

Funcionalización C-H catalizada por paladio de aminoácidos y derivados dirigida por el grupo 2-piridilsulfonilo

Nuria Rodríguez, Ramón Gómez Arrayás y Juan Carlos Carretero



## Anales de Química de la RSEQ

Revista editada en Madrid por 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.<sup>a</sup> 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 Lluís Simarro Lacabra, Xàtiva, Valencia*

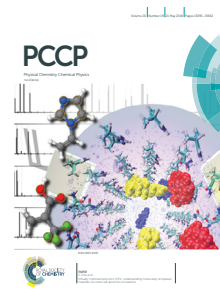
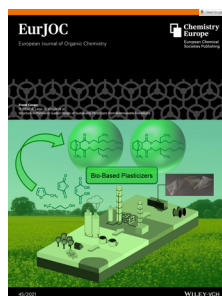
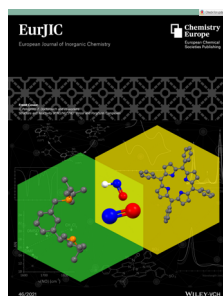
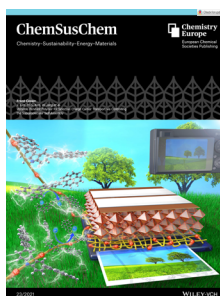
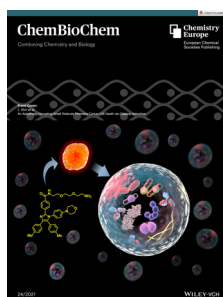
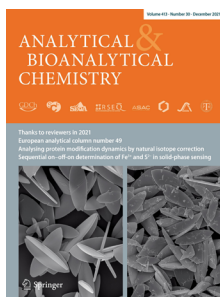
### Secretaría Editorial

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

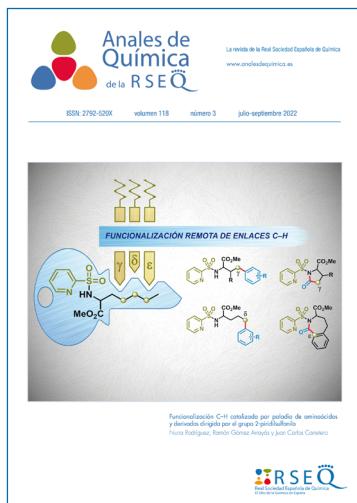
[www.analesdequimica.es](http://www.analesdequimica.es)  
[administracion@analesdequimica.es](mailto:administracion@analesdequimica.es)



## Revistas patrocinadas por la Real Sociedad Española de Química



Sumario



Composición:  
Palabra de apache

An. Quím., 118 (2), 2022, 69-145  
ISSN: 2792-520X  
e-ISSN: 2792-5250  
D. L.: M-232-1958

<b>Editorial</b> .....	150
Miguel Ángel Sierra	
<b>Investigación Química</b>	
Funcionalización C–H catalizada por paladio de aminoácidos y derivados dirigida por el grupo 2-piridilsulfonilo .....	152
Nuria Rodríguez, Ramón Gómez Arrayás y Juan Carlos Carretero	
Estructuras químicas sin cristales: La función de distribución de pares .....	157
Isabel del Castillo-Velilla, Carmen Montoro y Ana E. Platero-Prats	
<b>Enseñanza de la Química</b>	
El valor educativo de la historia de la química para las aulas de secundaria .....	163
Luis Moreno Martínez	
Despertando la vocación científica en los jóvenes a través de actividades de divulgación en química .....	172
Adrián Fuente-Ballesteros, Ana M <sup>a</sup> Ares Sacristán y José Bernal del Nozal	
Validación del uso de medidores de pH de bajo coste en valoraciones ácido/base .....	177
Antonio Tomás-Serrano y Marta Pastor-Belda	
Aproximación histórica al principio de le Châtelier: aceptación, cuestionamiento, problemas de enseñanza y dificultades de aprendizaje. Implicaciones didácticas .....	185
Juan Quílez	
La cámara termográfica: una seductora herramienta didáctica .....	192
Fernando I. de Prada Pérez de Azpeitia	
El movimiento STEM en el currículo: origen, fundamentación y análisis crítico .....	199
Juan Quílez	
<b>Noticias</b> .....	206
<b>Artículos reseñables</b> .....	213
<b>Reseña.</b> Química en las universidades europeas del siglo XIX, Santiago Álvarez .....	214
<b>Radicales (muy) libres</b> .....	216

# EDITORIAL

Miguel Á. Sierra

Tengo el corazón partido en dos. Y no es que no lo esperásemos. Como dice Sabina “se mascaba en los billares que el Rayo había bajado a segunda”. Pues sí, ya es definitivo, *Organometallics* está en Q2 en sus dos áreas de referencia: orgánica e inorgánica. Otro icono de mi juventud que cae. Junto con *Chemistry: a European Journal* que “descendió a segunda” hace unos años, son dos revistas de referencia en Química que van, si la bibliometría y la moda no lo remedian, hacia (otra vez Sabina) “donde habita el olvido”. Y lo contento que me puse cuando hace muchos, muchos años publiqué mi primer trabajo como “corresponding author” en *Organometallics*. Guardo la carta de aceptación con un comentario manuscrito de Dietmar Seyferth con cariño. Eran otros tiempos. El que un editor hiciese un comentario a mano en una carta escrita en papel os da idea del tiempo que ha pasado. Pero lo que no ha pasado es la categoría de una revista que, independientemente de los rankings de *Journal Citation Reports* sigue siendo una referencia en Química (ni orgánica, ni inorgánica, en Química).

Este sucedido, como diría uno de los editores asociados de Anales de Química, no es más que la punta del iceberg de un problema muy serio, que amenaza con acabar con el sistema de evaluación, revisión por pares y promoción a nivel mundial. Y lo que es más grave, con la calidad de la Ciencia. Los juegos editoriales dirigidos a producir el mayor número de páginas (los electrones pesan poco y ocupan poco espacio, con unos cuantos teras se publican todas las páginas necesarias), a subir sus factores de impacto y a conseguir un trozo lo más grande posible del pastel del “Open Access”, están causando un daño que, como el calentamiento global, está a punto de ser irreversible.

Uno de los ejemplos más claros de lo que está sucediendo es MDPI. El éxito de esta editorial en España es tal que, según el estudio publicado por la ANECA en 2019 sobre la contribución española a las revistas “Open Access” (estudio que, como se ha comentado en Anales de Química, causó



un revuelo considerable), los investigadores españoles publicaron en esta editorial 11870 artículos durante el periodo 2017-2019 (multiplicad por el coste medio de cada artículo y os salen cifras que dan escalofríos). La estrategia seguida por MDPI ha sido invitar a editores de número para que, a su vez, inviten a sus colegas a contribuir en ese número. Obviamente, esta estrategia, beneficia a todo el mundo. El editor del número incrementa su currículo, los investigadores se aseguran un artículo y todo el mundo gana. La evaluación por pares en muchos casos (ojo, no en todos) deja mucho que desear. Paralelamente MDPI multiplicó exponencialmente el número de revistas en química y áreas afines. Resultado: una parte importante de las revistas relacionadas con la química en MDPI tienen factores de impacto superiores o muy próximos a las revistas “clásicas”.

La estrategia de MDPI es brillante (no lo digo yo, lo dicen los miembros de los comités de publicación de distintas sociedades y empresas editoriales) y su éxito se refleja en los índices de impacto de sus revistas y en los beneficios que obtiene la editorial. Esto no sería más que una anécdota si las demás editoriales, de forma paralela, no hubiesen multi-

plicado también exponencialmente el número de revistas. La ACS, por mencionar una editorial con fama de intachable, ha pasado de 16 revistas en 2000 a 66 revistas en 2021 (más o menos, lo he hecho a mano sobre JCR). Impresionante. Esto no es nada para la que se avecina. Resultado, más revistas con más revistas específicas en áreas generales (las clásicas de la química). Los cuartiles se tambalean. Además, en lugar de abrir más áreas en el análisis bibliométrico (algo que va por supuesto contra la multi- e interdisciplinariedad de la química) se mantienen las mismas desde hace 40 años. Resultado, las nuevas áreas, con factores de impacto muy altos (lo que no significa por supuesto una mayor calidad) se comen a las áreas más clásicas. Como decía una alcaldesa de Madrid "es que no se pueden mezclar peras con manzanas". Para más confusión las primeras revistas de cada área son revistas que solo publican reviews. Eso hace que la estructura por cuartiles de desmorone.

En medio de esta espiral de locura va y aparece Sci-Hub. La idea detrás de Sci-Hub es brillante, ilegal como el demonio, pero brillante. Hablar de esto en un comité editorial es como mentar la soga en casa del ahorcado. ¿Que hay detrás de la magnífica idea del Open Access? Pues estos motores de búsqueda de puertas traseras para entrar en las editoriales y acceder a artículos gratis. Menciono Sci-Hub pero hay otros cuando menos igualmente eficientes. La iniciativa mundial del Open Access significa, en última instancia, dar dinero público a las editoriales para pagar publicaciones que se han hecho con dinero público, además de mantener los pagos de las suscripciones, también sufragados, en la inmensa mayoría de los casos, con fondos públicos. Vamos, como hasta ahora pero más caro. No es este el tema de esta editorial, pero si publicar un artículo *Au cuesta* (en *Organometallics*) 4000 \$, suponiendo que lean el artículo 200 personas (que es mucho suponer), son 20 \$ *per capita*. Alquilar un artículo "en cerrado" para leerlo cuesta entre 15 y 30\$. En castellano se llama hacer pan con hostias.

Lo malo es que las editoriales tienen una serie de revistas Open Access en donde recalcan los artículos que rechazan en las revistas de más índice de impacto de esas mismas editoriales. Resultado, más confusión. Los factores de impacto de algunas de estas revistas están subiendo y amenazan a las revistas clásicas. Por prudencia no voy a mencionar nombres, pero todos las conocemos. Por lo menos tenemos la esperanza de que estos artículos estén bien revisados.

Como veis y sabéis el panorama es confuso y lo va a ser más. Los factores de impacto como medida de la calidad de un artículo son parcialmente, solo parcialmente, válidos. La clasificación por cuartiles y en algunos casos deciles para medir esta calidad es cuestionable. Que esto preocupa a nivel internacional es claro. La declaración de San Francisco sobre la Evaluación de la Investigación (DORA), que ya están aplicando distintas agencias de evaluación, es un paso importante. En esta declaración, de la que soy firmante (en nombre propio, no como director de publicaciones de la RSEQ) se indica literalmente "El factor de impacto, calculado por Thomson Reuters, se creó originalmente como una herramienta para ayudar a los bibliotecarios a identificar revistas para comprar, no como una medida de la calidad científica de la investigación en un artículo". El nivel de locura al que hemos llegado con el bendito factor de impacto, tiene consecuencias importantes en la carrera y en el futuro de personas. Por tanto, basar una decisión exclusivamente en este factor es, cuando menos, una temeridad y puede llevar a injusticias muy serias.

Desgraciadamente no es tan fácil. Un comité que tiene que evaluar un número alto de solicitudes necesita disponer de un número en el que sostener sus decisiones, número que además no debe ser recurrible. Para nuestro mal, ese número es, casi siempre, el factor de impacto. Si como ya hacen los holandeses y algunas agencias de evaluación europeas y españolas (sí, españolas, por una vez no vamos detrás de los europeos), seguimos las directrices DORA estamos en el camino adecuado. Los americanos (los del norte) lo han hecho siempre. La diferencia en los sistemas y los criterios de evaluación se traduce en los resultados de la ciencia en Estados Unidos que, hasta ahora, han sido superiores a los de Europa. No todo es cuestión de dinero, aunque no vendría nada mal que nos dejáramos en este país de palabrería política y empezásemos a invertir de verdad en Ciencia.

De momento, y aunque esté en segunda división mi corazón está con *Organometallics* y seguiré, si puedo, publicando en esta revista.

Gracias por leer.

MIGUEL A. SIERRA  
Editor General de Anales de Química.

INVESTIGACIÓN  
QUÍMICA



N. Rodríguez<sup>1,2,3</sup>

R. Gómez Arrayás<sup>1,2,3</sup>



J. C. Carretero<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Dpto. de Química Orgánica. Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma de Madrid (UAM). Cantoblanco 28049 Madrid.

<sup>2</sup>Institute for Advanced Research in Chemical Sciences (IAChem). UAM.

<sup>3</sup>Center for Innovation in Advanced Chemistry (ORFEO-CINQA). UAM.

C-e: [juancarlos.carretero@uam.es](mailto:juancarlos.carretero@uam.es)

Recibido: 23/07/2022

Aceptado: 26/07/2022

ORCID: 0000-0003-4822-5447

# Funcionalización C–H catalizada por paladio de aminoácidos y derivados dirigida por el grupo 2-piridilsulfonilo

Nuria Rodríguez, Ramón Gómez Arrayás  
y Juan Carlos Carretero 

**Resumen:** Los aminoácidos presentan una importancia crucial en múltiples ámbitos. En este artículo se describen diversas reacciones de funcionalización C–H catalizada por paladio en varias posiciones de la cadena carbonada. Concretamente se han desarrollado métodos robustos y selectivos de  $\gamma$ - y  $\delta$ -arilación, así como  $\gamma$ - y  $\varepsilon$ -carbonilación con formación de  $\gamma$ -lactamas y benzazepinonas, respectivamente. Estos procedimientos se han extendido igualmente a pequeños péptidos. En todas las reacciones desarrolladas el grupo coordinante  $\text{SO}_2\text{Py}$  unido al nitrógeno del aminoácido desempeña un rol clave y puede eliminarse mediante métodos reductores suaves.

**Palabras clave:** Funcionalización C–H, paladio, aminoácidos, sulfonas, piridina.

**Abstract:** The amino acids are of crucial importance in many research areas. This article describes a variety of C–H functionalization reactions of amino acids catalyzed by Pd in diverse positions of the carbon chain. In particular, we have developed robust and selective procedures for the  $\gamma$ - and  $\delta$ -arylation, as well as  $\gamma$ - and  $\varepsilon$ -carbonylation with formation of  $\gamma$ -lactams and benzazepinones, respectively. These methodologies have been also extended to small peptides. In all these C–H functionalization reactions the coordinating group  $\text{SO}_2\text{Py}$  plays a crucial role and can be eliminated in the final products under mild reductive conditions.

**Keywords:** C–H Functionalization, palladium, amino acids, sulfones, pyridine.

## Introducción

Por definición el enlace C–H es omnipresente en los compuestos orgánicos, sea cual sea su naturaleza. No es de extrañar por tanto que la manipulación de este enlace de forma selectiva, como si se tratara de *un grupo funcional más*, sea una de las fronteras de la síntesis orgánica actual, denominada genéricamente como reacciones de activación o funcionalización C–H.<sup>[1]</sup>

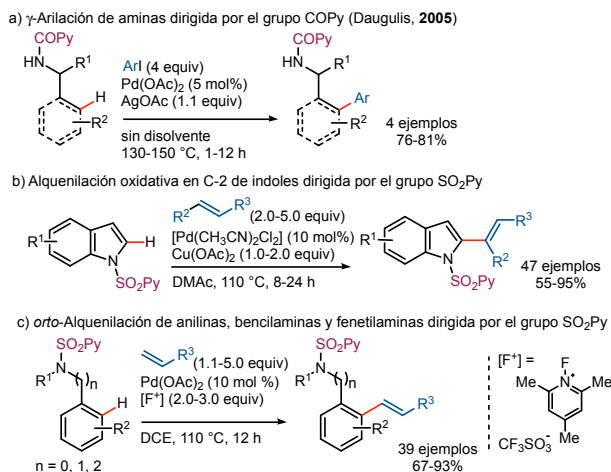
La estrategia más comúnmente utilizada consiste en el empleo de un grupo director coordinante que facilite conformationalmente la interacción del metal con un enlace C–H determinado con la resultante formación del metalociclo intermedio clave.<sup>[2]</sup> En este contexto, el grupo picolinamida (COPy), inicialmente utilizado por Daugulis en 2005 en la reacción de  $\gamma$ -arilación de aminas catalizada por paladio<sup>[3]</sup> (Figura 1A), ha sido ampliamente utilizado.

