L. por su generosa colaboración, así como al Excmo. Ayuntamiento de San Pedro del Pinatar (Murcia) y

al AMPA del IES Dos Mares por su incondicional apoyo a nuestra labor educativa. A toda nuestra comunidad educativa que con su generoso e incondicional trabajo permite formar a alumnos y alumnas con la calidad personal y académica como los que en este momento ocupan estas líneas, así como al equipo directivo del IES Dos Mares por facilitar nuestra tarea en todas aquellas cuestiones solicitadas.

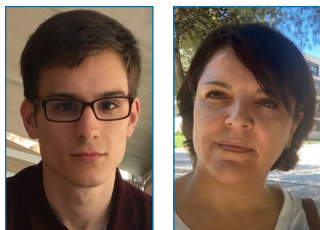
Bibliografía

- [1] Baker, R. A., Berry, N., Hui, Y. H. and Barrett, D. M. *Fruit Preserves and Jams. Processing Fruits: Science and Thechnology*, Segunda Edición de CRC Press LLC, 2005, Capítulo 6.
- [2] Kakino, Y., Hishikawa, Y., Onodera, R., Tahara, K. y Takeuchi, H. Gelation Factors of Pectin for Development of a Powder Form of Gel, Dry Jelly, as a Novel Dosage Form. *Chem. Pharm. Bull.* **2017** 65(11), 1035-1044.
- [3] Martínez-Pons, J. A. La preparación de mermelada como recurso didáctico. *An. Quím.* **2009** 105(3), 221-226.
- [4] Sharma, B. R., Naresh, L., Dhuldhoya, N.C., Merchant, S. U. y Merchant, U. C. An Overview on Pectins. *Times Food Processing Journal*, **2006** June-july, 44-51.
- [5] Thakur, B. R., Singh, R. K. y Handa, A. K. Chemistry and uses of pectin-A review. *Critical Reviews. Food Science and Nutrition* **1997** 37(1), 47-73.
- [6] Rojas-Melgarejo, F. Nuestra huerta. ¡Mucha química para comérsela! Una aproximación a la química de alimentos para estudiantes de ESO y Bachillerato. *An. Quím.*, **2019** 115(5), 429-434.
- [7] Rojas-Melgarejo, F. Las dificultades de cristalización de cloruro de sodio (NaCl): un proyecto de investigación integrador del currículo de Ciencias en ESO y Bachillerato. *An. Quím.*, **2019** 115(3), 244-248.
- [8] Resolución de 7 de marzo de 2019, de la Dirección General de Atención a la Diversidad y Calidad Educativa por la que se establece la convocatoria para la participación en el programa experimental de centros de especialización en la mejora de la promoción del talento en los centros docentes sostenidos con fondos públicos de la Región de Murcia, para los cursos 2019-2020, 2020-2021 y 2021-2022. BORM número 70 de 26 de marzo de 2019, 9114.
- [9] *El melocotón* (2008). alimentación.es. Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación. http://www.alimentacion.es/imagenes/es/melocoton_tcm8-16522.pdf
- [10] Díaz-Neira, L. S. *Principios básicos de la química y bioquímica de los alimentos*. Editorial Universidad de la Serena, 2010, págs. 42-44.
- [11] Löfgren, C. *Pectins-structure and gel forming properties: a literature review*. Chalmers University of Technology, Suecia. ISBN 91-7290-204-3.
- [12] Pagan-Gilabert, J. *Degradación enzimática y características físicas y químicas de la pectina del bagazo de melocotón*. Tesitex, S. L., Salamanca. ISBN: 89-89727-64-3.
- [13] Padilla-Zakour, O. Manufacture of low sugar/no sugar jams and jellies. *Venture Newsletter* **1999** 2(2).
- [14] Code of Federal Regulations: 1949-1984. Title 21-Food and Drugs. Chapter I-Food and Drug Administration, 275.
- [15] Barclay, T., Ginic-Markovic, M., Cooper, P. D. y Petrovsky., N. The chemistry and sources of fructose and their effect on its utility and health implications. *J. Excipients and Food Chem.* **2012** 3(2), 67-82.
- [16] Kroh, L. W. Caramelisation in food and beverages. *Food Chemistry* **1994** 51, 373-379.
- [17] Tricalcium citrate. *PubChem*. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/source/hsdb/5756>
- [18] Codex Alimentarius. Sistema internacional de numeración de los aditivos alimentarios. Volumen 1A, Sección 5.2, 1995.
- [19] Ash, M. and Ash, I. *Calcium citrate. Handbook of Preservatives*, 2004, 310. Synapse Information Resources, Inc. Endicott, NY 13760. ISBN 1-890595-66-7.
- [20] Gawkowska, D., Cybulska, J. y Zdunek, A. Structure-Related Gelling of Pectins and Linking with Other Natural Compounds: A Review. *Polymers* **2018** 10, 762.
- [21] Martínez-Espinosa, R. M.º Beneficios del uso del hueso de la jibia. *Revista Ornitológica Práctica* **2015** 74, 62-63. I.S.S.N. 1696-7771. <https://www.researchgate.net/publication/290427889>
- [22] Citrato de calcio y tetrahidrato. JOST, Fichas de datos de seguridad. Conforme con el Reglamento (UE) 2015/830 (Anexo II de REACH). Fecha de emisión: 20/04/2015. Fecha de revisión: 07/06/2018. Versión: 5.0.
- [23] Sundar-Raj, A. A., Rubila, S., Jayabalan, R. y Ranganathan, T. V. A Review on Pectin: Chemistry due to General Properties of Pectin and its Pharmaceutical Uses. *Open Access Scientific Reports* **2012** 1(12). <http://dx.doi.org/10.4172/scientificreports.550>
- [24] Acofarma. Sacarosa. Ficha de información técnica. Acofarma distribución, S. A.
- [25] Eggleston, G. y Vercellotti, J. R. Degradation of sucrose, glucose and fructose in concentrated aqueous solutions under constant pH conditions at elevated temperature. *J. Carbohydrate Chemistry*, **2000** 19(9), 1305-1318.
- [26] Asadi, M. *Beet-Sugar Handbook*. John Wiley & Sons, Inc. 2007, 56-57, ISBN 9780471763475.

Actividades no formales como estrategia para abordar el currículo de Física y Química

El Concurso de Cristalización en la Escuela

ENSEÑANZA
DE LA QUÍMICA



J. Martín-García

M. E. Dies Álvarez

Departamento de Didácticas Específicas
Universidad de Zaragoza
Instituto Universitario de Ciencias
Ambientales de Aragón (IUCA).

Facultad de Educación
C/ Pedro Cerbuna 12
(50009), Zaragoza

C-e: araujo@unizar.es

Recibido: 08/01/2021

Aceptado: 10/09/2021

ORCID: 0000-0002-2247-0826

ORCID: 0000-0002-6594-3021

Jorge Martín-García y María Eugenia Dies Álvarez

Resumen: Las enseñanzas no formales constituyen hoy un magnífico complemento a la educación científica que ofrece la escuela. En esta línea, este trabajo presenta un análisis de los contenidos curriculares de Física y Química que se pueden abordar a través de la participación en una actividad científica no formal como el Concurso de Cristalización en la Escuela. Los resultados muestran cómo la metodología que le caracteriza permite, no sólo trabajar y afianzar contenidos concretos, sino también ofrecer a los estudiantes una visión más adecuada de la naturaleza de la ciencia, contribuyendo a su alfabetización científica.

Palabras clave: Alfabetización científica; cristalografía; currículo; educación no formal; enseñanza de la química.

Abstract: Non-formal education is nowadays recognized as a useful complement to the scientific education that is offered in the school. In this context, this paper presents a brief analysis of the Spanish national curriculum contents for the subjects of Physics and Chemistry, that may be covered while participating in a scientific out-of-school activity, a crystal-growing contest named Concurso de Cristalización en la Escuela (CCE). Results show that the methodology followed in the contest allows teachers to introduce some curricular contents and to present a more accurate view of the nature of science, supporting their students' scientific literacy.

Keywords: Chemistry education; crystallography; non-formal education; secondary school curriculum; scientific literacy.

Introducción

La educación no formal ha experimentado un gran auge y se ha ido consolidando a lo largo de los años hasta prácticamente conformar un sistema complementario a la educación formal. En este sentido, ofrece ya una panoplia enormemente extensa de oportunidades diferentes que permiten adquirir gran cantidad de aprendizajes, quizá más incluso que el propio sistema educativo.^[1] Por lo tanto, se trata de un elemento que aporta un valor adicional tanto a la educación en general como a la enseñanza de las ciencias en particular.

Estas actividades proporcionan nuevas oportunidades de aprendizaje, diferentes e innovadoras, que se llevan a cabo, por lo general, en entornos más contextualizados y conectados con el mundo real.^[2] Así se convierten en espacios que promueven un aprendizaje más significativo, apoyando en el desarrollo cognitivo de los estudiantes^[3] mediante experiencias más amplias, difícilmente reproducibles en el aula y en las que se emplean recursos y materiales que no suelen estar presentes en la enseñanza tradicional. Por ejemplo, su mayor flexibilidad permite tratar los temas con mayor detenimiento y en mayor profundidad o, por el contrario, optar por una perspectiva más holística. Por último, también es sabido que ponen en acción meca-

nismos que activan la motivación y la curiosidad de los estudiantes, actuando como elementos de atracción hacia la ciencia.^[4]

Garantizar una educación científica de calidad pasa por integrar ambas culturas, formal y no formal, para producir una enseñanza más significativa. De hecho, algunos trabajos^[5] revelan cómo la conexión, entre ambos sistemas, resulta beneficiosa para el aprendizaje significativo y la enseñanza efectiva de las ciencias ya que ofrece un apoyo adicional y permite integrar conceptos e implementar nuevas formas de aprender.^[1] Sin embargo, participar en actividades no formales no siempre es posible. Los currículos actuales presentan una gran cantidad de contenidos, eminentemente conceptuales, que no tienen en cuenta los tiempos de que se dispone en el aula.

Como consecuencia, normalmente los docentes se ven obligados a centrar sus esfuerzos en satisfacer las exigencias curriculares y cubrir la totalidad del programa, dejando en un segundo plano otros elementos igualmente importantes como, por ejemplo, el transmitir una imagen adecuada de la naturaleza de la ciencia. No obstante, es necesario incorporar también estos elementos, ya que una verdadera alfabetización científica implica comprender la

naturaleza y procedimientos de la ciencia. Como señalan Caamaño e Izquierdo:^[7]

No hay tiempo para desarrollar dos programas en paralelo: trabajar con el alumnado los conceptos químicos y los problemas y preguntas de siempre según aparecen en los libros de texto y, por otro lado, trabajar más a fondo la comprensión conceptual, las competencias de investigación.

Por lo tanto, todos deben ser trabajados de manera conjunta. Por otra parte, si como defienden Anderson, Kiesel y Storksdiel,^[8] los contextos no formales deben partir de las necesidades de los participantes, ya sean profesores o alumnos, sería lícito plantear que cualquier actividad de este tipo estuviera concebida de manera que permitiera abordar, al menos, una fracción de los contenidos curriculares y trabajar conforme a los principios que rigen la enseñanza, para contribuir al logro de sus objetivos. Guisasa y Morentin^[9] remarcan la necesidad de integrar en el currículo este tipo de actividades para lograr una enseñanza eficaz. De hecho, poder trabajar contenidos del currículo es una de las principales razones por las que los profesores participan en actividades no formales.

En esta línea, se presenta a continuación un análisis del currículo nacional para las asignaturas de Física y Química. Se pretende con ello revelar los contenidos del mismo que se pueden abordar a través de una actividad científica no formal, como es el Concurso de Cristalización en la Escuela (CCE).^[10,11]

El concurso es un proyecto que persigue despertar el espíritu investigador del alumnado dándole a conocer la ciencia desde dentro, a través de la realización de proyectos de crecimiento cristalino en los que se ponen en marcha los diferentes elementos de la actividad científica. Así, más concretamente, se aprovecha el atractivo inherente al trabajo de laboratorio y a los propios cristales para contribuir al desarrollo de algunas de las destrezas propias de los científicos y alcanzar una comprensión más profunda de qué es la ciencia y cómo se construye.

Método

En España el diseño curricular supone un proceso continuo de concreción que va adaptando el currículo a la realidad concreta de cada zona del país. Así, la legislación que se maneja en cada comunidad difiere del resto, por ello, se ha optado por circunscribir este trabajo exclusivamente al decreto de enseñanzas mínimas (*Real Decreto 1105/2014, de 26 de diciembre, por el que se establece el currículo básico de la Educación Secundaria Obligatoria y del Bachillerato*) que establece el marco normativo básico para todo el territorio nacional.

Se presenta, de este modo, un análisis documental del contenido de dicho decreto, centrado en las materias de Física y Química, tanto de Educación Secundaria Obligatoria, como de Bachillerato. Se han excluido de esta selección las materias correspondientes a 2.º de Bachillerato

por motivos de extensión del artículo y por el hecho de que son muy pocos los estudiantes de este curso que participan en el concurso en Aragón.

El análisis considera los tres elementos principales que conforman el currículo desde la entrada en vigor de *Ley Orgánica 8/2013, de 9 de diciembre, para la mejora de la calidad educativa*: contenidos, criterios de evaluación y estándares de aprendizaje evaluables como concreción última de lo que el estudiante debe saber.

Resultados

La Química, como también la Física, son disciplinas de un marcado carácter experimental que se asientan tanto en destrezas y procedimientos como en el control de variables, la observación, el trabajo en el laboratorio o la medida de magnitudes entre otras. Esta realidad debe reflejarse en el currículo que ha de incluir en las materias los métodos propios de la racionalidad científica y las habilidades que caracterizan el trabajo en este ámbito. Por ello, el primer bloque de contenidos de cada curso (Tablas 1, 2 y 3) está destinado al desarrollo de las capacidades inherentes a este tipo de trabajo, en las que se va profundizando progresivamente, curso a curso, a través de la experimentación y la realización de proyectos de investigación. Aun así, son pocas las ocasiones en que los escolares pueden explorar realmente lo que hacen los científicos, usar el lenguaje de la ciencia y llevar a cabo una verdadera actividad científica.^[12,13]

El concurso está concebido, precisamente, para ofrecer esta oportunidad. En él los estudiantes, normalmente trabajando en grupos cooperativos, se plantean preguntas, buscan información y elaboran hipótesis para darles respuesta. Además, diseñan y planifican experimentos en los que manipulan los instrumentos de uso frecuente en el laboratorio (probetas, pipetas, termómetros, matraces aforados, placas calefactoras, agitadores magnéticos etc.) y llevan a cabo procedimientos habituales como la pesada o el enrase y diferentes procesos de separación y purificación, como la filtración o la decantación; que les proporcionan datos con los que comprobar sus teorías y extraer sus conclusiones.