En 2009 nuestro grupo investigador introdujo un grupo director estructuralmente relacionado, el grupo 2-piridilsulfonilo ( $\text{SO}_2\text{Py}$ ), en la reacción de alquienilación oxidativa

en C-2 de indoles catalizada por paladio<sup>[4]</sup> (Figura 1B), posteriormente extendida en 2011 al caso de la *orto*-alquienilación de anilinas, bencilaminas y fenetilaminas<sup>[5]</sup> (Figura 1C).

Estos resultados iniciales nos incitaron a explorar su potencial aplicación a reacciones de funcionalización selectiva C(sp<sup>3</sup>)–H, que constituye un reto más complejo que la funcionalización C(sp<sup>2</sup>)–H. Por su interés transversal en múltiples ámbitos nos centramos preferentemente en la funcionalización C–H en aminoácidos.

En este artículo se resumen los resultados obtenidos por nuestro grupo en este campo durante los últimos años, los cuales muestran el amplio potencial del grupo coordinante  $\text{SO}_2\text{Py}$  en reacciones de funcionalización C–H catalizadas por paladio, así como su carácter diferencial a nivel sintético y mecanístico respecto al grupo COPy. Concretamente, a continuación se describen diversos métodos altamente selectivos de funcionalización C–H en posiciones  $\gamma$ ,  $\delta$ , o  $\varepsilon$  de aminoácidos y pequeños péptidos, con especial atención a las reacciones de arilación y de carbonilación.

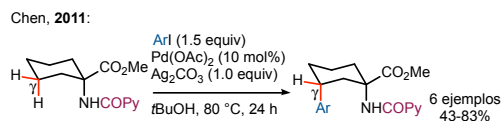


**Figura 1.** Precedentes de Daugulis y de nuestro laboratorio en reacciones de funcionalización C(sp<sup>2</sup>)-H dirigidas por el grupo COPy y SO<sub>2</sub>Py.

## Reacciones de funcionalización $\gamma$ -C(sp<sup>3</sup>)-H en aminoácidos

### Reacción de $\gamma$ -arilación

En 2011 Chen y col. describieron la  $\gamma$ -arilación de aminoácidos conformacionalmente restringidos (ciclohexilaminoácidos) dirigida por el grupo COPy (Figura 2).<sup>[6]</sup>



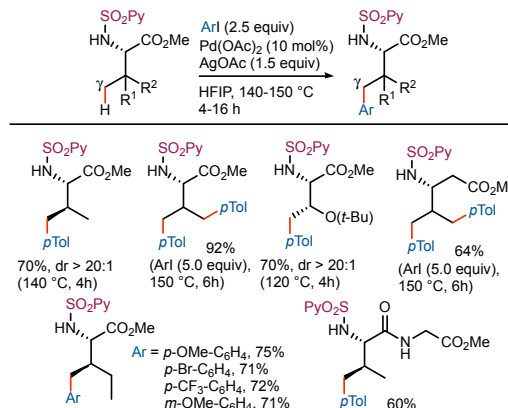
**Figura 2.** Precedente de Chen en la reacción de  $\gamma$ -arilación de aminoácidos dirigida por el grupo COPy.

En nuestro laboratorio abordamos el caso más general de la reacción de arilación de aminoácidos naturales acíclicos protegidos con el grupo SO<sub>2</sub>Py en el átomo de nitrógeno.<sup>[7]</sup> Como aminoácido modelo escogimos el éster metílico de la valina. Tras una amplia experimentación utilizando yodoarenos como agentes arilantes encontramos que en presencia de 10mol% de Pd(OAc)<sub>2</sub>, AgOAc como oxidante terminal y hexafluoroisopropanol (HFIP) como disolvente era posible la arilación selectiva del metilo  $\gamma$  y de la valina. En función de la cantidad del yodoareno y el tiempo de reacción fue posible controlar tanto la monoarilación como la diarilación de ambos metilos sin observarse racemización de la potencialmente lábil posición  $\alpha$ .

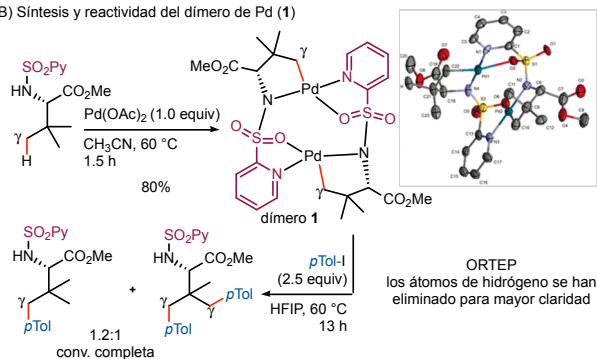
Esta reacción se extendió satisfactoriamente a otros aminoácidos con metilos en posición  $\gamma$ , tales como la treonina, la isoleucina, los  $\beta$ -aminoácidos o el dipéptido valina-glicina (Figura 3A). En cuanto a la desprotección final del grupo director SO<sub>2</sub>Py, a diferencia de otros tipos de sulfonamidas, la ruptura del enlace N-S se llevó a cabo fácilmente en condiciones reductoras por tratamiento con Zn.

En la exploración mecanística del proceso resultó de gran interés la reacción del sustrato modelo derivado de valina con una cantidad estequiométrica de Pd(OAc)<sub>2</sub> en ausencia del yodoareno. En esta reacción se aisló con un 80% de rendimiento el dímero **1** (Figura 3B), que muestra una estructura de paladacíclico de cinco miembros (enlace C $\gamma$ -Pd) con la esperada coordinación del átomo de Pd a los nitrógenos sulfonamídico y piridínico. Este tipo de coordinación en torno al átomo de Pd en el paladaciclo clave de cinco miembros explicaría la falta de reactividad de otras sulfonamidas ensayadas (por ejemplo, N-Ts) o de aminoácidos carentes de un metilo en posición  $\gamma$  (por ejemplo alanina). A su vez este paladaciclo intermedio ha sido utilizado posteriormente en nuestro laboratorio de forma sistemática como banco de pruebas en la exploración de la reactividad con otros electrófilos.

### A) $\gamma$ -Arlación de aminoácidos dirigida por el grupo SO<sub>2</sub>Py



### B) Síntesis y reactividad del dímero de Pd (**1**)



**Figura 3.**  $\gamma$ -Arlación de aminoácidos dirigida por el grupo SO<sub>2</sub>Py.

### Reacción de $\gamma$ -carbonilación: formación de $\gamma$ -lactamas

El estudio por RMN de la reacción del paladaciclo **1** con Mo(CO)<sub>6</sub> (o en atmósfera de CO) resultó ser de especial relevancia, pudiéndose aislar y caracterizar por RMN, IR y EM el paladaciclo monomérico intermedio **2**, con coordinación Pd-CO ( $\nu = 2095$  cm<sup>-1</sup>). Este complejo evoluciona espontáneamente a la correspondiente  $\gamma$ -lactama mediante inserción de la unidad de CO y eliminación reductora (Figura 4A).

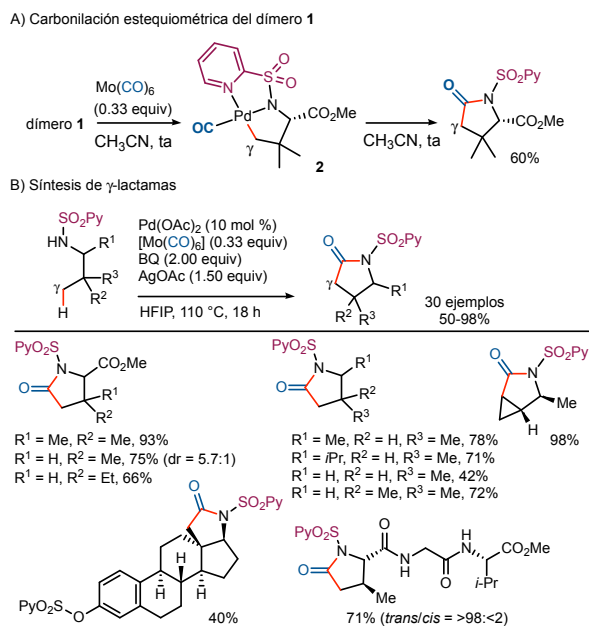


Figura 4. Reacción de  $\gamma$ -carbonilación: Síntesis de  $\gamma$ -lactamas.

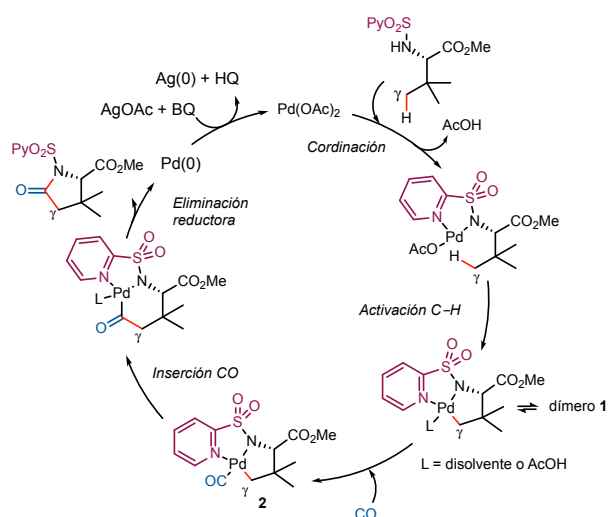


Figura 5. Ciclo catalítico propuesto para la formación de  $\gamma$ -lactamas dirigida por el grupo SO<sub>2</sub>Py

El desarrollo de la variante subestequiométrica [10 mol% Pd(OAc)<sub>2</sub>] se llevó a cabo utilizando Mo(CO)<sub>6</sub> (0,33 equiv.) y la combinación AgAcO/*p*-benzoquinona como agente de oxidación final Pd(0)/Pd(II).<sup>[8]</sup> Bajo estas condiciones de reacción una amplia variedad de aminoácidos y amins protegidos con el grupo SO<sub>2</sub>Py se transformaron en las correspondientes  $\gamma$ -lactamas sin observarse epimerización de la posición  $\alpha$ . Este procedimiento demostró ser muy robusto pudiéndose aplicar también a la activación selectiva en posición metilénica en ciclopropanos (activación  $\gamma$ -CH<sub>2</sub>), a sustratos estructuralmente complejos (por ejemplo, esteroides) o altamente funcionalizados (por ejemplo, tripéptido

SO<sub>2</sub>Py-valina-glicina-valina), lo que pone de manifiesto la generalidad sintética de esta reacción (Figura 4B).

Los estudios de deutерación y cálculos detallados de DFT del mecanismo de reacción apuntan al ciclo catalítico indicado en la Figura 4, transcurriendo las etapas de activación C-H e inserción CO con estados de transición próximos en energía y siendo la etapa de carbonilación en el enlace Pd-C completamente irreversible.

### Competencia carbonilación $\epsilon$ -C(sp<sup>2</sup>-H) / $\gamma$ -C(sp<sup>3</sup>-H): síntesis de benzazepinonas

Los derivados de aminoácido con un grupo arilo en posición  $\gamma$  presentan un interés añadido pues la reacción de carbonilación catalizada por Pd podría tener lugar por activación del enlace C(sp<sup>2</sup>)-H en posición  $\epsilon$ , con formación de una benzazepinona, o del enlace C(sp<sup>3</sup>)-H benílico en posición  $\gamma$ . En las condiciones habituales de reacción y en dioxano como disolvente la reacción transcurrió con alta o completa selectividad a favor de la formación de la benzazepinona,<sup>[9]</sup> especialmente en sustratos con arilos ricos en electrones, lo que ilustra una vez más la mayor facilidad de la activación C(sp<sup>2</sup>)-H frente a la C(sp<sup>3</sup>)-H, incluso cuando la primera tendría lugar a través de un paladacilo de 7 miembros (detectado por ESI-HRMS) en lugar de un paladacilo de 5 miembros entrópicamente más favorable.

Tal como se indica en la Figura 6A el método pudo aplicarse a una gran variedad de sustratos con sustituyentes muy diversos, incluidos pequeños péptidos o la síntesis del

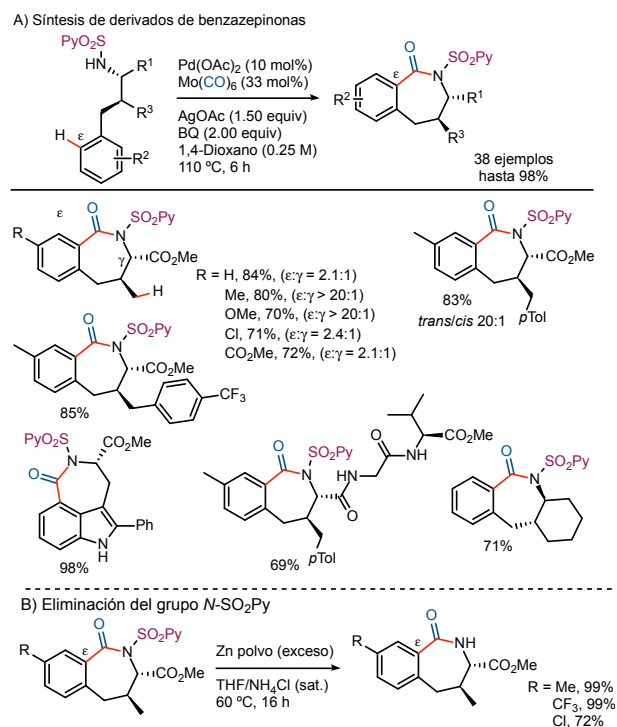


Figura 6. Reacción de carbonilación  $\epsilon$ -C(sp<sup>2</sup>-H): Síntesis de benzazepinonas.



análogo indólico del rucaparib (fármaco aprobado para el tratamiento del cáncer de ovario). Al igual que en las demás reacciones la unidad SO<sub>2</sub>Py se desprotegió finalmente por tratamiento reductor (Zn, NH<sub>4</sub>Cl) (Figura 6B).

El estudio DFT de los cursos potenciales de reacción reveló que mientras que la activación ε-C(sp<sup>2</sup>-H) es reversible y cinéticamente más favorable, el proceso γ-C(sp<sup>3</sup>-H) con formación final de una γ-lactama es el termodinámicamente favorecido.<sup>[10]</sup> Este estudio computacional dio pie a buscar condiciones alternativas de reacción dirigidas al control termodinámico del proceso, especialmente aquellas que favorecieran la etapa de inserción CO en el paladacilo intermedio de cinco miembros. Concretamente la adición de AcOH y el uso de un disolvente muy polar (HFIP) permitió el acceso altamente selectivo a las correspondientes γ-lactamas (Figura 7).