Finalmente, presentan sus hallazgos a sus compañeros y profesores, de donde deriva la elección de los representantes del centro en la final del concurso, para la que elaboran un poster resumen del proyecto que, junto con el material obtenido y sus anotaciones de laboratorio, han de defender ante un jurado en una jornada abierta al público y organizada a modo de «congreso científico».

El desarrollo de estos proyectos permite al estudiante completar su proceso de aprendizaje, gestionándolo y potenciándolo de una manera mucho más autónoma. Además, no sólo permite cubrir por completo el primer bloque curricular, sino que también proporciona un conocimiento básico de la ciencia, de cómo se construye, de la diversidad de sus procedimientos y de su naturaleza. De este modo, el concurso contribuye al objetivo principal que marca el currículo de Física y Química para la etapa de se-

Tabla 1. Contenidos, Criterios de evaluación y Estándares de Aprendizaje Evaluables del Bloque 1 de Física y Química (2.º y 3.º de la ESO).

Bloque 1. La actividad científica	
Contenidos: El método científico: sus etapas. Medida de magnitudes. Utilización de las Tecnologías de la Información y la Comunicación. Notación científica. El trabajo en el laboratorio. Proyecto de investigación.	
Criterios de evaluación	Estándares de aprendizaje evaluables
1. Reconocer e identificar las características del método científico.	1.1. Formula hipótesis para explicar fenómenos cotidianos utilizando teorías y modelos científicos. 1.2. Registra observaciones, datos y resultados de manera organizada y rigurosa, y los comunica de forma oral y escrita utilizando esquemas, gráficos, tablas y expresiones matemáticas.
2. Valorar la investigación científica y su impacto en la industria y en el desarrollo de la sociedad.	2.1. Relaciona la investigación científica con las aplicaciones tecnológicas en la vida cotidiana.
3. Conocer los procedimientos científicos para determinar magnitudes.	3.1. Establece relaciones entre magnitudes y unidades utilizando, preferentemente, el Sistema Internacional de Unidades y la notación científica para expresar los resultados.
4. Reconocer los materiales, e instrumentos básicos presentes del laboratorio de Física y en de Química; conocer y respetar las normas de seguridad y de eliminación de residuos para la protección del medioambiente.	4.1. Reconoce e identifica los símbolos más frecuentes utilizados en el etiquetado de productos químicos e instalaciones, interpretando su significado. 4.2. Identifica material e instrumentos básicos de laboratorio y conoce su forma de utilización para la realización de experiencias respetando las normas de seguridad e identificando actitudes y medidas de actuación preventivas.
6. Desarrollar pequeños trabajos de investigación en los que se ponga en práctica la aplicación del método científico	6.1. Realiza pequeños trabajos de investigación sobre algún tema objeto de estudio aplicando el método científico, y utilizando las TIC para la búsqueda y selección de información y presentación de conclusiones. 6.2. Participa, valora, gestiona y respeta el trabajo individual y en equipo

cundaria, que no es otro que ayudar a cimentar una cultura científica básica y acercar la ciencia a los adolescentes.

Asimismo, también aprenden a establecer relaciones cuantitativas entre los conceptos, calculando concentraciones, cantidades y volúmenes, elaborando gráficos que representan dichas relaciones, como las curvas de solubilidad,^[14] y pudiendo apreciar las influencia que tienen factores como la temperatura en dichas relaciones. Finalmente, en los cursos superiores (1.º de Bachillerato, Tabla 4) es posible profundizar un poco más en la temática, dando entrada al estudio de las disoluciones reales y, más en concreto, de sus propiedades coligativas, mediante la observación y el estudio de fenómenos como el aumento ebulloscópico.

Tabla 2. Contenidos, Criterios de evaluación y Estándares de Aprendizaje Evaluables del Bloque 1 de Física y Química (4.º de la ESO).

Bloque 1. La actividad científica	
Contenidos: La investigación científica. Errores en la medida. Expresión de resultados. Análisis de los datos experimentales. Tecnologías de la Información y la Comunicación en el trabajo científico. Proyecto de investigación.	
Criterios de evaluación	Estándares de aprendizaje evaluables
2. Analizar el proceso que debe seguir una hipótesis desde que se formula hasta que es aprobada por la comunidad científica.	2.1. Distingue entre hipótesis, leyes y teorías, y explica los procesos que corroboran una hipótesis y la dotan de valor científico.
5. Comprender que no es posible realizar medidas sin cometer errores y distinguir entre error absoluto y relativo.	7.1. Representa gráficamente los resultados obtenidos de la medida de dos magnitudes relacionadas infiriendo, en su caso, si se trata de una relación lineal, cuadrática o de proporcionalidad inversa, y deduciendo la fórmula
7. Realizar e interpretar representaciones gráficas de procesos físicos o químicos a partir de tablas de datos y de las leyes o principios involucrados.	8.1. Elabora y defiende un proyecto de investigación, sobre un tema de interés científico, utilizando las TIC.
8. Elaborar y defender un proyecto de investigación, aplicando las TIC.	

Tabla 3. Contenidos, Criterios de evaluación y Estándares de Aprendizaje Evaluables del Bloque 1 de Física y Química (1.º de Bachillerato).

Bloque 1. La actividad científica	
Contenidos: Estrategias necesarias en la actividad científica. Tecnologías de la Información y la Comunicación en el trabajo científico. Proyecto de investigación.	
Criterios de evaluación	Estándares de aprendizaje evaluables
1. Reconocer y utilizar las estrategias básicas de la actividad científica como: plantear problemas, formular hipótesis, proponer modelos, elaborar estrategias de resolución de problemas y diseños experimentales y análisis de los resultados	1.1. Aplica habilidades necesarias para la investigación científica, planteando preguntas, identificando problemas, recogiendo datos, diseñando estrategias de resolución de problemas utilizando modelos y leyes, revisando el proceso y obteniendo conclusiones. 1.2. Resuelve ejercicios numéricos expresando el valor de las magnitudes empleando la notación científica, estima los errores absoluto y relativo asociados y contextualiza los resultados. 1.5. Elabora e interpreta representaciones gráficas de diferentes procesos físicos y químicos a partir de los datos obtenidos en experiencias de laboratorio o virtuales y relaciona los resultados obtenidos con las ecuaciones que representan las leyes y principios subyacentes.
	1.6. A partir de un texto científico, extrae e interpreta la información, argumenta con rigor y precisión utilizando la terminología adecuada.
	2.2. Establece los elementos esenciales para el diseño, la elaboración y defensa de un proyecto de investigación, sobre un tema de actualidad científica, vinculado con la Física o la Química, utilizando preferentemente las TIC.

Tabla 4. Contenidos, Criterios de evaluación y Estándares de Aprendizaje Evaluables del Bloque 2 de Física y Química (1.º de Bachillerato).

Bloque 2. Aspectos cuantitativos de química	
Contenidos: Disoluciones: formas de expresar la concentración, preparación y propiedades coligativas.	
Criterios de evaluación	Estándares de aprendizaje evaluables
4. Realizar los cálculos necesarios para la preparación de disoluciones de una concentración dada y expresarla en cualquiera de las formas establecidas.	4.1. Expresa la concentración de una disolución en g/l, mol/l % en peso y % en volumen. Describe el procedimiento de preparación en el laboratorio, de disoluciones de una concentración determinada y realiza los cálculos necesarios, tanto para el caso de solutos en estado sólido como a partir de otra de concentración conocida.
5. Explicar la variación de las propiedades coligativas entre una disolución y el disolvente puro.	5.1. Interpreta la variación de las temperaturas de fusión y ebullición de un líquido al que se le añade un soluto relacionándolo con algún proceso de interés en nuestro entorno.

Por otra parte, una de las actividades fundamentales a realizar en el concurso, probablemente la más recurrente, es la preparación de disoluciones con diferentes solutos y, a veces, disolventes; distintas concentraciones y volúmenes y a diferentes temperaturas. De este modo, en el transcurso del proyecto, los alumnos adquieren y consolidan conceptos como los de soluto, disolvente, concentración, dilución, disolución diluida, saturada o sobresaturada, evaporación etc., que forman parte del segundo bloque de contenidos tanto en 2.º y 3.º de la ESO como en 1.º de Bachillerato (Tablas 4 y 5). Además, también refuerzan otros contenidos más básicos relacionados con ellos, como masa, volumen, densidad o temperatura.

En esta misma línea Guzei,^[15] en su estudio sobre el «*Wisconsin High School Crystal Growing Competition*», un evento prácticamente idéntico al CCE, señala cómo los profesores participantes reconocen la utilidad de la actividad para facilitar el aprendizaje de conceptos relacionados con la solubilidad de los compuestos, la concentración o las buenas prácticas de laboratorio. Otros autores^[16] también remarcan la capacidad de las prácticas de cristalización como herramienta para la introducción de contenidos básicos de química y de física y el desarrollo de destrezas básicas de investigación y de trabajo en el laboratorio (la pesada, el enrase, la determinación volumétrica, la filtración, el calentamiento etc.).

Por otro lado, el concurso también contribuye a que los estudiantes adquieran una mejor comprensión de la estructura interna de la materia (Tabla 4) y que comprendan, con mayor facilidad cómo se forma un sólido cristalino pudiendo, además, comprobar cómo va aumentando su masa paulatinamente. Así se familiarizan con los conceptos de cristal, semilla, estructura cristalina, celda unidad, etc., que son fundamentales para comprender otros muchos contenidos de química como, por ejemplo, las propiedades de los diferentes tipos de sustancias.

Finalmente, dado que el currículo de secundaria y bachillerato coloca a las competencias como elemento cen-

Tabla 5. Contenidos, Criterios de evaluación y Estándares de Aprendizaje Evaluables del Bloque 2 de Física y Química (2.º y 3.º de la ESO).

Bloque 2. La materia	
Contenidos: Sustancias puras y mezclas. Mezclas de especial interés: disoluciones acuosas, aleaciones y coloides. Uniones entre átomos: moléculas y cristalinas.	
Criterios de evaluación	Estándares de aprendizaje evaluables
4. Identificar sistemas materiales como sustancias puras o mezclas y valorar la importancia y las aplicaciones de mezclas de especial interés.	4.2. Identifica el disolvente y el soluto al analizar la composición de mezclas homogéneas de especial interés. 4.3. Realiza experiencias sencillas de preparación de disoluciones, describe el procedimiento seguido y el material utilizado, determina la concentración y la expresa en gramos por litro.
5. Proponer métodos de separación de los componentes de una mezcla.	5.1. Diseña métodos de separación de mezclas según las propiedades características de las sustancias que las componen, describiendo el material de laboratorio adecuado.
9. Conocer cómo se unen los átomos para formar estructuras más complejas y explicar las propiedades de las agrupaciones resultantes.	

tral del proceso educativo, ninguna revisión del mismo estará completa si no se dirige la atención a ellas. A este respecto, la competencia matemática y las competencias básicas en ciencia y tecnología impregnan todas las actividades del proyecto, involucrando tanto la dimensión conceptual (contenidos y conceptos), como procedimental (toma de datos, control de variables) e incluso epistémica (cómo se genera el conocimiento); pero; los participantes deberán, también movilizar el resto de competencias clave.^[17,18]

Así, por ejemplo, el papel del alumno como la persona que puede y debe desarrollar sus propios proyectos e ideas lleva al estudiante a movilizar su sentido de la iniciativa y su espíritu emprendedor. No obstante, al trabajar en equipo, tendrá que consensuar sus decisiones con sus compañeros, negociando la distribución de las tareas y poniendo en marcha sus competencias sociales y cívicas. La búsqueda de información en distintas fuentes y su selección, en cambio, contribuyen a consolidar la competencia de aprender a aprender y la competencia digital, que también pondrán en juego a la hora de preparar el póster, blog o vídeo y elaborar las representaciones gráficas de los datos obtenidos.

Durante la final del concurso deberán mostrar sus resultados y conclusiones, preparando, resumiendo y presentando la información con precisión y concisión, pero también expresando, defendiendo y argumentando ideas científicas, apropiándose de la terminología y el lenguaje científicos y empleándolos para elaborar una auténtica comunicación oral, como lo harían para un congreso. Esta forma de trabajar, que ya ha demostrado su utilidad tanto en primaria como en secundaria,^[19] permite poner en marcha la compe-

tencia en comunicación lingüística y habilidades como las mencionadas que de otro modo no se desarrollarían.

Por último, la competencia en conciencia y expresiones culturales es, probablemente, la que presenta una menor conexión con el concurso y, sin embargo, la final permite descubrir un aspecto menos conocido de la cultura científica, los congresos donde los investigadores dan a conocer sus trabajos al resto de la comunidad científica; mientras que el resto de actividades muestran cómo la cristalografía es responsable de muchos de los avances tecnológicos que sostienen las condiciones de vida de que hoy disfrutan las sociedades modernas, lo que contribuye a una mejor comprensión de la cultura contemporánea.

Conclusiones

El crecimiento de cristales en el laboratorio a partir de una disolución es una práctica relativamente sencilla y muy frecuente en los laboratorios de las materias de química en secundaria. Sin embargo, la capacidad formativa de estas experiencias es muy superior a la que se les suele conceder. Como muestra de ella, en este trabajo se ha presentado una revisión del currículo nacional básico (Real Decreto 1105/2014) para las asignaturas de Física y Química en la que se ha incidido en los diferentes contenidos que se pueden abordar en el marco del Concurso de Cristalización en la Escuela y a partir de la cual se han extraído una serie de conclusiones que ahora se presentan.