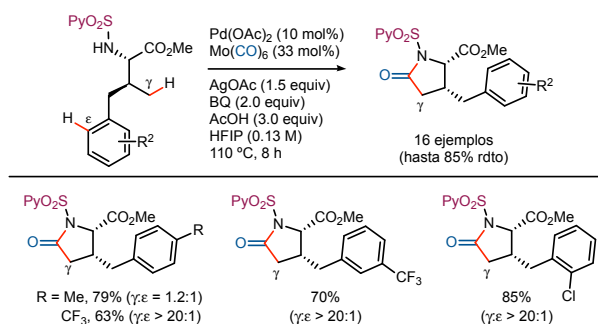


Figura 7. Control selectivo de la carbonilación en posición  $\gamma$ .

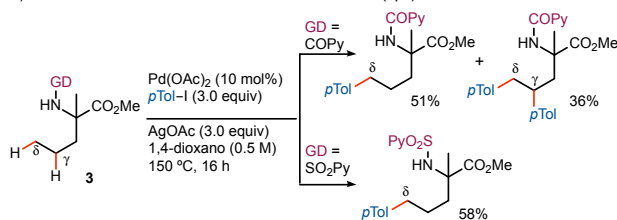
## Reacciones de funcionalización $\delta$ -C(sp<sup>3</sup>)-H en aminoácidos

La activación  $\delta$ -C(sp<sup>3</sup>)-H catalizada por paladio supone un reto muy superior a la correspondiente activación en posición  $\gamma$ , al implicar la participación de un paladacilo de seis miembros, cinéticamente mucho menos favorecido que el de cinco eslabones.<sup>[11]</sup> Concretamente nos centramos inicialmente en la reacción de arilación en posición  $\delta$ , en la que los únicos precedentes existentes utilizando COPy como grupo director requerían el empleo de sustratos cíclicos conformacionalmente restringidos o el bloqueo de la posición  $\gamma$ .<sup>[12]</sup>

Efectivamente, utilizando como sustrato modelo el derivado de aminoácido acíclico **3**, con las posiciones  $\gamma$ -CH<sub>2</sub> y  $\delta$ -CH<sub>3</sub> potencialmente accesibles, observamos que la reacción con *p*-Tol-I catalizada por Pd empleando COPy como grupo director condujo muy mayoritariamente al producto esperado de funcionalización en la posición  $\gamma$ -CH<sub>2</sub> (Figura 8A). Por el contrario, para nuestra gran satisfacción, el grupo SO<sub>2</sub>Py presentó una quimioselectividad muy diferente, con completo control hacia la arilación en la posición terminal  $\delta$ -CH<sub>3</sub>.<sup>[13]</sup>

En la Figura 8B se muestra el alcance estructural de esta reacción una vez optimizadas las condiciones de reacción. Se obtuvieron moderados o buenos rendimientos en producto

### A) Evaluación del GD en la arilación del enlace $\delta$ -C(sp<sup>3</sup>)-H



### B) Arilación $\delta$ -C(sp<sup>3</sup>)-H en aminas y aminoácidos dirigida por el grupo SO<sub>2</sub>Py

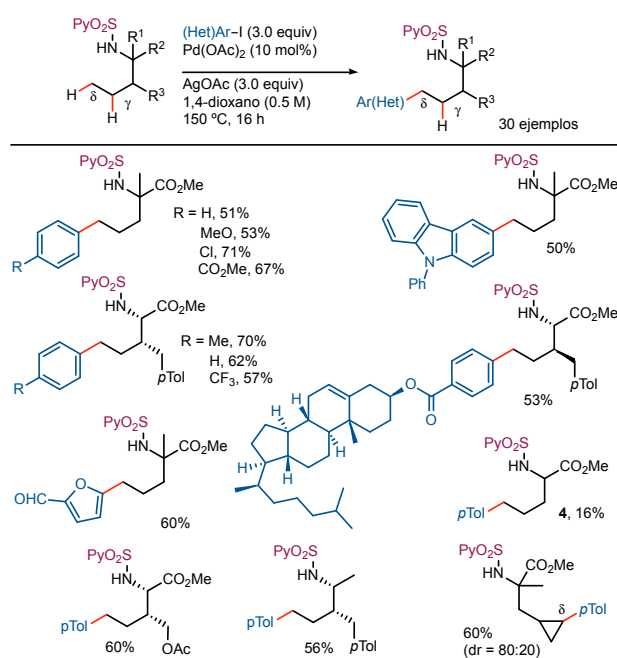


Figura 8. Reacción de  $\delta$ -arilación de aminoácidos y derivados de aminas.

puro  $\delta$ -arilado (50-71%) en todos los casos salvo para el derivado de aminoácido **4** (16%) que no presenta ni sustitución en posición  $\alpha$  ni  $\beta$ .

Los cálculos DFT del curso de la reacción proporcionaron una información muy relevante en cuanto al comportamiento tan dispar entre los grupos coordinantes COPy y SO<sub>2</sub>Py. Así, el paladacilo intermedio COPy de seis miembros resultó ser termodinámicamente bastante menos estable que el paladacilo SO<sub>2</sub>Py, fruto de la mayor planaridad del primero debida a la coordinación del Pd con el nitrógeno amidico sp<sup>2</sup> (a diferencia del nitrógeno sulfonamídico sp<sup>3</sup>). Este factor estructural proporciona al paladacilo SO<sub>2</sub>Py una conformación claramente de tipo silla, más estable y con menor distorsión de la planaridad en torno al átomo de Pd, lo que determina finalmente que en este caso el proceso de  $\delta$ -paladación sea más favorable e irreversible (Figura 9).

Es importante destacar que este comportamiento tan distinto entre ambos grupos directores no es específico de la reacción de arilación, sino que es extensible a otros procesos actualmente en curso en nuestro laboratorio tales como las reacciones de  $\delta$ -acetoxilación y la alquenilación remota intramolecular de péptidos.

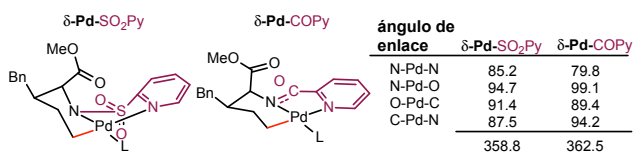


Figura 9. Estructura y ángulos de enlace de los paladacidos  $\delta$ -Pd-SO<sub>2</sub>Py y  $\delta$ -Pd-COPy.

## Conclusiones

En resumen, el grupo *N*-2-piridilsulfonilo, fácilmente instalable y eliminable, constituye una eficaz herramienta para la funcionalización C-H catalizada por paladio de aminoácidos y derivados de amins. Entre las reacciones hasta ahora desarrolladas, no factibles con otros grupos directores relacionados, cabe destacar los procesos selectivos de  $\gamma$ - y  $\delta$ -arilación, así como la  $\gamma$ - y  $\varepsilon$ -carbonilación con formación de  $\gamma$ -lactamas y benzazepinonas, respectivamente. El carácter robusto de los procedimientos desarrollados ha permitido su extensión a otros sustratos nitrogenados, incluida la funcionalización C-H en pequeños péptidos.

## Agradecimientos

Expresamos nuestro agradecimiento al MICINN/FEDER por su continuada financiación al grupo (Proyectos CTQ2012-35790, CTQ2015-66954-P y PGC2018-098660-B-I00).

## Bibliografía

- [1] T. Rogge, N. Kaplaneris, N. Chatani, J. Kim, S. Chang, B. Punji, L. L. Schafer, D. G. Musaev, J. Wencel-Delord, C. A. Roberts, R. Sarpong, Z. E. Wilson, M. A. Brimble, M. J. Johansson, L. Ackermann, *Nat. Rev. Methods Primers* **2021**, *1*, 43.
- [2] Reseñas seleccionadas: a) C. Sambigioglio, D. Schönbauer, R. Blicke, T. Dao-Huy, G. Pototschnig, P. Schaaf, T. Wiesinger, M. F. Zia, J. Wencel-Delord, T. Besset, B. U. W. Maes, M. Schnürch, *Chem. Soc. Rev.* **2018**, *47*, 6603-6743; b) P. Gan-

- deepan, L. Ackermann, *Chem* **2018**, *4*, 199-222; c) G. Meng, N. Y. S. Lam, E. L. Lucas, T. G. Saint-Denis, P. Verma, N. Chekshin, J.-Q. Yu, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 10571-10591.
- [3] V. G. Zaitsev, D. Shabashov, O. Daugulis, *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 13154-13155.
- [4] a) A. García-Rubia, R. Gómez Arrayás, J. C. Carretero, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2009**, *48*, 6511-6515. Ver también: b) A. García-Rubia, B. Urones, R. Gómez Arrayás, J. C. Carretero, *Chem.-Eur. J.* **2010**, *16*, 9676-9685.
- [5] A. García-Rubia, B. Urones, R. Gómez Arrayás, J. C. Carretero, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2011**, *50*, 10927-10931.
- [6] G. He, G. Chen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 5192-5196.
- [7] N. Rodríguez, J. A. Romero-Revilla, M. A. Fernández-Ibáñez, J. C. Carretero, *Chem. Sci.* **2013**, *4*, 175-179.
- [8] E. Hernando, J. Villalva, A. M. Martínez, I. Alonso, N. Rodríguez, R. Gómez Arrayás, J. C. Carretero, *ACS Catal.* **2016**, *6*, 6868-6882.
- [9] M. Martínez-Mingo, N. Rodríguez, R. Gómez Arrayás, J. C. Carretero, *Org. Lett.* **2019**, *21*, 4345-4349.
- [10] M. Martínez Mingo, I. Alonso, N. Rodríguez, R. Gómez Arrayás, J. C. Carretero, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 1590-1601.
- [11] a) J. Das, S. Guin, D. Maiti, *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 10887-10909; b) Q. Zhang, B.-F. Shi, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 841-852; M. Martínez Mingo, N. Rodríguez, R. Gómez Arrayás, J. C. Carretero, *Org. Chem. Front.* **2021**, *8*, 4914-4946; c) S. Sen, J. Das, D. Maiti, *Tetrahedron Chem* **2022**, *1*, 100005.
- [12] a) S. Guin, P. Dolui, X. Zhang, S. Paul, V. K. Singh, S. Pradhan, H. B. Chandrashekar, S. S. Anjana, R. S. Paton, D. Maiti, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 5633-5638; b) H. Lin, X. Pan, A. L. Barsamian, T. M. Kamenecka, T. D. Bannister, *ACS Catal.* **2019**, *9*, 4887-4891; c) Y.-Q. Chen, Z. Wang, Y. Wu, S. R. Wisniewski, J. X. Qiao, W.R. Ewing, M. D. Eastgate, J.-Q. Yu, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 17884-17894; d) W. Cui, S. Chen, J.-Q. Wu, X. Zhao, W. Hu, H. Wang, *Org. Lett.* **2014**, *16*, 4288-4291; e) S.-Y. Zhang, G. He, W. A. Nack, Y. Zhao, Q. Li, G. Chen, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 2124-2127; f) G. He, Y. Zhao, S. Zhang, C. Lu, G. Chen, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 3-6; g) E. T. Nadres, O. Daugulis, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 7-10.
- [13] M. Martínez Mingo, A. Garcia-Viada, I. Alonso, N. Rodríguez, R. Gómez Arrayás, J. C. Carretero, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 5310-5317.

INVESTIGACIÓN  
QUÍMICA



C. Montoro, I. del Castillo-Velilla  
y A. E. Platero-Prats

Universidad Autónoma de Madrid,  
Facultad de Ciencias  
Departamento de Química  
Ciudad Universitaria de Cantoblanco,  
28049 Madrid  
C-e: [ana.platero@uam.es](mailto:ana.platero@uam.es)  
Recibido: 04/05/2022  
Aceptado: 14/07/2022  
ORCID: 0000-0002-2248-2739

# Estructuras químicas sin cristales: La función de distribución de pares

Isabel del Castillo-Velilla, Carmen Montoro  
y Ana E. Platero-Prats

**Resumen:** La función de distribución de pares o, en inglés *Pair Distribution Function* (PDF), es una técnica de caracterización que permite estudiar la estructura atómica de compuestos químicos que no tienen por qué ser cristalinos. En este trabajo se aborda la aplicación del análisis por PDF en el campo de los materiales nanoporosos. Concretamente, se describirá el uso de esta técnica de caracterización en las redes metal-orgánicas, donde no para de ganar importancia debido a su versatilidad y potencial para elucidar estructuras complejas, tanto a escala local como intermedia.

**Palabras clave:** Función de distribución de pares, Redes metal-orgánicas (MOFs), Estructura local, Defectos.

**Abstract:** The Pair Distribution Function (PDF) is a characterization technique that allows studying the atomic structure of chemical compounds even if they are not crystalline. In this article, we discuss the application of PDF analyses in the field of nanoporous materials. Specifically, the use of this characterization technique will be described for metal-organic frameworks, where it does not stop gaining importance due to its versatility and potential to elucidate complex structures, both at local and intermediate scales.

**Keywords:** Pair Distribution Function (PDF), Metal Organic Frameworks (MOFs), Local structure, Defects.

## Introducción

Entender la estructura atómica, es decir, comprender cómo los átomos se hallan conectados en el espacio e interactúan de manera selectiva a nivel molecular, es una de las herramientas más poderosas de la Química para el desarrollo de nuevos compuestos, procesos y materiales. La información estructural sobre un sólido o un material en general se puede obtener mediante un gran número de técnicas analíticas, incluyendo las espectroscópicas. Sin duda, los métodos cristalográficos permiten obtener información estructural muy precisa, incluso del orden periódico a larga distancia. En este sentido, tradicionalmente, la difracción de rayos X de monocristal ha sido la técnica de caracterización estructural más utilizada en Química, ya que permite determinar las distancias y los ángulos de enlace con alta precisión. Estos datos son clave para comprender las propiedades físicas y químicas de cualquier compuesto químico.<sup>1</sup> Sin embargo, una de las limitaciones de los métodos cristalográficos consiste en la necesidad de trabajar con cristales. ¿Cómo podemos entonces elucidar estructuras químicas sin cristales?

La función de distribución de pares o, en inglés *Pair Distribution Function* (PDF), es una técnica de caracterización que permite describir la distribución de distancias entre pares de átomos contenidos en un volumen determinado.<sup>2</sup> Esta técnica se basa en experimentos de dispersión total, típicamente de rayos X (aunque se aplica también a neutrones o incluso electrones). El PDF analiza de manera simultánea tanto la difracción de Bragg como la dispersión difusa que

presente una muestra. A partir de los picos de Bragg en un difractograma de rayos X, se puede deducir el orden de largo alcance de los átomos. En cambio, el orden a corto alcance, es decir, la estructura local, subyace en las señales amplias y peor definidas presentes en un difractograma de rayos X, fruto de la dispersión difusa. En este contexto, el análisis por PDF permite determinar la estructura atómica de una muestra problema, a escala local ( $< 8 \text{ \AA}$ ) y también a escala intermedia (de  $8$  a  $20 \text{ \AA}$ ), de manera continua y simultánea.<sup>3</sup> En resumen, la técnica del PDF nos permite cuantificar la probabilidad de encontrar dos átomos separados por una cierta distancia en un material (cristalino o no), a partir de la representación de la variación de la densidad  $G(r)$  como función de la distancia medida desde un átomo de referencia. Para comprender mejor este análisis, imaginemos como ejemplo el perfil de PDF que representaría la distribución de quince bolas de billar colocadas en un triángulo (Figura 1).