En primer lugar, se ha mostrado cómo el concurso es una herramienta que permite abordar bloques prácticamente completos del currículo, como son los asociados con la actividad científica, gracias a la dinámica de trabajo que le caracteriza. Esta metodología facilita la explotación de cuestiones científicas mediante la puesta en marcha de diferentes estrategias de indagación cooperativa, centradas en la participación del alumno, algo que desde hace años se ha demandado en la enseñanza de las ciencias.^[20]

De este modo, se desarrollan nuevas concepciones, potenciando la integración de elementos conceptuales, habilidades procedimentales y cuestiones epistemológicas que cristalizan en un aprendizaje más completo desde el que se puede descubrir la verdadera naturaleza de la ciencia y desterrar del ideario del estudiante algunas concepciones alternativas y erróneas como, por ejemplo, la unicidad y estaticidad del método científico.

En segundo lugar, se revela cómo el concurso también permite trabajar algunos contenidos de otros bloques, como los relaciones con el tema de las disoluciones. En este caso, se trata de contenidos que muchas veces los estudiantes de secundaria no dominan, porque no resultan tan intuitivos y comprensibles para ellos como se podría pensar por lo que no terminan de comprenderlos adecuadamente, encontrando dificultades a la hora de realizar los cálculos y procedimientos necesarios para elaborarlas.^[21]

En estos niveles educativos tampoco se manejan con soltura siempre otros conceptos más elementales, como densidad, concentración o masa de soluto y masa de diso-

lución.^[22] El concurso proporciona una oportunidad para abordar todos estos contenidos en el laboratorio, de una manera más contextualizada y práctica, que puede contribuir a clarificarlos y reforzarlos, a profundizar en ellos y a ampliarlos.

En definitiva, parece que se puede considerar al concurso una actividad favorecedora de la formación y la competencia científica del alumnado, que permite abordar diferentes contenidos curriculares, pero también ir más allá del currículo, dejando que los escolares profundicen en temas que les interesen y puedan descubrir la cristalografía y su relevancia tanto en los avances de la química como en los de otras muchas disciplinas.

La finalidad última de la educación científica, en una etapa como la secundaria y, en menor medida en el bachillerato, no es otra que contribuir a la alfabetización científica de los estudiantes, ayudándoles a comprender las ideas esenciales de la ciencia y la relevancia que esta tiene en la vida cotidiana de las personas. Lograrlo supone trascender los contenidos conceptuales y proporcionar a los escolares una cierta cultura científica desde la que puedan entender cómo funciona la ciencia y cómo se construye el conocimiento científico. En este contexto, el CCE y otras tantas actividades no formales que se encuentran a disposición de los centros y los educadores, tienen mucho que aportar, ya que muestran la cara más desconocida pero también más agradable de la ciencia.

Agradecimientos

Este trabajo supone una contribución a los proyectos EDU2016-76743-P (MIMECO), PIIDUZ_19_468 (Universidad de Zaragoza) y al grupo BEAGLE de investigación en Didáctica de la Ciencias Experimentales (Gobierno de Aragón).

Jorge Martín disfruta de un contrato predoctoral del Gobierno de Aragón (ORDEN IJU/796/2019).

Bibliografía

- [1] Ortega, J. *Rev. Educ.* **2005**, *338*, 167-175.
- [2] Muscat, M.; Pace, P. *JBSE.* **2013**, *12*(3), 337-351.
- [3] Garner, N.; Eilks, I. *EJMSTE.* **2015**, *11*(5), 1197-1210.
- [4] Oliva, J. M.; Matos, J. M.; Acevedo, J. A. *REEC.* **2008**, *7*(1), 178-198.
- [5] Garner, N.; Hayes, S.; Eilks, I. *Sisyphos J. Educ.* **2014**, *2*(2), 10-31.
- [6] Vázquez, Á.; Manassero, M. A. *REDIE.* **2007**, *9*(1).
- [7] Caamaño, A.; Izquierdo, M. *Alambique* **2003**, *60*, 60-67.
- [8] Anderson, D.; Kisiel, J.; Storksdiack, M. *Curator Mus. J.* **2006**, *49*(3), 365-386.
- [9] García-Ruiz, J. M. *An. Quím.* **2013**, *109*(3), 244-245.
- [10] Gómez, P.; Martín, A. *An. Quím.* **2016**, *112*(2), 116-117.
- [11] Guisasaola, J.; Morentin, M. *Enseñ. Las Cienc.* **2007**, *25*(3), 401-414.
- [12] García Molina, R. *REurEDC* **2011**, *8*(0), 370-392.

- [13] Osborne, J.; Dillon, J. *Science Education in Europe: Critical Reflections*; 13; The Nuffield Foundation. Londres, 2008.
- [14] Durán, I.; Martínez, A. M. *EduQ*. **2012**, 45-51.
- [15] Guzei, I. A. *J. Chem. Educ.* **2014**, 91(12), 2013-2017.
- [16] Gražulis, S.; Sarjeant, A. A.; Moeck, P.; Stone-Sundberg, J.; Snyder, T. J.; Kaminsky, W.; Oliver, A. G.; Stern, C. L.; Dawe, L. N.; Rychkov, D. A.; Losev, E. A.; Boldyreva, E. V.; Tanski, J. M.; Bernstein, J.; Rabeh, W. M.; Kantardjieff, K. A. *J. Appl. Crystallogr.* **2015**, 48(6), 1964-1975.
- [17] Rojas, F. *An. de Quim.* **2019**, 115(3), 244-248.
- [18] Gollerizo-Fernández, A.; Clemente-Gallardo, M. *Rev. Electr. Educare* **2019**, 23(2), 1-23.
- [19] Lupión, T., y López, R. *EduQ* **2013**, 0(16), 53-61.
- [20] Carrascosa, J.; Martínez, J.; Furió, C.; Guisasola, J. *REurEDC* **2008**, 5(2) 118-133.
- [21] Gennari, F.; Siracusa, P.; Corso, H.; Raviolo, *Enseñ. Las Cienc.* **2004**, 22(3), 379-388.
- [22] Landau, L.; Ricchi, G.; Torres, N. *Educ. Quím.* **2014**, 25(1), 21-29.






XXXVIII REUNIÓN BIENAL
RSEQ
 GRANADA 2021
 28 DE JUNIO / 2 DE JULIO

REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUÍMICA

Nueva fecha 27-30 de junio de 2022

www.bienal2021.com

Artículos reseñables

Copper-Catalyzed Dehydrogenative Amidation of Light Alkanes

Angew. Chem. Int. Ed. **2021**, *60*, 18467-18471

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.202104737>

Conversión de alcanos gaseosos en derivados de amidas

M. A. Fuentes, R. Gava, N. I. Saper, E. A. Romero, A. Caballero, J. F. Hartwig y P. J. Pérez

En el contexto de la formación catalítica de enlaces carbono-hidrógeno, una de las áreas de mayor expansión en el siglo XXI, son escasos los sustratos que aún no han sido empleados hacia tal fin. Entre ellos destacan los alcanos gaseosos o ligeros, miembros de la serie C_nH_{2n+2} con valores de n entre 1 y 4, que presentan energías de enlace carbono-hidrógeno extraordinariamente altas (105 kcal/mol para el caso del metano).

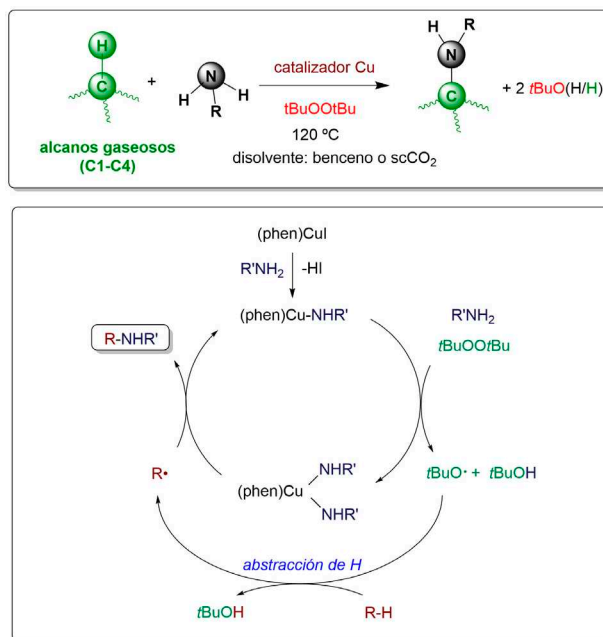
En este trabajo colaborativo entre las Universidades de Huelva y California-Berkeley se han aunado esfuerzos para desarrollar un sistema catalítico que permita la conversión de tales enlaces C-H en otros C-N mediante un proceso de amidación deshidrogenativa que tiene por reactivos al alcano gaseoso y a una amida, y que precisa del concurso de peróxido de di-tertbutilo como oxidante. Los catalizadores son complejos de cobre con ligandos de tipo fenantrolina (Esquema 1).

Este sistema proporciona buenos rendimientos a partir de etano, propano y butanos (iso- y n). En lo que se refiere al metano, el rendimiento es bajo, si bien conviene señalar que es el primer caso descrito de amidación directa del mismo mediante catálisis metálica.

Una de las variables estudiadas ha sido el medio de reacción. En una primera aproximación, los experimentos se realizaron en benceno, siguiendo protocolos establecidos en trabajos similares. Sin embargo, la solubilidad de estos alcanos gaseosos en benceno es muy baja, lo que afecta a la cinética del proceso. Ello condujo a un cambio en el medio de reacción hacia dióxido de carbono supercrítico, $scCO_2$. Por encima de las condiciones críticas (31 °C, 72.8 atm), el $scCO_2$ es un fluido que, mezclado con un gas, origina una disolución con una concentración del alcano muy superior a la existente en cualquier disolvente convencional. Ello ha permitido elevar considerablemente el grado de conversión desde 41% en benceno al 80% en $scCO_2$ para el etano. Como única modificación del sistema se empleó un catalizador de cobre con cadenas fluoradas para facilitar su disolución en $scCO_2$.

Este proceso tiene lugar mediante un mecanismo que acopla dos reacciones. Por un lado, el oxidante es responsable de la abstracción de hidrógeno del alcano y la formación de un radical R, que reacciona con un amido complejo de cobre generado a partir de una amida y el centro metálico (Esquema 1). En buen acuerdo con esta propuesta, estudios de competición entre distintos alcanos han permitido obtener

una escala de reactividad relativa que se correlaciona en alto grado con valores de la energía de disociación de los enlaces C-H de los alcanos empleados, demostrado la importancia del paso de la abstracción del hidrógeno por parte del oxidante en el proceso global.



Esquema 1. Arriba: Amidación deshidrogenativa de alcanos gaseosos. Abajo: Mecanismo propuesto.

El artículo ha sido clasificado como *Hot Paper* por la revista *Angew. Chem. Int. Ed.*, que además lo ha considerado para una difusión adicional en forma de nota de prensa titulada «At last: Separated and freshly bound», que ha sido publicada en diversos portales de divulgación científica, como es el caso de *ScienceDaily* o *Chemeurope*, entre otros.

Finalmente, es destacable la disponibilidad de este artículo como de Acceso Libre gracias a los acuerdos entre Wiley y la CRUE, y a la Biblioteca de la Universidad de Huelva/CBUA que lo consideró para ello.

RADICALES (MUY) LIBRES



J. de Mendoza

Catedrático jubilado de Química Orgánica
(Universidad Autónoma de Madrid)
Profesor Emérito, Instituto Catalán
de Investigación Química
(ICIQ, Tarragona)
C-e: jmendoza@iciq.es

Fair Play

Javier de Mendoza

Hablemos hoy de marrullerías, que no alcanzan la categoría de delitos. El juego limpio es un requerimiento ético consustancial a cualquier persona honrada, tanto en su profesión como en su vida privada. Es una forma de vivir. Desgraciadamente, la mentira, las medias verdades, la argumentación sectaria o la manipulación son herramientas comunes en nuestra sociedad, a todos los niveles. De los políticos prefiero no hablar, pues necesitaría mucho más espacio que estas breves líneas para «glosar» tan sólo algunas de sus mentiras, incumplimientos y contradicciones. En esta columna, en una revista de química, debería sobre todo referirme a los ejemplos de falta de *Fair Play* en el mundo científico y académico, y lo voy a hacer, pero déjenme antes poner algunos ejemplos extraídos del mundo del deporte. No me referiré obviamente al fútbol, que es ya más un negocio que una actividad deportiva, pues basta con escuchar a entrenadores y periodistas especializados cuando afean a un jugador que no provocara un penalti tirándose a la piscina o no cortara un contrataque con una falta descarada por la espalda. Buscaré casos no tan comentados en el ámbito de otros deportes menos populares, de esos de los que nos acordamos sólo una vez cada cuatro años. Me refiero, naturalmente, a los juegos olímpicos, y es buen momento, ahora que acaban de finalizar los últimos, para abordar el tema.

Los tiempos del barón de Coubertin, fundador del movimiento olímpico ya resultan lejanos, y aquello de que lo importante es participar suena a broma cuando todos los países sin excepción buscan únicamente maximizar el número de sus medallas, importando poco o nada quien quede clasificado más allá del tercer lugar. Y todo como expresión de un nacionalismo tribal, hoy en día dominante en el planeta. Ya he escrito en alguna ocasión que sin banderas, expresión máxima de ese nacionalismo, los juegos olímpicos no existirían.