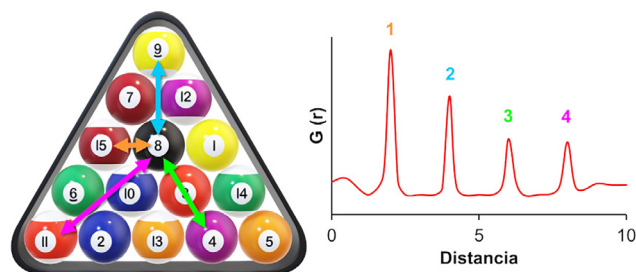


Figura 1. Representación esquemática del que sería el perfil de PDF para unas bolas de billar.

El PDF, definido como la función  $G(r)$ , se obtiene mediante la transformada de Fourier de datos de dispersión total. La transformada de Fourier se realiza sobre el factor de estructura,  $S(Q)$ , que describe la dispersión del haz incidente por la materia. Esta información se obtiene directamente mediante la normalización de la intensidad total dispersada de manera coherente por la muestra (incluyendo difracción de Bragg, dispersión múltiple y dispersión Compton).<sup>4</sup> En el caso de usar rayos X, estas funciones se pueden expresar como:

$$S(Q) = \frac{I(Q) - \langle f(Q)^2 \rangle + \langle f(Q) \rangle^2}{\langle f(Q) \rangle^2}$$

$$G(r) = \frac{2}{\pi} \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} Q[S(Q) - 1] \sin(Qr) dr = \frac{2}{\pi} \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} F(Q) \sin(Qr) dr$$

donde  $Q$  es la magnitud del momento de dispersión, para la dispersión elástica  $Q = 2\pi/d = 4\pi \sin(\theta)/\lambda$ ,  $\lambda$  es la longitud de onda de dispersión y  $2\theta$  es el ángulo de dispersión.<sup>5</sup> Estas funciones se pueden obtener con diferentes paquetes de softwares (PDFgetX3,<sup>6</sup> TOPAS,<sup>7</sup> GSAS-II<sup>8</sup>). En la práctica, los valores de  $Q_{\min}$  y  $Q_{\max}$  están determinados por las condiciones experimentales. Para obtener información estructural a escala atómica es necesario recoger datos de dispersión total hasta valores de  $Q_{\max}$  de unos  $20 \text{ \AA}^{-1}$  (este valor es orientativo, y depende en gran medida tanto del tipo de material como del tipo de estudios estructurales que se quieran llevar a cabo). Para poder alcanzar valores altos de  $Q_{\max}$ , es necesario usar radiación sincrotrón de alta energía, con longitud de onda corta. Es por eso que los experimentos de PDF, en su mayoría, se realizan utilizando rayos X de sincrotrón de alta energía o neutrones para lograr una gran resolución atómica en tiempos cortos.<sup>9</sup> Cabe mencionar que se pueden llevar a cabo también experimentos de PDF con difractómetros de laboratorio que tengan una fuente de rayos X de Mo o Ag. Finalmente, los datos de PDF se pueden refinar mediante el método Rietveld, para encontrar el modelo estructural que mejor explique los datos experimentales de PDF.<sup>10</sup>

A pesar del apogeo que ha vivido la técnica del PDF en los últimos años, hay que destacar que éste no es un método nuevo *per se*. De hecho, los orígenes del PDF van de la mano de los primeros desarrollos en el campo de la cristalografía de rayos X.<sup>11</sup> Así, el PDF se ha usado tradicionalmente para el estudio estructural de materiales inorgánicos intrínsecamente amorfos inorgánicos, tales como líquidos y vidrios,<sup>12</sup> o desordenados, incluyendo nanopartículas,<sup>13</sup> estructuras magnéticas,<sup>14</sup> y otros sistemas funcionales.<sup>4</sup> Sin embargo, actualmente los análisis de PDF se están convirtiendo también en una poderosa herramienta para abordar la caracterización estructural de materiales ordenados que no cristalizan con facilidad. Este es el caso de la mayoría de los materiales nanoporosos, como son las redes metal-orgánicas. Además, debido a la gran versatilidad del PDF, esta técnica puede aplicarse en el estudio de procesos dinámicos llevados a cabo en materiales nanoporosos, como los procesos catalíticos, sin necesidad de trabajar con cristales.<sup>15</sup>

## El papel del PDF en el estudio estructural de redes metal-orgánicas

Las redes metal-orgánicas o MOFs del inglés *Metal-Organic Frameworks*, son materiales cristalinos porosos constituidos por iones o clústeres metálicos enlazados a ligandos orgánicos mediante enlaces de coordinación.<sup>16</sup> La ventaja que supone el uso de este tipo de materiales nanoporosos funcionales se encuentra en el diseño racional de sus estructuras, bien sea pre- o post-sintéticamente. La versatilidad química y topológica de los MOFs permite modular la accesibilidad, selectividad y reactividad de sus estructuras frente a determinadas moléculas.<sup>17</sup> Dentro de las aplicaciones más representativas de los MOFs, encontramos la captura/separación de gases y la catálisis, las cuales implican procesos que pueden producir modificaciones en la base estructural de estos materiales.<sup>18</sup>

Aunque originalmente los MOFs se concibieron como materiales altamente cristalinos, actualmente se ha demostrado que pueden incorporar una gran cantidad de defectos en sus estructuras.<sup>19</sup> De hecho, una amplia variedad de MOFs no pueden ser obtenidos en forma de monocristal.<sup>20</sup> Desde un punto de vista estructural, el estudio a escala atómica de MOFs basados en redes complejas, normalmente alejadas de la estructura ideal y ordenada, supone un reto. Los MOFs con defectos y/o composiciones químicas complejas típicamente cristalizan mal, lo cual dificulta el estudio estructural de estos sistemas mediante métodos cristalográficos tradicionales. Es en este contexto, donde el PDF se blinda como una de las pocas técnicas de caracterización posibles para comprender qué ocurre en la estructura atómica del material sin necesidad de obtener monocristales. Así, en las últimas décadas, la función de distribución de pares se ha convertido en una poderosa alternativa para llevar a cabo estudios estructurales avanzados en redes metal-orgánicas (Figura 2).

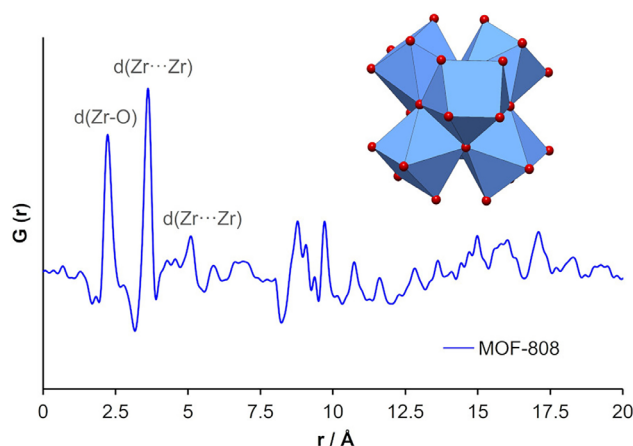


Figura 2. Ejemplo de un perfil de PDF del MOF-808, con la asignación de las distancias principales correspondientes al clúster metálico  $Zr_6O_4$ .

Este artículo de revisión pretende mostrar el potencial de la técnica de PDF para abordar muchas de las cuestiones estructurales que se plantean cuando se trabaja con MOFs.

Para ello, se presenta un análisis de una selección de trabajos recientes donde se lleva a cabo el estudio de MOFs con estructuras "imperfectas" mediante su análisis por PDF.

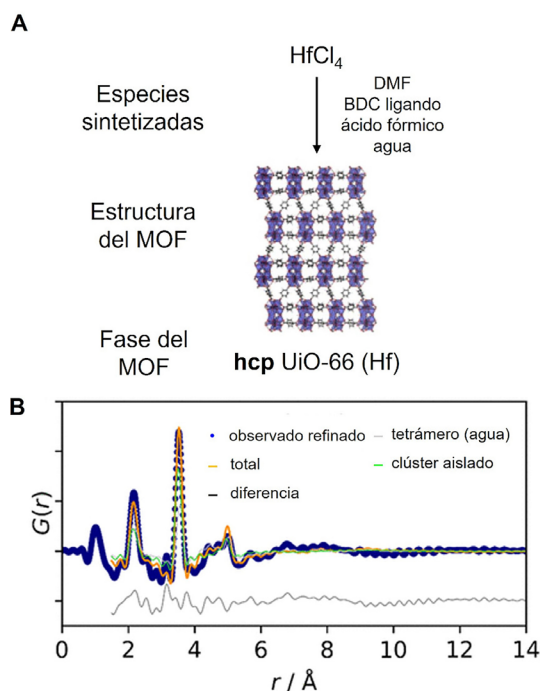
### Procesos de nucleación y crecimiento en MOFs

En los últimos años la técnica del PDF se ha usado para entender mejor el proceso de síntesis de los MOFs, bajo un enfoque estructural. Los experimentos de dispersión total de rayos X necesarios para obtener datos de PDF, pueden llevarse a cabo en condiciones de trabajo cercanas a las usadas para la preparación de estos materiales (a esto se le llama condiciones *in situ*).<sup>21</sup> Cliffe y colaboradores publicaron un estudio muy interesante en 2021<sup>22</sup> donde mostraron las etapas pre-cristalinas de la formación de un MOF prototipo, el *hcp* Hf-UiO-66, en condiciones solvotermales mediante experimentos de PDF *in situ*. Los autores demostraron cómo el precursor  $\text{HfCl}_4$  evolucionaba para dar lugar a clústeres con diferente nuclearidad, dependiendo de las condiciones de reacción usadas (temperaturas, disolventes). Estos experimentos de PDF dan luz sobre el complejo mecanismo de formación de este MOF, mediante la nucleación de pequeños clústeres ( $\text{Hf}_4$  y  $\text{Hf}_6$ ), la consecuente agregación para dar lugar a clústeres de mayor tamaño ( $\text{Hf}_{12}$ ), y el final ensamblaje del MOF (*hcp*-UiO-66). Así, mediante estudios avanzados de PDF se mostró que las condiciones sintéticas

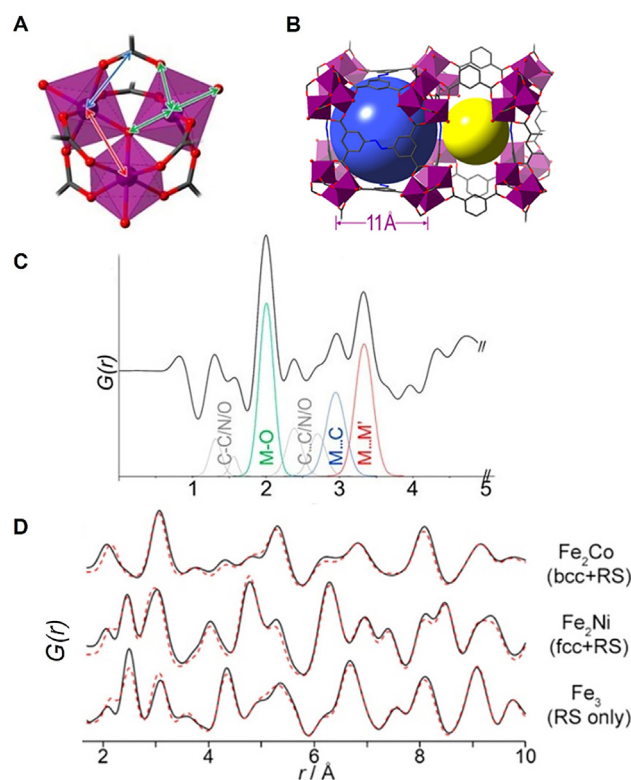
juegan un papel clave en la identidad de los clústeres de Hf y, por tanto, de la estructura final de la red del material UiO-66 (Figura 3).

### Transformaciones estructurales complejas en MOFs

Los MOFs son materiales dinámicos, capaces de reorganizar sus estructuras mediante la rotura y formación de nuevos enlaces de manera selectiva. Estos fenómenos estructurales son realmente intrigantes. Imaginemos que fuéramos capaces de construir un edificio A partiendo de un edificio B con un estilo arquitectónico muy diferente, sin llegar a colapsar la estructura en el proceso. ¿Cómo moveríamos las vigas madres? Platero-Prats, Chapman, Martín-Matute y colaboradores publicaron un trabajo sobre la transformación topológica del Zn-bio-MOF-100 inducida por una modificación química con complejos de iridio, mediante intercambio de ligando asistido por disolvente (SALE, del inglés *Solvent-Ligand Exchange*).<sup>23</sup> Los autores demostraron la estructura local de los clústeres de zinc y la distribución de los complejos de iridio dentro de la estructura del MOF combinando el análisis diferencial de datos de PDF y absorción de rayos X (EXAFS, del inglés *Extended X-ray Absorption Fine Structure*).



**Figura 3.** (A) Esquema de la formación de los dos tipos de configuración del MOF Hf-UiO-66. (B) Refinamiento, comparación y diferencia de datos experimentales de PDF obtenidos en el sistema  $\text{HfCl}_4$  en agua a temperatura ambiente. Adaptado de la ref. 22 con permiso de la *American Chemical Society*.



**Figura 4.** (A) Representación del clúster de PCN-250. (B) Estructura del PCN-250 y poros. (C) Comparativa de datos simulados y experimentales de PDF del PCN-250. (D) Datos experimentales de PDF de los MOFs bimetallicos refinados con diferentes modelos estructurales. Adaptado de la ref. 24 con permiso de la *American Chemical Society*.

Otro ejemplo reciente de aplicación del análisis de la función de distribución de pares de rayos X *in situ* es el publicado por Chapman y colaboradores.<sup>24</sup> En este trabajo, los autores estudiaron el mecanismo estructural a través del cual una familia de MOFs bimetalicos se transforman en nanomateriales durante la pirólisis. Con este fin, se compararon una serie de MOFs bimetalicos con diferentes composiciones químicas de clústeres metálicos ( $\text{Fe}_3$ ,  $\text{Fe}_2\text{Co}$  y  $\text{Fe}_2\text{Ni}$ ) y la misma red PCN-250. La pirólisis de los materiales se llevó a cabo en un reactor de inyección bajo un flujo de gas reductor, a temperaturas entre 200 y 380°C. Mediante experimentos de PDF *in situ* obtenidos durante el proceso de formación de las nanopartículas (Figura 4), los autores describieron la transformación estructural completa: desde cómo el MOF se desestabiliza y distorsiona antes de la formación del nanomaterial en la pirólisis, hasta cómo los metales de los clústeres del MOF pueden ser extraídos selectivamente sin colapsar la estructura, incluso detectan la formación de nanopartículas y la evolución de los defectos en el material.

### MOFs amorfos

La incorporación de defectos o variaciones en la periodicidad atómica promedio dentro de un MOF origina nuevas propiedades.<sup>25</sup> Desde el punto de vista de la caracterización estructural, es importante distinguir entre dos tipos diferentes de desorden, dependiendo de la propagación y la escala de los defectos: i) los defectos de corto alcance, como las vacantes o las distorsiones locales, que ocurren exclusivamente en una escala limitada y no alteran la simetría promedio del MOF. ii) los defectos de largo alcance, son los capaces de modificar significativamente la red y la porosidad nativas de los MOFs;<sup>26</sup>

El concepto de MOF amorfo fue introducido por Cheetham y colaboradores en 2010,<sup>27</sup> siendo la cristalinidad una de las principales características de los materiales MOF. El concepto de "MOF amorfo" fue sin duda una idea muy revolucionaria, ¿hasta qué punto un MOF puede ser desordenado? Los MOFs no cristalinos conservan la conectividad entre las unidades de construcción secundarias o clústeres metálicos y los ligandos orgánicos, mientras que carecen de orden de largo alcance. La caracterización estructural de los MOFs no cristalinos no puede realizarse utilizando métodos cristalográficos ya que estos materiales no presentarían picos de Bragg en un experimento de difracción de rayos X, puesto que carecen de un ordenamiento de largo alcance. De manera alternativa, la señal de dispersión difusa, que contiene información sobre las correlaciones átomo-átomo, puede analizarse para dilucidar el ordenamiento de corto y medio alcance en estos sistemas. Así, los análisis de PDF han surgido como una técnica de caracterización única para desvelar la estructura atómica de este tipo de materiales.