Las olimpiadas de Roma de 1960 fueron las primeras que seguí por televisión, siendo adolescente. Desde entonces he procurado verlas todas, y confieso que disfruto mucho con las proezas y la entrega de los atletas, así como por la variedad de deportes que muestran, lejos de los dos o tres de siempre. Invariablemente, los periodistas se esfuerzan en glosar las hazañas de sus compatriotas, a menudo dejando de lado las de participantes de otros países, salvo si son

muy famosos. Siempre que me pillaron olimpiadas fuera de España, me pareció ver una competición distinta. Junto a los deportes más tradicionales, como atletismo, natación o gimnasia, los franceses hablaban de equitación, esgrima, rugby, los cubanos de boxeo, mientras los españoles lo hacíamos de esos deportes minoritarios que hemos ido descubriendo y que nos nutren de medallas. Parece que todo vale en pos del podio y de la gloria nacional. En la olimpiada que acaba de terminar, un conocido locutor afirmó sin pestañear que esta vez Polonia no lo estaba haciendo demasiado bien. Veamos: Polonia, 38 millones de habitantes, un PIB de 642.000 millones de dólares y 13 medallas en Tokio 2020, de las cuales 4 han sido de oro, todas en atletismo. España, 47 millones de habitantes, 1.461.000 de dólares de PIB (más del doble) y 16 medallas, con 3 de oro, pero en tiro por parejas, kata y escalada deportiva. Sobran comentarios. Recuerdo que cuando en 1960 conseguimos una medalla de bronce en hockey sobre hierba, tras India y Paquistán, después de muchos años de sequía, todos lanzaron las campanas al vuelo. Por un momento pensé que nuestros jugadores llevaban turbantes, como los que siempre ganaban, hasta que descubrí que la mayoría procedían de un solo club, el Egara, especialista en ese deporte, no me pregunten por qué. Tras el éxito de Barcelona 92, que nos llenó de medallas, fruto de cuantiosas inversiones y ejemplar planificación, nos hemos estabilizado en una cifra alrededor de 20, y sin tantas de oro, por el menor esfuerzo institucional y la menor atención que seguimos destinando al deporte de nuestros jóvenes en relación a nuestros vecinos europeos, a pesar de utilizar todo tipo de estrategias para abultar el medallero. Eso lo hacen todos los países, me dirán, y es cierto. Casi todos los finalistas de las carreras atléticas de las últimas olimpiadas eran atletas de color, a pesar de que lucían en sus camisetas las banderas de multitud de países nórdicos, a cuyos habitantes siempre imagino rubios y de ojos azules. En Tokio me sorprendió un encuentro de tenis de mesa entre una jugadora de Hong Kong y otra alemana, que luchaban por la medalla de bronce. Ambas eran inequívocamente asiáticas, pero una, la de Hong Kong, iba teñida de rubio, al contrario que la representante de Alemania, que conservaba su color de pelo natural, casi negro. Vistas de

lejos, parecía que llevaran las banderas cambiadas. Pero, anécdotas aparte, habremos de admitir que en esos temas de transfuguismo deportivo, la indiscutible medalla a la chapuza nos corresponde por derecho propio. En las olimpiadas de invierno de Salt Lake City 2002 acudimos con nuestra máxima estrella, un campeón de esquí nórdico, deporte exótico por estas latitudes, llamado Johann Mühlegg, que se había enfadado con su federación alemana y fichó, sin dudar, por la española. Hasta fue rebautizado popularmente como «Juanito» Mühlegg. Así, vestido de nuestros colores y enfundado en nuestra bandera, Juanito nos llenó de orgullo con tres medallas de oro, aunque fuera fugazmente, pues le fueron retiradas pocos años más tarde al descubrirse su irrefrenable afición por la química farmacéutica. Algo debieron olerse los alemanes, Aquí, lo clásico. No recuerdo que nadie pidiera perdón, fuera cesado o dimitiera.

He ilustrado hasta aquí algunos comportamientos ventajosos o dudosamente éticos en el deporte, aunque perfectamente legales. Tengo que añadir que en algunos deportes, casi siempre de origen británico, el código de honor es la regla sagrada. En la modalidad de billar *snooker*, cada vez más popular gracias a la televisión, los propios jugadores señalan al árbitro cuando cometen una leve falta, como tocar sutilmente con el taco una bola que no corresponde. Y qué decir del rugby, deporte duro donde los haya, pero en el que jamás se cuestiona una decisión arbitral o se actúa con brutalidad, a pesar de los frecuentes contactos y golpes que resultan de los lances del propio juego.

Pero dejemos el tema deportivo que ha servido de aperitivo a esta crónica y pasemos a la ciencia, de nuevo sin hablar de delitos. Las publicaciones científicas ofrecen un catálogo interminable de ejemplos. ¿Quién no ha sentido alguna vez la tentación irreprimible de omitir, en una tabla de resultados, algún caso que no funciona igual de bien que los demás? En síntesis orgánica es frecuente que, para ilustrar un nuevo método, se pruebe éste con distintos sustratos. Si alguno funciona peor, se borra de la lista y ya está. Y no sólo es por la vanidad de los autores. A ello contribuyen también los editores de las revistas, cada vez más deseosos de resultados brillantes que aumenten sus índices de impacto, por lo que son reacios a aceptar artículos que señalen las limitaciones del método propuesto. Ni unos ni otros se dan cuenta de que otros autores, cuando intenten emplear el método descrito y observen que en su caso no funciona, lo indicarán inmediatamente, y el descubrimiento dejará pronto de ser útil.

También a menudo se vulnera el orden que establece el método científico, anteponiendo los resultados a las hipótesis de trabajo. Es el llamado método *hark*, término inglés que significa «escuchar con atención», pero que también es acrónimo de *hypothesis after results are known*, práctica más común de lo que se cree. Sin embargo, la inmensa mayoría de faltas a la objetividad en las publicaciones científicas derivan de la vanidad de sus autores al intentar maximizar sus propios logros. Todos sabemos de famosos científicos, químicos o de otras áreas, que en sus conferen-

cias exponen sus resultados sin dar el mínimo crédito que merecen sus antecesores en el tema, ni siquiera quienes tuvieron, antes que ellos, la idea central del descubrimiento descrito. Casi nunca los mencionan, y a menudo sus charlas se convierten en tediosos discursos propagandísticos a la mayor gloria de su autor, ilustrados con impactantes archivos de *PowerPoint*, más propios de una convención de ventas que de un acto científico. ¿Qué sería del mundo si ellos no hubieran nacido? parecen decirnos. Otras veces, esas mismas «omisiones» aparecen también en sus publicaciones, si bien en estos casos subsiste un mayor riesgo, si algún *referee* escrupuloso les recuerda quién fue el pionero o verdadero descubridor de la idea que reclaman para sí mismos. Y aquí quiero detenerme brevemente en un par de «trucos» que he detectado a lo largo de mi vida académica, y que ilustran bien la falta de *Fair Play* de algunos autores. Hay casos en los que la cita al pionero es obligada, por tratarse de un trabajo relativamente conocido. Si ese descubridor no está al frente de un grupo potente, con una amplia productividad científica, está perdido, pues el famoso lleno de colaboradores que se apropia de la idea la desarrolla tanto que consigue que se hable más de él que del que en realidad la descubrió, y llega un momento en que el «invasor» publica un artículo de revisión, que por supuesto contiene la cita obligada, además de las suyas propias, mucho más abundantes, pero que tiene el efecto de que, a partir de entonces, deja ya de mencionar al pionero, mandando directamente al *review* que al respecto él mismo ha publicado, y en el que sí consta. La segunda táctica es incluso más sutil y perversa. Para prevenirse frente al revisor que le afea no citar al verdadero inventor, lo hace pero fuera de contexto. En lugar de figurar entre las primeras citas del texto, el artículo pionero es mencionado mucho más adelante, con una excusa marginal, como puede ser la preparación de un producto intermedio o en la parte experimental. Vanidad, sólo vanidad, todo vanidad...