Los vidrios híbridos formados a partir de MOFs fundidos son como una nueva clase de materiales, que combinan las propiedades funcionales de los MOFs cristalinos con la procesabilidad de los vidrios.<sup>28</sup> Sin embargo, sólo unos pocos MOFs cristalinos son susceptibles de ser fundidos sin descomponerse.

La porosidad y la fuerza de la interacción entre el metal y el ligando se han identificado como parámetros cruciales en el equilibrio entre la descomposición térmica del ligando orgánico y la fusión. Por ejemplo, la incapacidad del MOF ZIF-8 para fundir, se atribuye a la inestabilidad del ligando orgánico, el cual se descompone antes de poder producirse la fusión. Sin embargo, Wondraczek y colaboradores demostraron el año pasado que la incorporación de un líquido iónico en el interior poroso de este MOF permitía solventar este problema, reduciendo así su temperatura de fusión por debajo de su temperatura de descomposición térmica.<sup>29</sup> Los estudios estructurales con PDF mostraron que la prevención de la descomposición, y el éxito de la fusión, se debía a que las interacciones del líquido iónico estabilizaban los ligandos del ZIF-8.

Bennett y colaboradores publicaron un artículo recientemente donde se funcionalizaba un ZIF con grupos amina (ZIF-UC-6) y se fundía, para formar un vidrio.<sup>30</sup> La presencia de grupos amino da lugar a una menor temperatura de fusión en comparación con otros ZIFs, y permite además modificar las propiedades del vidrio final. Para investigar a fondo las estructuras atómicas del ZIF-UC-6 en su forma cristalina y en su forma de vidrio, se recogieron datos de dispersión total de rayos X para análisis de PDF (Figura 5). Los autores demostraron que las correlaciones de orden a corto alcance se mantenían, lo que implica que la conectividad química no se altera en gran medida en la fase vítrea. Sin embargo, el orden a alcance intermedio (8-20 Å) sí se pierde, lo que apoya la falta de periodicidad en la fase vítrea.

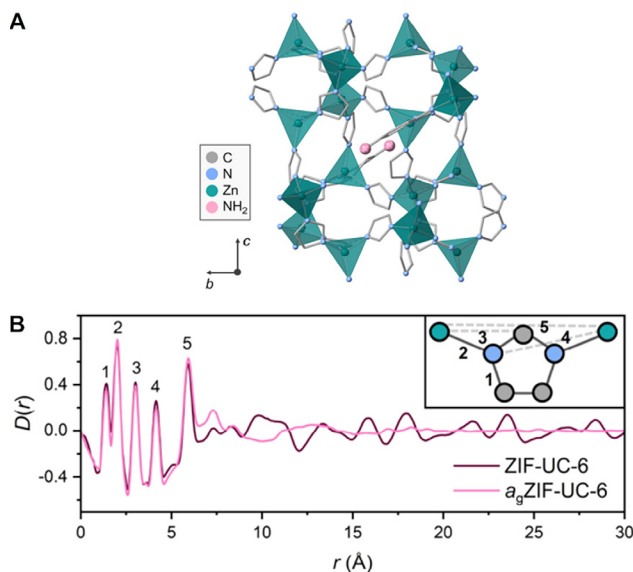


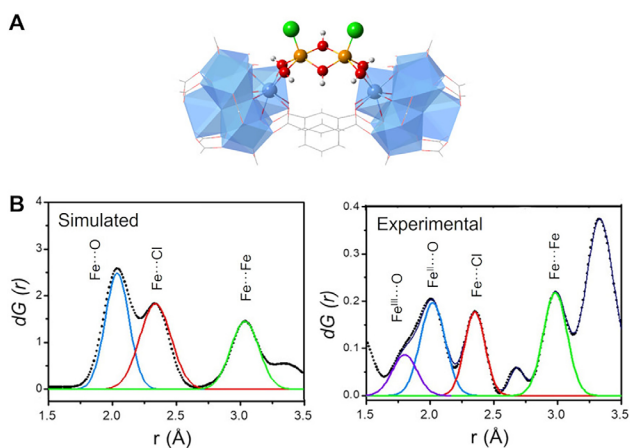
Figura 5. (A) Estructura del ZIF-UC-6. (B) Funciones de distribución de pares del MOF en su forma cristalina y en su forma de vidrio. Adaptado de la ref. 30 con permiso de American Chemical Society.

### Procesos de captura y catálisis en MOFs

Dentro de las múltiples aplicaciones que presentan los MOFs, una de las más relevantes está relacionada con su alta capacidad de captación de sustancias, dada la poro-

sidad única de estos materiales.<sup>31</sup> Como ejemplo, Farha y colaboradores estudiaron la adsorción de selenato y selenito acuosos por una serie de MOFs basados en Zr.<sup>32</sup> De los siete materiales examinados, se encontró que el NU-1000 mostraba la mayor capacidad de adsorción. Se utilizaron análisis de PDF para evaluar los cambios estructurales que acompañan la captura de los aniones selenato y selenito en el MOF. Los PDFs simulados indicaron distancias Se...Zr de 3,41 y 2,72 Å respectivamente, para los modos de unión  $\eta_2\mu_2$  y  $\mu_2$ . En el modo  $\eta_2\mu_2$  el selenato coordina a dos átomos de Zr en posiciones axiales, mientras que en el modo  $\mu_2$  coordina de manera quelato a un único átomo de Zr en posición ecuatorial. Los resultados experimentales del PDF, evaluados a partir de los datos diferenciales para aislar las distancias átomo-átomo correspondientes a la combinación adsorbente/adsorbato, mostraron una señal en  $\sim 3,4$  Å, lo que indica que estos aniones se unen exclusivamente en un modo  $\eta_2\mu_2$ . Además, los datos de PDF diferenciales también presentaban una señal a  $\sim 1,7$  Å, correspondiente a la distancia Se-O dentro del anión.

En el contexto de catalizar reacciones químicas, los MOFs son excelentes plataformas porosas que pueden incorporar metales de transición, en forma de *single sites*. Platero-Prats y colaboradores demostraron la incorporación de centros activos de hierro en el MOF-808 para procesos Fenton de degradación de contaminantes en agua.<sup>33</sup> Los autores utilizan el método post-sintético SIM (incorporación solvotérmica en materiales MOF).<sup>19</sup> En este trabajo se mostró la formación de clústeres catalíticos de Fe-oxo dentro del MOF-808 que fueron caracterizados mediante análisis diferencial de datos de PDF y cálculos teóricos. Tras la combinación de herramientas de caracterización experimentales y computacionales, se propuso la formación de una estructura bimetalica en la que se formaron dímeros de Fe-oxo estabilizados entre dos clústeres  $Zr_6O_8$  vecinos (Figura 6).



**Figura 6.** (A) Modelo estructural termodinámicamente más estable para el Fe-MOF-808. (B) Datos de PDF simulados y experimentales de este material con la asignación de distancias. Adaptado de la ref. 33 con permiso de la Royal Society of Chemistry.

El PDF aporta además la posibilidad de estudiar *in situ* los procesos de activación en MOFs catalíticos, ofreciendo

así una imagen estructural de la cinética ligada a estos procesos. Un buen ejemplo es el presentado por Chapman y colaboradores en el que se estudió la estructura y la reactividad de las especies de cobre soportadas en NU-1000.<sup>34</sup> Combinando experimentos de PDF *in situ* y el análisis de la densidad envolvente diferencial (DED) de los datos de difracción de rayos X basados en radiación sincrotrón, los autores estudiaron simultáneamente la estructura local de los centros activos de cobre, así como su distribución dentro del NU-1000. Este sistema Cu<sup>0</sup>-NU-1000 es catalíticamente activo para la hidrogenación de etileno en fase gaseosa. La exposición del catalizador al aire re-oxida las especies a una fase inactiva tipo cuprita (Cu<sub>2</sub>O), dando lugar a una reestructuración dinámica del sistema a diferentes escalas que sólo puede entenderse mediante estudios de PDF.

## Conclusiones

En este artículo de revisión, discutimos los recientes avances en la aplicación de PDF como una técnica de caracterización estructural de materiales porosos. En concreto, en este trabajo se muestra el papel de los análisis de PDF, combinados con estudios computacionales, como una poderosa herramienta para determinar las estructuras atómicas, tanto locales como a rango intermedio, de MOFs con defectos. Además, analizamos una selección de trabajos más recientes sobre la aplicación de estudios de PDF aplicados a MOFs, incluyendo experimentos *in situ* realizados en condiciones relevantes para entender la química y los comportamientos de adsorción y catalíticos de estos materiales.

## Agradecimientos

Los autores agradecen al Ministerio de Ciencia e Innovación (MCIN/AEI/10.13039/501100011033) y a la Unión Europea "NextGenerationEU"/PRTR por los proyectos RTI2018-096138-A-I00, EUR2020-112294 y PID2021-123839OB-I00. A.E.P.-P. agradece al Ministerio de Ciencia e Innovación de España, Programa de Unidades de Excelencia en I+D "María de Maeztu" (CEX2018-000805-M). A.E.P.-P. agradece al Ministerio de Ciencia e Innovación de España la ayuda Ramón y Cajal (RYC2018-024328-I). I.C.V. agradece una beca FPI-UAM 2021 UAM.

## Bibliografía

- 1] Pecharsky, V. K.; Zavalij, P. Y. *Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials*. Springer US, **2005**, ISBN 9780387241470.
- 2] Castillo-Blas, C.; Moreno, J. M.; Romero-Muñiz, I.; Platero-Prats, A. E. *Nanoscale* **2020**, *12*, 15577–15587.
- 3] Billinge, S. J. L.; Kanatzidis, M. G. *Chem. Commun.* **2004**, 749–760.
- 4] Young, C. A.; Goodwin, A. L. *J. Mater. Chem.* **2011**, *21*, 6464–6476.

- [5] Billinge, S. J. L. *Phil. Trans. R. Soc.* **2019**, 377 (2147), 20180413-2018430.
- [6] Juhás, P.; Davis, T.; Farrow, C. L.; Billinge, S. J. L. *J. Appl. Cryst.* **2013**, 46 (2), 560–566.
- [7] Coelho, A. A. *J. Appl. Cryst.* **2018**, 51 (1), 210–218.
- [8] Toby, B. H.; von Dreele, R. B. *J. Appl. Cryst.* **2013**, 46 (2), 544–549.
- [9] Keen, D. A. *J. Appl. Cryst.* **2001**, 34, 172–177.
- [10] Farrow, C. L.; Juhas, P.; Liu, J. W.; Bryndin, D.; Boin, E. S.; Bloch, J.; Proffen, T.; Billinge, S. J. L. *J. Phys.: Condens. Matter.* **2019**, 335219-335226.
- [11] Warren, B. E. Z. *Kristallogr. Cryst. Mater.* **1993**, 86 (1) 349-358.
- [12] Fischer, H. E.; Barnes, A. C.; Salmon, P. S. *Rep. Prog. Phys.* **2006**, 69, 233–299.
- [13] Christiansen, T. L.; Cooper, S. R.; Jensen, K. M. O. *Nanoscale Adv.* **2020**, 2, 2234–2254.
- [14] Frandsen, B. A.; Ross, K. A.; Krizan, J. W.; Nilsen, G. J.; Wildes, A. R.; Cava, R. J.; Birgeneau, R. J.; Billinge, S. J. L. *Phys. Rev. Materials* **2017**, 1, 074412-074421.
- [15] Terban, M. W.; Billinge, S. J. L. *Chem. Rev.* **2022**, 122, 1, 1208–1272.
- [16] Hong-Cai “Joe” Zhou, H.-; Kitagawa, S. *Chem. Soc. Rev.* **2014**, 43, 5415-5418.
- [17] Brozek, C. K.; Dincă, M. *Chem. Soc. Rev.* **2014**, 43, 5456-5467.
- [18] Dhaka, S.; Kumar, R.; Deep, A.; Kurade, M. B.; Ji, S. W.; Jeon, B. H. *Coord. Chem. Rev.* **2019**, 380, 330-352.
- [19] Castillo-Blas, C.; Montoro, C.; Platero-Prats, A. E.; Ares, P.; Amo-Ochoa, P.; Conesa, J.; Zamora, F. *Adv. Inorg. Chem.* **2020**; Vol. 76, 73–119, ISBN 08988838.
- [20] Cliffe, M. J.; Wan, W.; Zou, X.; Chater, P. A.; Kleppe, A. K.; Tucker, M. G.; Wilhelm, H.; Funnell, N. P.; Coudert, F. X.; Goodwin, A. L. *Nat. Commun.* **2014**, 5, 4176-4184.
- [21] Mi, J.-L.; Jensen, K. M. Ø.; Tyrsted, C.; Bremholm, M.; Iversen, B. B. *Cryst. Eng. Comm.* **2015**, 17, 6868–6877.
- [22] Firth, F. C. N.; Gaultois, M. W.; Wu, Y.; Stratford, J. M.; Keeble, D. S.; Grey, C. P.; Cliffe, M. J. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, 143 (47), 19668–19683.
- [23] González Miera, G.; Bermejo Gómez, A.; Chupas, P. J.; Martín-Matute, B.; Chapman, K. W.; Platero-Prats, A. E. *Inorg. Chem.* **2017**, 56 (8), 4576–4583.
- [24] Chen, Z.; Chen, Z.; Farha, O. K.; Chapman, K. W. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, 143 (24), 8976–8980.
- [25] Deria, P.; Mondloch, J. E.; Karagiari, O.; Bury, W.; Hupp, J. T.; Farha, O. K. *Chem. Soc. Rev.* **2014**, 43, 5896-5912.
- [26] Bennett, T. D.; Cheetham, A. K. *Acc. Chem. Res.* **2014**, 47, 1555-1562.
- [27] Bennett, T. D.; Goodwin, A. L.; Dove, M. T.; Keen, D. A.; Tucker, M. G.; Barney, E. R.; Soper, A. K.; Bithell, E. G.; Tan, J.-C.; Cheetham, A. K. *Phys. Rev. Lett.* **2010**, 104 (11), 115503-115507.
- [28] Longley, L.; Calahoo, C.; Limbach, R.; Xia, Y.; Tuffnell, J. M.; Sapnik, A. F.; Thorne, M. F.; Keeble, D. S.; Keen, D. A.; Wondraczek, L.; Bennett, T. D. *Nat. Commun.* **2020**, 11, 5800-5812.
- [29] Nozari, V.; Calahoo, C.; Tuffnell, J. M.; Keen, D. A.; Bennett, T. D.; Wondraczek, L. *Nat. Commun.* **2021**, 12, 5703-5715.
- [30] Bumstead, A. M.; Pakamor'e, I.; Richards, K. D.; Thorne, M. F.; Boyadjieva, S. S.; Castillo-Blas, C.; McHugh, L. N.; Sapnik, A. F.; Keeble, D. S.; Keen, D. A.; Evans, R. C.; Forgan, R. S.; Bennett, T. D. *Chem. Mater.* **2022**, 34 (5), 2187–2196.
- [31] Dias, E. M.; Petit, C. *J. Mater. Chem. A.* **2015**, 3, 22484–22506.
- [32] Howarth, A. J.; Katz, M. J.; Wang, T. C.; Platero-Prats, A. E.; Chapman, K. W.; Hupp, J. T.; Farha, O. K. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 7488–7494.
- [33] Castillo-Blas, C.; Romero-Muñiz, I.; Mavrandonakis, A.; Simionelli, L.; Platero-Prats, A. E. *Chem. Commun.* **2020**, 56 (100), 15615–15618.
- [34] Platero-Prats, A. E.; League, A. B.; Bernales, V.; Ye, J.; Gallington, L. C.; Vjunov, A.; Schweitzer, N. M.; Li, Z.; Zheng, J.; Mehdi, B. L.; Stevens, A. J.; Dohnalkova, A.; Balasubramanian, M.; Farha, O. K.; Hupp, J. T.; Browning, N. D.; Fulton, J. L.; Camaioni, D. M.; Lercher, J. A.; Truhlar, D. G.; Gagliardi, L.; Cramer, C. J.; Chapman, K. W. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139 (30), 10410–10418.



ENSEÑANZA  
DE LA QUÍMICA



L. Moreno Martínez<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> CEIPS Vicente Aleixandre  
Miraflores de la Sierra,  
28792, Comunidad de Madrid

<sup>2</sup> Grupo Especializado en Didáctica  
e Historia de la Física y la Química,  
RSEF-RSEQ, Ciudad Universitaria,  
28040 Madrid

C-e: [luis.morenomartinez@educamadrid.org](mailto:luis.morenomartinez@educamadrid.org)

Recibido: 30/06/2022

Aceptado: 20/07/2022

ORCID: 0000-0002-4540-5752

# El valor educativo de la historia de la química para las aulas de secundaria

Luis Moreno Martínez

**Resumen:** La historia de la química es una poderosa herramienta didáctica para el aprendizaje significativo, contextualizado, crítico y experimental de la química. El presente trabajo ofrece un recorrido panorámico por las principales conclusiones que la literatura académica ha arrojado sobre el uso educativo de la historia de la química, para posteriormente ilustrar a través de una serie de experiencias didácticas realizadas en aulas de Educación Secundaria Obligatoria las múltiples potencialidades que la historia de la química ofrece al profesorado de Física y Química de enseñanza secundaria.

**Palabras clave:** Historia de la Química, Educación Científica, Docencia, Enseñanza Secundaria, Física y Química.

**Abstract:** History of chemistry is a powerful didactic tool for promoting a significative, contextualized, crytical and experimental learning of chemistry. This paper presents a wide framework on the educational use of history of chemistry based on research studies and a collection of several teaching experiences for secondary education in order to point out the potentialities of history of chemistry for Physics and Chemistry high school teachers.

**Keywords:** History of Chemistry, STEM Education, Teaching, Secondary Education, Physics and Chemistry.

## Introducción

Las disciplinas científicas, como la química, tienen un origen didáctico.<sup>[1]</sup> La historia de la química da cuenta de ello. Así, desde la conformación de la química como un conjunto estructurado de saberes y prácticas que tuvo lugar a finales del siglo XVIII y durante el siglo XIX, la enseñanza se convirtió en un pilar fundamental para instruir a los nuevos integrantes de la disciplina en los lenguajes, métodos y problemas por resolver de la entonces emergente ciencia química. La enseñanza permite así a las disciplinas científicas subsistir en el tiempo, crecer y avanzar.

La historia es otro elemento vertebrador de toda disciplina científica.<sup>[2]</sup> Si la enseñanza conecta a los miembros de una comunidad científica con sus futuros integrantes, la historia conecta a la disciplina con sus antepasados, a los que en ocasiones alaban y en no pocas ocasiones silencian. Así, no es de extrañar que los primeros manuales de química fuesen especialmente críticos y recelosos de la alquimia, de la que querían marcar distancia. Tampoco sorprende que la revolución química capitaneada por Antoine Laurent Lavoisier (1743-1794) evitase el uso de la historia para enseñar química.<sup>[3]</sup> Sin embargo, esta postura no fue compartida por todos los químicos posteriores. Así, es frecuente encontrar introducciones históricas en los manuales de química del siglo XIX. Ya en el siglo XX, la convergencia

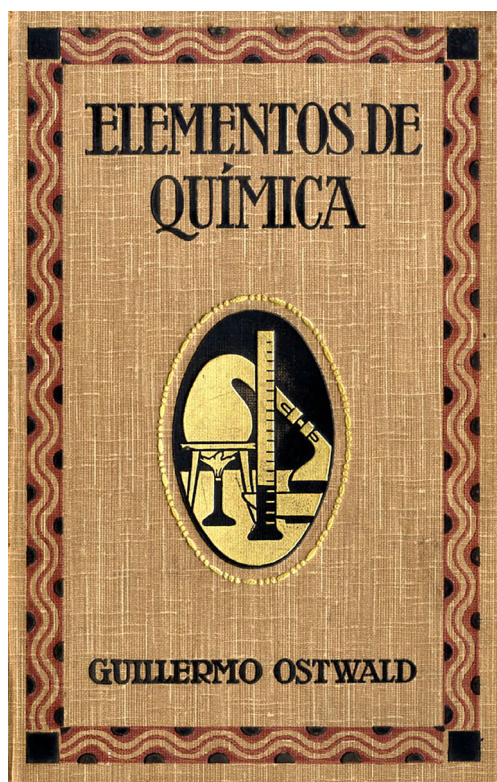
de movimientos pedagógicos, la emergencia de la historia de la ciencia como área de erudición y la forja de la didáctica de las ciencias como campo del saber traerán consigo nuevas miradas a los usos didácticos de la historia de la ciencia en general y de la química en particular. Este trabajo ofrece una síntesis de las principales perspectivas sobre los usos didácticos de la historia de la química respaldadas por la literatura académica, sin olvidar -dado la profesión del autor, profesor de enseñanza secundaria- el marco que debe guiar y avalar toda reflexión pedagógica: la realidad de nuestras aulas.

## Una mirada histórica al uso educativo de la historia de la química

A principios del siglo XX, el químico Wilhelm Ostwald (1853-1932) se pronunciaba así sobre el valor educativo de la historia de la química:

*«Me ha sorprendido ver en cuán amplia medida la construcción rigurosa de los conceptos químicos fundamentales concuerda por una parte con el desarrollo histórico de los descubrimientos de la química, y por otra parte, con las exigencias de una pedagogía racional».*<sup>[4]</sup>

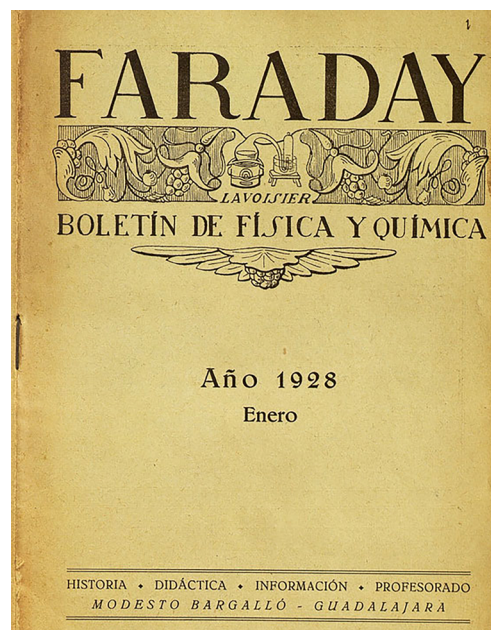
En estas líneas, traducidas al castellano en 1917 por Modesto Bargalló Ardévol (1894-1981), profesor de Física, Química, Historia Natural y Agricultura en la Escuela Normal de Maestros de Guadalajara, Ostwald plasmaba para la química una idea ampliamente extendida en el ámbito de la enseñanza de las ciencias de la época: el paralelismo entre el desarrollo histórico de las ciencias y el propio aprendizaje del alumnado. Diversos educadores de principios del siglo XX promovieron ese paralelismo entre historia y aprendizaje de las ciencias. En el caso español, merece especial mención la labor del profesor Modesto Bargalló, traductor de los *Elementos de Química* de Ostwald (Figura 1).



**Figura 1.** Cubierta de los *Elementos de Química*, edición en castellano de *Schule der Chemie* de Wilhelm Ostwald. La traducción fue realizada por el profesor Modesto Bargalló Ardévol, figura clave de la educación científica del primer tercio del siglo XX en España.

Bargalló fue un firme defensor del valor educativo de la historia de la ciencia.<sup>[5]</sup> Consideraba que la historia de la ciencia permitía promover valores sobre la labor del científico, a la par que enseñar de forma más clara los principios básicos de las ciencias. Para ello, no dudó en impulsar la traducción de textos clásicos de la historia de la física y de la química a través de *Faraday*, boletín fundado por el mismo Bargalló en 1928, el cual no ha sido recuperado sino hasta fechas recientes.<sup>[6]</sup>

Durante el siglo XX, en paralelo con el desarrollo disciplinar de la didáctica de las ciencias, la historia de la ciencia fue cobrando mayor importancia en la educación científica. En esta línea destacan los trabajos del químico norteamer-



**Figura 2.** Cubierta del primer número del boletín *Faraday*, publicación pionera en el ámbito de la didáctica y la historia de la física y la química en España.

cano James Bryant Conant (1893-1978), quien fue rector de la Universidad de Harvard, desde donde impulsó una serie de cursos y trabajos sobre historia de la ciencia. Conocidos como *Harvard Case Histories in Experimental Science*, estuvieron originalmente dirigidos a estudiantes de humanidades y ciencias sociales, «los cuales requieren de una comprensión de la ciencia que les ayudará a relacionar el desarrollo de las ciencias naturales con otros campos de la actividad humana». Posteriormente, se dirigieron a un público más amplio «con la convicción de que un conocimiento detallado de algunos de los avances de la ciencia en distintas épocas permite una mejor comprensión del mundo actual».<sup>[7]</sup>

Otra muestra de la profunda imbricación entre historia y didáctica de la química en el siglo XX lo encontramos en el caso de la *American Chemical Society* cuyo *Journal of Chemical Education*, una de las publicaciones más relevantes en la actualidad sobre enseñanza de la química que se erigió como órgano de expresión de sus divisiones de Educación Química y de Historia de la Química. Asimismo, destacados autores en el ámbito de la historia de la química publicaron sus trabajos en esta publicación académica, como Aaron J. Ihde.<sup>[8]</sup> A una escala mucho más modesta, los números de *Faraday* publicados entre 1928 y 1929 también revelan la coexistencia de la reflexión sobre cuestiones pedagógicas ligadas al aprendizaje de la química y el desarrollo disciplinar de la historia de la ciencia.

Desde esta perspectiva histórica no sorprende que en el proceso de profesionalización de la didáctica de las ciencias experimentales (donde se incluye la didáctica de la química) de finales del siglo XX, el valor educativo de la historia de la ciencia fuese un elemento de consenso. En esta línea, cabe destacar los trabajos del profesor Michael Robert

**Tabla 1.** Principales potenciales educativos de la historia de la química señaladas por la investigación didáctica

	Para el docente	Para el estudiante
<b>Enseñar y aprender química</b>	Actúa como criterio de selección y secuenciación de contenidos.	Contribuye a situar los conceptos, leyes y teorías de la química en su contexto.
	Puede actuar como hilo conductor para diseñar unidades didácticas.	Ayuda a conocer cómo se ha construido y se construye el conocimiento químico.
	Permite identificar en el alumnado ideas previas y errores conceptuales.	Promueve el aprendizaje significativo de la química.
	Propicia la colaboración del profesorado de distintas especialidades.	Permite relacionar la química con otras materias.
<b>Enseñar y aprender sobre química</b>	Humaniza la química, mostrando aspectos sociales, culturales y políticos vinculados con ella.	Contribuye al desarrollo del pensamiento crítico sobre temas vinculados a la química.
	Contribuye a la formación del profesorado, aportando una reflexión crítica sobre la química como ciencia.	Propicia la reflexión en torno a las relaciones química y sociedad.
		Permite superar visiones deformadas de la química como actividad humana.

Matthews (1948) quien en la década de 1980 señaló la existencia de una crisis intelectual y social en la educación científica. La escasez de profesorado y alumnado de ciencias y la falta de cultura científica de la ciudadanía serían muestras de dicha crisis. Ante esta situación, defendió que si bien la solución no radicaba únicamente en la historia de la ciencia, su uso educativo sí podría contribuir a paliar la situación, ya que la historia de la ciencia puede «humanizar las ciencias y acercarlas más a los intereses personales, éticos, culturales y políticos» de la ciudadanía, «puede hacer las clases más estimulantes y reflexivas, incrementando las capacidades de pensamiento crítico», puede ayudar a «una comprensión mayor de los contenidos científicos» y a «mejorar la formación del profesorado contribuyendo al desarrollo de una epistemología más rica y más auténtica, esto es, a un mejor conocimiento de la estructura de la ciencia y su lugar en el marco intelectual de las cosas».<sup>[9]</sup> De nuevo en el contexto español, esta relevancia de la historia de la ciencia en el seno disciplinar de la didáctica de las ciencias experimentales de finales del siglo XX lo encontramos al examinar la publicación *Enseñanza de las Ciencias*, revista académica fundada en 1983 y uno de los máximos exponentes en castellano de la investigación en educación científica y matemática. Desde su primer número, es frecuente encontrar diversos trabajos que avalan el uso didáctico de la historia de la ciencia a través del análisis del currículo, los libros de

texto, la formación del profesorado o las ideas previas del alumnado, entre otros muchos aspectos. Una síntesis de las principales ideas sobre el uso educativo de la historia de la química avaladas por la literatura académica en el ámbito de la didáctica de las ciencias experimentales se recoge en la Tabla 1.

## La historia de la química en el currículo

Si bien la historia de la química no tiene un lugar privilegiado en el currículo, sí tiene una presencia suficiente que avala su incorporación a las aulas de secundaria. Un estudio panorámico sobre la presencia de la historia de la química en el currículo de ESO y Bachillerato en el marco LOE mostró la existencia de ciertas temáticas de índole histórico sobre química en las distintas materias de Física y Química de ESO y Bachillerato, como la evolución histórica de los modelos atómicos, el desarrollo de las leyes ponderales de las combinaciones química, la historia de la clasificación de los elementos químicos, la evolución de las teorías ácido-base o el origen de la química orgánica. Sin embargo, la historia de la química trasciende los contenidos vinculados a ciertos episodios históricos.<sup>[10]</sup> En esta línea, merece especial mención el hecho de que en el marco LOMCE la historia de la ciencia constituyese un elemento central de las llamadas competencias básicas en ciencia y tecnología las cuales «capacitan a ciudadanos responsables y respetuosos que desarrollan juicios críticos sobre los hechos científicos y tecnológicos que se suceden a lo largo de los tiempos pasados y actuales».<sup>[11]</sup> Como puede colegirse, la dimensión histórica de la ciencia y por ende, de la química-subyace en la competencia científica del currículo.