Quiero finalizar con una mención a los argumentos basados en datos incompletos o sesgados, fórmula habitual en el mundo de la política. En una tertulia o debate literario, artístico, o incluso ideológico, cada uno intenta convencer a los demás de las tesis que defiende mediante argumentos dialécticos. Rara vez lo consigue, pues las ideas de los demás suelen ser tenaces, pero cuando el debate es entre científicos o sobre temas históricos o técnicos, las afirmaciones siempre se apoyan en datos, presentados como irrefutables. El problema aparece cuando los datos que se exponen en defensa de una opinión, son parciales o faltos de objetividad, pues sólo se mencionan los más favorables a las tesis de quien está hablando. Como en el ejemplo antes citado de la línea que falta en la tabla, los datos incompletos suelen causar impacto casi inmediato pero, como las mentiras, tienen las patas cortas y al final la verdad acaba prevaleciendo. Eso ocurre a veces en ciencia, ya que en otros órdenes de la vida la escasa memoria colectiva y la propaganda mediática casi siempre consiguen su propósito.

JAVIER DE MENDOZA

OBITUARIO

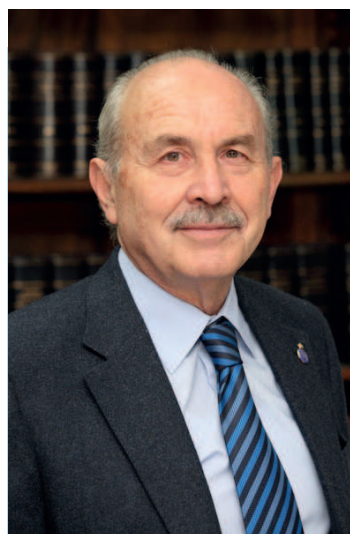
Semblanza de Carlos Pico Marín

In memoriam

Carlos Pico Marín, Catedrático de Química Inorgánica de la Facultad de Ciencias Químicas, en la Universidad Complutense de Madrid, desde 1983. Anteriormente, fue docente en las Universidades Autónoma de Madrid y de Santiago de Compostela. Fue Director del Departamento de Química Inorgánica en la UCM durante dos legislaturas.

Trabajó durante más de cuarenta años en docencia, gestión e investigación en el campo de la Química Inorgánica. Fue un excelente docente, siempre preocupado por la enseñanza rigurosa de la Química Inorgánica y, en su larga trayectoria, impartió prácticamente todas las asignaturas en todos los ciclos universitarios. Este interés le llevó a participar activamente en distintos ámbitos de discusión sobre aspectos formales de la enseñanza de la Química. Siempre le movió la corrección en el lenguaje, tanto en todos los documentos y trabajos desarrollados en el día a día, como en el propio lenguaje de la Química, la nomenclatura. De hecho, señalaba como aspectos fundamentales esta nomenclatura y el aprendizaje de la Tabla Periódica, y todas las posibilidades de esta última como herramienta de estudio y sistematización de los elementos químicos y sus compuestos. Y esta preocupación por la enseñanza de la Química le llevó también a participar como traductor o como corrector de diferentes textos como *Química Inorgánica. Unidades Didácticas* (UNED, 1979) y *Nomenclatura de Química Inorgánica. Recomendaciones de 1990* (RSEQ-Fundación Ramón Areces, 1990), entre otros. Más recientemente, este interés le llevó a trasladar su experiencia como docente e investigador a la elaboración de textos más especializados como *Cristaloquímica de Materiales. De la estructura a las propiedades de los sólidos inorgánicos* (Síntesis, 2007) y *Química del Estado Sólido* (Síntesis, 2017), dos textos muy consultados por estudiantes de Química Inorgánica de los diferentes cursos.

Como Catedrático de Química Inorgánica, muy consciente de la doble vertiente docente e investigadora del profesorado universitario, también tuvo una extensa trayectoria científica. Fue Director del Grupo de Investigación «Estructura y Reactividad de sólidos inorgánicos» (ERSI), constituido en el año 2006. Ha sido coautor de más de 200 trabajos de investigación, publicados en su gran mayoría en revistas de Química Inorgánica, Materiales y Estado Sólido de reconocido prestigio internacional. También participó en numerosos congresos nacionales e internacionales de



Carlos Pico Marín

su especialidad, presentando unas 250 comunicaciones (carteles, presentaciones orales y conferencias).

Su vocación e interés por establecer redes de trabajo entre distintos grupos investigadores a nivel nacional, le hicieron desarrollar un trabajo profundo dentro de la Real Sociedad Española de Química, de la que fue Presidente entre los años 1997 y 2001, y en la que también fue Vicepresidente y Secretario General. Además, fue cofundador del Grupo Especializado de Química Inorgánica (GEQI) en 1983.

Y, por encima de todo, Carlos fue un ser humano elegante, de trato educado, afable, exquisito y con gran capacidad para disfrutar de la vida y contagiar alegría. Siempre con una sonrisa. Era riguroso, estricto, con un gran «saber hacer», siempre dentro de la corrección y la templanza, cualidades que nos transmitió a todos los que tuvimos el placer de conocerle, trabajar con él y compartir momentos excelentes, en los cuales, Carlos siempre estuvo pendiente de que todo el mundo a su alrededor se sintiera a gusto.

Su recuerdo seguirá siempre entre nosotros. Descansa en paz, querido amigo y compañero.

DRA. M.^ª LUISA LÓPEZ GARCÍA
DRA. INMACULADA ÁLVAREZ SERRANO

Dpto. Química Inorgánica
Universidad Complutense de Madrid



CYRENE™

A bio-based alternative to petroleum-based DMF and NMP solvents



A SAFER SOLVENT

NMP and DMF are on the European ECHA list of substances of very high concern because of their mutagenic toxicity.¹

- In 2020, the ECHA implemented strict restrictions on the use of NMP within the EU²
- Cyrene™ does not contain the amide group associated with mutagenic toxicity and is therefore not subjected to the same regulatory restrictions as NMP and DMF¹

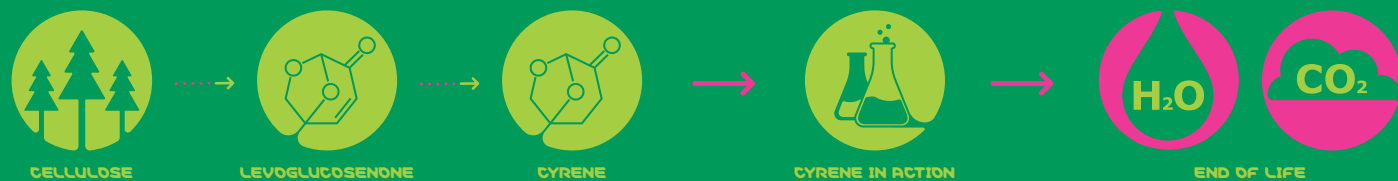
A SMALLER FOOTPRINT³

When compared to other solvents, Cyrene™ has a drastically smaller cradle-to-gate global warming potential (kg CO₂e/kg Solvent).



IPCC 2013 Impact Assessment Method

A SUSTAINABLE OPTION



Solvents constitute more than half the waste of a typical pharmaceutical process.⁴

Cyrene™ does not contain chlorine, sulfur, or nitrogen heteroatoms, which can present pollution issues or create corrosive by-products if incinerated.¹⁻⁵

The production of Cyrene™ is energy neutral and sustainable. It is produced in only two steps from waste cellulose and releases only carbon dioxide and water at end of life.¹⁻⁶