La historia de la química también está presente en el nuevo currículo de ESO y Bachillerato derivado de la LOMLOE. Así, en el bloque de saberes básicos dedicado a destrezas científicas básicas en las materias de Física y Química de ESO se incluye la «valoración de la cultura científica y del papel de científicos y científicas en los principales hitos históricos y actuales de la física y la química en el avance y mejora de la sociedad».<sup>[12]</sup> No obstante, la presencia de episodios históricos del desarrollo de la química se restringe básicamente al desarrollo de los modelos atómicos. En el caso de Bachillerato, se explicitan las contribuciones históricas a la elaboración de la tabla periódica en la materia de Física y Química de 1º Bachillerato y la relevancia de los espectros atómicos en el contexto del desarrollo histórico de los modelos atómicos en la materia de Química de 2º Bachillerato.<sup>[13]</sup>

## La historia de la química en los libros de texto

Si la historia de la química no tiene un lugar privilegiado en el currículo de ESO y Bachillerato, no sorprende que su presencia en los libros de texto de Física y Química no sea amplia. Un análisis de los libros de Física y Química de ESO y Bachillerato de destacadas editoriales en el marco LOE arrojó

interesantes conclusiones en este terreno, apuntando que las presentaciones históricas sobre química incluidas en estos materiales educativos incurren en una visión individualista (centrada en referencias puntuales a científicos) y aproblemática (evitando abordar controversias) de la química, focalizada en incluir fechas de algunos hitos célebres de la historia de la química, sin presencia apenas de mujeres científicas e incidiendo en una visión lineal en la que se alternan modelos y experimentos.<sup>[14]</sup>

Dicho estudio también mostró que los escasos capítulos sobre historia de la química incluidos en los libros de texto suelen desatender los resultados de investigación en historia de la ciencia de las últimas décadas. Así, la revolución química suele presentarse como la obra en solitario de Lavoisier y la síntesis de la urea por Wöhler suele erigirse como el momento fundacional de la química orgánica, pese a que ambas narrativas no cuentan con el aval de las fuentes históricas y su análisis riguroso.<sup>[15]</sup> También cabe destacar el olvido de los errores en las predicciones de Dimitri Mendeleiev, subrayándose únicamente aquellos elementos que sí encontraron un lugar en su tabla periódica;<sup>[16]</sup> así como la presentación de la evolución histórica de los modelos atómicos como un proceso lineal en el que un modelo es inmediatamente abandonado tras un experimento que lo invalide, obviando la convivencia y rivalidad entre modelos.<sup>[17]</sup> Se trata de narrativas que, más allá del rigor, se erigen contraproducentes en su acción didáctica por introducir en el alumnado una imagen de la química como obra de grandes genios aislados y como un discurso de éxito. Por el contrario, la colaboración entre científicos o la convivencia de modelos y teorías y su acomodo a la evidencia experimental constituyen características de la química como ciencia que no pueden pasarse por alto en su enseñanza.

## La historia de la química en el aula

Aunque el panorama descrito en las líneas anteriores puede parecer desalentador, cabe añadir las múltiples opciones que el profesorado puede encontrar en su práctica de aula para hacer uso de la historia de la química para trabajar aspectos del currículo y al mismo tiempo hacerlo en el marco de la evidencia proporcionada por la investigación sobre historia de la ciencia en educación. Desde esta máxima, se presentan a continuación tres experiencias didácticas realizadas con alumnado de Educación Secundaria Obligatoria en el marco de la materia de Física y Química, así como algunas pautas para el uso de la historia de la química en enseñanza secundaria.

### Una controversia histórica de gran interés didáctico: el caso Lafarge y su uso en 2º-3º ESO

Las controversias científicas son excelentes herramientas didácticas para promover en el alumnado la reflexión crítica sobre la producción del conocimiento científico y sus relaciones con la sociedad. La historia de la química está

repleta de estas controversias. Una de especial interés, no suficientemente conocida en el ámbito de la didáctica de la química pero sí ampliamente avalada por los estudios históricos sobre ciencia, es el conocido como caso Lafarge.<sup>[18]</sup> Se trata de la muerte de Charles Lafarge en 1840 en extrañas circunstancias que fueron achacadas al envenenamiento por arsénico a manos de su esposa, Marie Lafarge. La investigación sobre su envenenamiento, no exenta de polémica, transcurrió entre los tribunales y el laboratorio e implicó la participación del químico español Mateu Orfila (1787-1853). Mediante la producción de hidrógeno por reacción de cinc con ácido clorhídrico, el arsénico presente en la muestra que se deseaba analizar formaba hidrógeno arseniado (compuesto hoy denominado arsano) que por efecto de una llama se descomponía dando lugar a un espejo de arsénico (Figura 3). Este método, conocido como método de Marsh, fue el empleado por Orfila a fin de determinar la presencia de arsénico en todo tipo de muestras, desde restos de órganos del difunto hasta tierra de su tumba, tela del sudario o restos de vómito; lo que llevó a prisión a Marie Lafarge.



Esta historia, sin duda atractiva para nuestro alumnado, puede propiciar en nuestras aulas no pocas reflexiones, como la tensión entre usar la ciencia, siempre sujeta a revisión y abierta a nuevos interrogantes, como elemento para dictar justicia, acción que requiere de mínima incertidumbre y provisionalidad. Asimismo, las disputas en torno al método empleado por Orfila y los límites de las técnicas químicas ilustran las dificultades de la metodología científica, lejos de una imagen simple y simplista de aplicación algorítmica de un método científico universal. Asimismo, la interpretación de los hechos científicos ligados a la controversia implica aplicar aprendizajes de química, tales como el fundamento de los cambios químicos, los distintos sistemas materiales o los estados de agregación de la materia.



Figura 3. Ilustración del método de Marsh usado por Orfila para determinar la presencia de arsénico.<sup>[18]</sup>

La Tabla 2 facilita un texto sobre el caso Lafarge que puede ser leído como actividad de clase, así como una propuesta didáctica para su lectura.

**Tabla 2.** El misterioso caso Lafarge, una actividad basada en el uso de la historia de la química en 2º/3º ESO

Material de lectura	Material didáctico
Acceso vía QR	Acceso vía QR
	
Acceso vía URL <a href="https://principia.io/2020/07/09/el-caso-lafarge.ljEyMTY/">https://principia.io/2020/07/09/el-caso-lafarge.ljEyMTY/</a>	Acceso vía URL <a href="https://www.unprofedeciencias.es/elmisteriosocasolafarge/">https://www.unprofedeciencias.es/elmisteriosocasolafarge/</a>

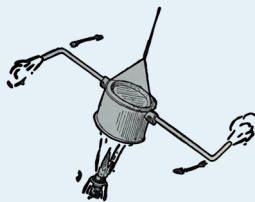


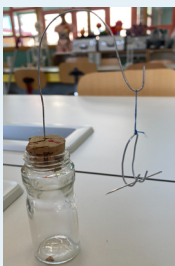
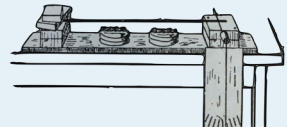

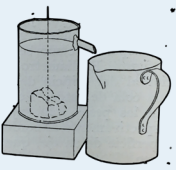
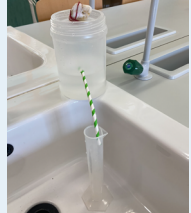
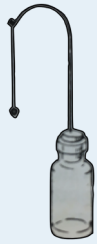

### Unos misteriosos artefactos para experimentar: el gabinete del profesor Modesto Bargalló y su recreación en 2º-3º ESO

La historia de la química va más allá de lo sucedido en los laboratorios pretéritos. Las aulas de ciencias del pasado son valiosos repositorios de experiencias docentes para el profesorado STEM del presente. La investigación en historia de la educación científica, impulsada por los estudios históricos sobre ciencia y sobre educación, se revela entonces como un marco fructífero para nuestra acción docente. En esta línea, se ha abordado con alumnado de 2º y 3º ESO la recreación del gabinete de física y química del profesor Modesto Bargalló, ya mencionado con anterioridad en estas líneas.<sup>[9]</sup> Partiendo de las ilustraciones y las explicaciones



**Figura 4.** Cubierta de *El gabinete de física*, obra para docentes en la que el profesor Modesto Bargalló describía la construcción de más de una treintena de artefactos para el aprendizaje de la física y la química.

**Tabla 3.** Recreación de algunos artefactos del gabinete de Bargalló por parte de alumnos de 2º y 3º ESO del CEIPS Vicente Aleixandre de la Comunidad de Madrid

<b>Molinete de vapor</b>	
	
<b>Brújula casera</b>	
	
<b>Dilatador de sólidos</b>	
	
<b>Medidor de densidad de sólidos</b>	
	
<b>Péndulo eléctrico</b>	
	

de su obra *El gabinete de física*, el alumnado tuvo que investigar en grupos los pormenores del artefacto asignado. Dicha investigación, a partir de la fuente histórica, implicó desgranar los principios físicos y/o químicos en los que se basaba el funcionamiento de los misteriosos artefactos, así como justificar la elección de los materiales con los que se iban a recrear. Dichos materiales consistían en objetos cotidianos y residuos (como bolígrafos usados, botes vacíos, etc.). Se pretende así fomentar la conciencia ambiental desde la materia de Física y Química.

La Tabla 3 recoge la comparativa entre las ilustraciones de los artefactos originales, realizadas por el propio Modesto Bargalló e incluidas en *El gabinete de física*, y los confeccionados por los alumnos de 2º y 3º ESO del CEIPS Vicente Aleixandre, centro público de la Comunidad de Madrid. La experiencia ilustra cómo el uso didáctico de la historia de la química y el aprendizaje experimental son perfectamente compatibles.

Los artefactos anteriores exigieron al alumnado trabajar e integrar contenidos de química y de física, tal y como se resume en la Tabla 4.

**Tabla 4.** Contenidos de Física y Química vinculados a los distintos artefactos del gabinete de Modesto Bargalló construidos por el alumnado de 2º y 3º ESO

Contenidos de física	Contenidos de química
<b>Molinete de vapor</b>	
Tipos de energía (térmica y cinética)	Conducción del calor en metales
Cambios de estado	
<b>Brújula</b>	
Magnetismo	Propiedades magnéticas de algunos metales
<b>Dilatador de sólidos</b>	
Calor y temperatura	Conducción del calor en metales
Dilatación de sólidos	
<b>Medidor de densidad de sólidos</b>	
Densidad y fluidos	Medida de volúmenes de líquidos con materiales del laboratorio
<b>Péndulo eléctrico</b>	
Fuerza eléctrica	Naturaleza eléctrica de la materia y estructura atómica


La Tabla 5 incluye más información sobre esta experiencia didáctica.

Tal y como puede colegirse, el uso de la historia de la ciencia en el aula de Física y Química permite crear nexos de unión entre ambas ciencias, motivo por el cual esta experiencia ha sido de especial interés como proyecto final, a fin de que el alumnado aplique, repase y relacione los contenidos de física y de química trabajados a lo largo de todo el curso escolar.

**Tabla 5.** Detalles sobre la recreación del gabinete del profesor Modesto Bargalló en el marco de la exposición virtual *Modesto Bargalló. Haciendo ciencia en las aulas*

**Detalles sobre la experiencia didáctica**

Acceso vía QR

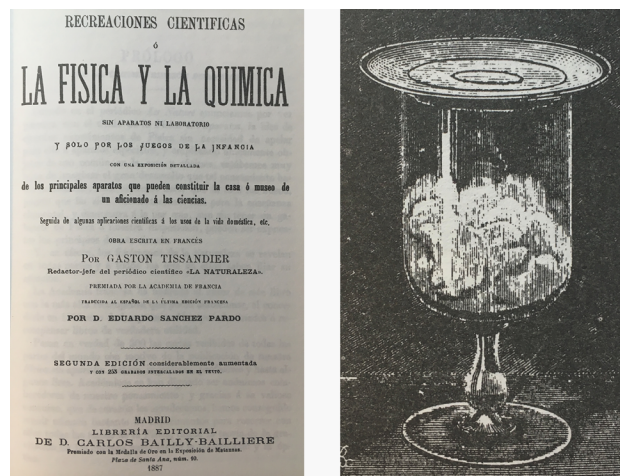


Acceso vía URL

<https://modestobargallo.jimdofree.com/aula-bargallo%C3%B3/recreaci%C3%B3n-del-gabinete-de-bargallo%C3%B3/>

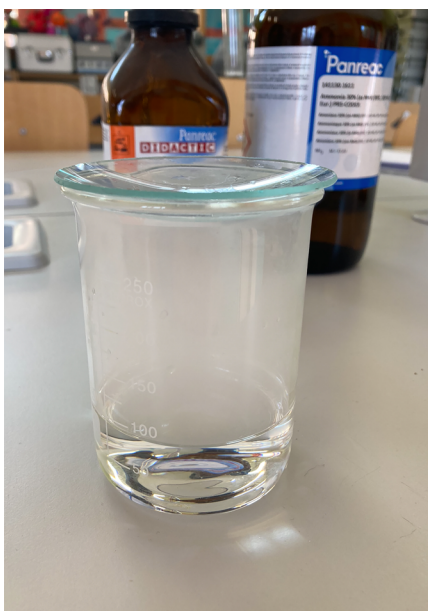
### Un truco de magia histórico con mucha química: la copa misteriosa y el aprendizaje por indagación en 3º-4º ESO

Otro ejemplo de experiencia didáctica capaz de combinar historia de la ciencia y trabajo experimental lo constituye la recreación del truco que el químico francés Gaston Tissandier (1843-1899) incluyó en su obra *Recreaciones científicas ó La Física y la Química sin aparatos ni laboratorios* (Figura 5).<sup>[20]</sup>



**Figura 5.** Cubierta de *Recreaciones científicas* e ilustración del «truco de magia» tomado de la misma.<sup>[20]</sup>

Esta obra incluía diversos experimentos de física y química diseñados para sorprender a la audiencia en un contexto en el que la ciencia constituía una forma de ocio y divertimento para ciertos sectores sociales. El «truco» seleccionado consistía en que al fumar cerca de una copa con agua tapada, el humo no atravesaba la copa. Sin embargo, transcurrido cierto tiempo, el humo se concentraba en el interior de la copa. Lejos de la magia, el fundamento de lo ocurrido se encontraba en la química. Así, el líquido del interior de la copa no era agua corriente, sino una disolución acuosa de ácido clorhídrico. La cara interna de la tapa estaba impregnada en amoníaco. Así, el humo blanco que se concentraba en el interior de la copa no era humo de tabaco sino cloruro de amonio formado *in situ* por la reacción de neutralización entre el cloruro de hidrógeno y el amoníaco (Figura 6).



**Figura 6.** Formación del cloruro de amonio (humo blanco), que permanece en suspensión, por reacción entre el cloruro de hidrógeno y el amoníaco.

La experiencia didáctica integró este sencillo experimento (fácilmente reproducible en la actualidad) en la metodología propia del aprendizaje por indagación. Así, el alumnado partió de un problema de partida cuyo abordaje implicó formular y responder una pregunta investigable. Finalmente, se concluyó con una pregunta de consolidación para reforzar aprendizajes. La Figura 7 recoge la secuencia didáctica adoptada.

**1. Pregunta no investigable:** ¿Por qué aparecía el humo en la copa cuando ya se había disipado el humo en el exterior?



¿Y si el humo se generase dentro de la copa?

**2. Identificación de variables y factores:** El «agua» de la copa, el tiempo de espera, el humo del interior de la copa.



HCl (P.E.:  $-33,3\text{ }^{\circ}\text{C}$ )  
 $\text{NH}_3$  (P.E.:  $-85\text{ }^{\circ}\text{C}$ )  
 $\text{NH}_4\text{Cl}$  (P.F.:  $338\text{ }^{\circ}\text{C}$ )

**3. Pregunta investigable:** ¿Qué sucede si ponemos en contacto los reactivos que había en el experimento original?



¡Recreación experimental!

**4. Pregunta de consolidación:** ¿Cómo llamamos al HCl?

**Figura 7.** Secuencia didáctica seguida durante el desarrollo de la actividad.

Sin realizar el experimento, a la pregunta de partida el alumnado respondió con diferentes posibilidades, hasta proponer que quizá el humo de la copa se genera dentro de la misma y no corresponde al humo de tabaco exhalado por el supuesto mago. Al plantearse esta opción, se guió al alumnado en la identificación de potenciales variables y factores a tener en cuenta para desgranar el fundamento químico del supuesto truco. Cuando se plantea que quizá el humo se forma por algún tipo de reacción química dentro de la copa, se les proporciona los datos de punto de fusión y ebullición de las especies químicas implicadas, de donde coligen que el amoníaco y el cloruro de hidrógeno durante la reacción se encuentran en fase gas, mientras que el cloruro de amonio formado se encuentra en estado sólido. Este aspecto contrasta con su idea original sobre el carácter gaseoso del humo blanco.

Finalmente, dado que el alumnado de 3<sup>o</sup> y 4<sup>o</sup> ESO ya tiene adquiridas nociones básicas de formulación y nomenclatura de compuestos inorgánicos, se les plantea si al HCl se le debería llamar cloruro de hidrógeno o ácido clorhídrico.

La mayoría del alumnado se decantó por esta última, al actuar como ácido. Sin embargo, la reacción de neutralización no transcurre en disolución, sino en fase gas. Esto conduce a colegir que la denominación adecuada es cloruro de hidrógeno. Se evita así la concepción errónea que asume que las reacciones de neutralización ocurren siempre en disolución. Al mismo tiempo, permite incidir en que las denominaciones de cloruro de hidrógeno y ácido clorhídrico no son sinónimas, pues mientras que la primera alude al compuesto HCl, la segunda se refiere a la disolución acuosa de este compuesto en agua.<sup>[21]</sup> Sin duda, una experiencia que permite integrar aprendizajes sobre sistemas materiales, reacciones químicas y lenguaje químico. La Tabla 6 incluye información complementaria sobre la experiencia didáctica. Cabe apuntar que si bien la experiencia ha sido diseñada como un trabajo práctico investigativo por indagación, también puede usarse como demostración experimental o experimento de cátedra.

**Tabla 6.** Detalles sobre la recreación del experimento descrito por Tissandier en *Recreaciones científicas*

Detalles sobre la experiencia didáctica	
Acceso vía QR	Acceso vía URL
	<a href="https://www.unprofedeciencias.es/caso-misterioso-humo/">https://www.unprofedeciencias.es/caso-misterioso-humo/</a>

**Contar la historia de la química a la joven ciudadanía: cautelas y precauciones**

Más allá de las experiencias didácticas anteriores, narrar la historia de la química en nuestras clases es una práctica común a la hora de abordar ciertos contenidos curriculares

como el desarrollo de los modelos atómicos o de la tabla periódica. No obstante, dada la todavía poca permeación de las investigaciones en historia de la ciencia en materiales y contextos educativos, este tipo de narrativas docentes pueden incurrir en aspectos cuestionados y cuestionables. En esta línea, la creación de puntos de encuentro y diálogo entre profesorado de enseñanza secundaria e investigadores en didáctica e historia de la ciencia se erige como una estrategia fundamental para mejorar las narrativas históricas escolares sobre ciencia. Se trata de mejoras necesarias no para saturar a nuestros estudiantes de fechas clave o nombres de científicos, sino para seleccionar aquellos capítulos de la historia de la ciencia de mayor potencial didáctico de modo que además de permitirnos fomentar el aprendizaje de ciertos contenidos, no introduzcan visiones deformadas sobre la ciencia. La historia de la química ofrece numerosos ejemplos para ilustrar esta cuestión.

Así, si bien es natural la admiración por las grandes figuras de la historia de la química, la misma no debe eclipsar las dificultades, errores y contradicciones que estas encontraron en su quehacer científico. Se humaniza así la química ante nuestros alumnos, revelándola como una actividad humana fascinante, pero no exenta de dificultades. Se les descubre así como una apasionante aventura intelectual que exige esfuerzos, desvelos e inquietudes para adentrarse en los misterios de la materia y sus cambios, evitando presentarla como obra de personalidades dotadas de cualidades que conciban inalcanzables. También es especialmente pertinente incidir en la naturaleza colectiva de la química, la importancia que tuvo el diálogo y la colaboración entre los químicos y químicas de tiempos pasados, otorgando a estas últimas un lugar mucho más reconocido que el que suele caracterizar las narrativas escolares. Especial cuidado merece la presentación de modelos y teorías que se sucedieron en el tiempo. En este punto suele ser habitual incidir en que una teoría o modelo se abandona cuando no permite justificar la evidencia experimental. Sin embargo, es habitual que un modelo o una teoría sufra modificaciones para poder explicar ciertos hechos experimentales, antes de ser abandonado por un nuevo modelo o teoría.

Atendidas estas cautelas, la historia de la química en nuestras clases puede desempeñar un sinfín de usos educativos: desde anécdotas curiosas para captar la atención de nuestros alumnos hasta fundamentar actividades experimentales, pasando por la promoción de la lectura o el recorrido por los fundamentos del conocimiento químico actual. Solo una muestra de las que las líneas anteriores han pretendido dar cuenta transitando del currículo al aula.

## A modo de conclusión

La historia de la química es una herramienta didáctica fundamental para el profesorado de Física y Química. A través de las páginas anteriores se ha ofrecido una modesta muestra de lo mucho que puede aportar el prisma de la historia de la ciencia a la didáctica de la química conciliando la literatura académica con la acción docente. Lejos de modas

pedagógicas o búsqueda de panaceas educativas, el valor educativo de la historia de la química reside en su potencial para el aprendizaje significativo, contextualizado, crítico y experimental de la química, objetivos clave de nuestra labor alfabetizando en ciencias a la joven ciudadanía en las aulas de secundaria.

Llevar la historia de la química a las aulas puede ayudarnos a promover el aprendizaje significativo de la química, en la medida que ayuda a derribar ideas previas erróneas del alumnado sobre conceptos químicos y sobre la propia naturaleza de la química como ciencia. También ayuda a contextualizar la química como práctica humana, valorando el esfuerzo que subyace tras leyes, teorías y ecuaciones, en ocasiones centenarias. Los docentes podemos encontrar en la historia de la química una oportunidad para fomentar el pensamiento crítico en el alumnado, de lo que dan cuenta controversias sociocientíficas como el caso Lafarge. Usar la historia de la química también nos puede ayudar a promover el aprendizaje experimental de esta ciencia. En este sentido, la historia de la química constituye un valioso repositorio de experimentos que pueden inspirar no pocas prácticas con nuestro alumnado, como las recreaciones científicas de Tisandier. En este punto, merece especial mención las muchas oportunidades que nos puede ofrecer conocer el pasado de nuestra profesión como docentes de ciencias. Así, la historia de la educación científica nos releva propuestas tan inspiradoras como el gabinete del profesor Bargalló.

Sirvan estas líneas como un alegato al uso de la historia de la química en nuestras aulas de secundaria y como una invitación a valorar el pasado de la química y de nuestra profesión docente como un valioso patrimonio educativo, científico, histórico y cultural.

## Agradecimientos

El autor desea expresar su agradecimiento a la Real Sociedad Española de Química por la concesión del Premio a la Tarea Educativa y Divulgativa para Profesores de Enseñanza Preuniversitarias en su convocatoria de 2022.

## Bibliografía

- [1] O. Hannaway, *The chemists and the world: the didactic origins of chemistry*, John Hopkins University Press. 1975.
- [2] M. J. Nye, *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry. Dynamics of matter and dynamics of disciplines (1800-1950)*, University of California Press. 1993.
- [3] J. A. Chamizo (ed.), *Historia y filosofía de la química. Apuntes para la enseñanza*, Siglo XXI. 2010.
- [4] W. Ostwald, *Elementos de Química*, Gustavo Gili. 1917. p. 2.
- [5] L. Moreno Martínez, Modesto Bargalló en España (1894-1939): una biografía entre la historia de la educación y la historia de la ciencia, *Hist. y Mem. Educ.*, **2021**, 13, 635-674.
- [6] L. Moreno Martínez, El boletín Faraday (1928-29) y las relaciones entre historia y didáctica de las ciencias, *Ens. Cien.*, **2021**, 39(3), 215-230.



- [7] J. B. Conant, *Harvard Case Studies in Experimental Science*, Harvard University Press. 1957, p. VII.
- [8] J. R. Bertomeu Sánchez, A. García Belmar, La historia de la química: Pequeña guía para navegantes. Parte I: Viejas y nuevas tendencias, *An. Quím.*, **2008**, 104(1), 56-63.
- [9] M. R. Matthews, Historia, filosofía y enseñanza de las ciencias: la aproximación actual, *Ens. Cien.*, **1994**, 12, 256.
- [10] L. Moreno Martínez, M. A. Calvo Pascual, La historia de la química en el currículo de ESO y Bachillerato (LOE): Una revisión interdisciplinar para la investigación didáctica, *Ens. Cien.*, **2017**, 35(2), 147-160.
- [11] Orden ECD/65/2015, de 21 de enero, por la que se describen las relaciones entre las competencias, los contenidos y los criterios de evaluación de la Educación Primaria, la Educación Secundaria Obligatoria y el Bachillerato, BOE núm. 25, 29 de enero de 2015, p. 6994.
- [12] Real Decreto 217/2022, de 29 de marzo, por el que se establece la ordenación y las enseñanzas mínimas de la Educación Secundaria Obligatoria, BOE núm. 76, 30 de marzo de 2022, p. 41663.
- [13] L. Moreno Martínez, A. de la Fuente Fernández, A. Rodríguez-Villamil Hernández, Física y Química en la LOMLOE: Una mirada al nuevo currículo de ESO y Bachillerato, *Faraday. Bol. Fis. Quím.*, **2022**, 37, 4-14.
- [14] L. Moreno Martínez, M. A. Calvo Pascual, ¿Cómo presentan la historia de la química los libros de texto de Educación Secundaria?
- Un análisis desde la didáctica y los estudios históricos de la ciencia, *Rev. Eureka. Ens. Div. Cien.*, **2019**, 16(1), 110101.
- [15] L. Moreno Martínez, M. A. Calvo Pascual, Las narrativas históricas en los libros de texto de ESO y Bachillerato. Análisis de dos mitos fundacionales de la química, *An. Quím.*, **2018**, 114(3), 172-180.
- [16] L. Moreno Martínez, A. Lykknes, The Periodic System and the Nature of Science: The history of the periodic system in Spanish and Norwegian Secondary School Textbooks, *Substancia. Int. Jour. Hist. Chem.*, **2019**, 3(2.4), 61-74.
- [17] L. Moreno Martínez, Los modelos atómicos en los libros de texto. Pensar críticamente la historia de la ciencia, *Alambique*, **2018**, 93, 18-25.
- [18] J. R. Bertomeu Sánchez, *La verdad sobre el caso Lafarge. Ciencia, justifica y ley durante el siglo XIX*, El Serbal. 2015.
- [19] L. Moreno Martínez, ¿Tradición o innovación en la enseñanza de la física? El gabinete del profesor Modesto Bargalló, *Rev. Esp. Físic.*, **2022**, 36(1), 36-40.
- [20] G. Tissandier, *Recreaciones científicas o la física y la química sin aparatos ni laboratorio*, Librería Don Carlos Bailly-Bailliere. 1887.
- [21] Resumen de las Normas IUPAC 2005 de nomenclatura de química inorgánica para su uso en enseñanza secundaria y recomendaciones didácticas. Real Sociedad Española de Química, 2016.

¿Quieres ser socio de una de las  
sociedades científicas más  
importantes de España?



Si tienes menos de  
25 años, hazte socio  
de la RSEQ por  
10 EUR

  
 Real Sociedad Española de Química  
[www.rseq.org](http://www.rseq.org)

## ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA



A. Fuente-Ballesteros<sup>1</sup>

A. Mª Ares Sacristán<sup>1</sup>



J. Bernal del Nozal<sup>1</sup>

Grupo de Investigación TESEA (Técnicas de Separación y Análisis Aplicado)

I.U. CINQUIMA

Universidad de Valladolid

Paseo de Belén, 5

Campus Miguel Delibes

47011 Valladolid, España

C-e: [adrian.fuente.ballesteros@uva.es](mailto:adrian.fuente.ballesteros@uva.es)

Recibido: 07/03/2022

Aceptado: 20/05/2022

# Despertando la vocación científica en los jóvenes a través de actividades de divulgación en química

Adrián Fuente-Ballesteros, Ana Mª Ares Sacristán  
y José Bernal del Nozal

**Resumen:** La divulgación científica es un instrumento de formación personal y profesional a través del cual el estudiante adquiere un conjunto de aptitudes que posibilitan su desarrollo pleno en la sociedad. Esta tarea debe implementarse desde los más jóvenes y es por ello que los docentes deben formar a estos estudiantes para que adquieran un espíritu crítico y un aprendizaje significativo. Desde el grupo de investigación de Técnicas de Separación y Análisis Aplicado (TESEA) de la Universidad de Valladolid se ha realizado una propuesta de divulgación en la Semana de la Ciencia de Castilla y León 2021 para abordar esta situación.

**Palabras clave:** química, divulgación, curiosidad, educación, estudiantes.

**Abstract:** Science dissemination is an instrument of personal and professional training through which students acquire a set of skills that enable their full development in society. This task must be implemented from the very youngest and that is why teachers must train these students to get a critical spirit and meaningful learning. From the research group of Separation Techniques and Applied Analysis (TESEA) of the University of Valladolid, an outreach proposal has been made within the framework of the Science Week of Castilla y León 2021 to tackle this situation.

**Keywords:** chemistry, dissemination, curiosity, education, students.

## Introducción

Los avances tan rápidos en química han provocado que en la actualidad exista un excesivo flujo de información científica. Aunque la cuestión no radica en la cantidad, sino en la calidad, últimamente la ciencia se ha visto difuminada por el fuerte poder de los medios de comunicación, especialmente en lo referente a televisión, redes sociales y publicidad.

La divulgación en química es un instrumento de formación tanto personal como profesional a través del cual el alumno adquiere un conjunto de valores y aptitudes que posibilitan su desarrollo pleno en la sociedad. Esta tarea debe implementarse desde los más jóvenes y es por ello que los docentes deben formar a estos estudiantes para que adquieran un espíritu crítico y un aprendizaje significativo.<sup>[1]</sup> En los últimos cursos universitarios, el rol del docente debe complementarse con la orientación de los alumnos. Esto debe hacerse con el objetivo de mejorar su inserción en el mercado laboral proporcionando consejos y recursos que potencien la toma de decisiones.

En general, el alumnado tiene la visión de que la química está limitada a un ámbito puramente académico. No obstante, en el día a día, se es testigo de una gran variedad

de fenómenos que, tratados convenientemente, pueden servir para tratar los contenidos del currículo. De este modo, se consigue i) Acercar la química ii) Establecer un vínculo entre los contenidos teóricos y experimentales de una forma lúdica y iii) Transmitir la utilidad de esta ciencia en la vida cotidiana.<sup>[2]</sup>

Además, las oportunidades que brinda la química son múltiples y variadas, por lo que se debe hacer ver a la sociedad la importancia de prestar atención a todos estos fenómenos para que no pasen desapercibidos. Se pretende la creación de un nexo entre la ciencia de la calle y la ciencia de la escuela, lo que acomete uno de los objetivos más utópicos: alfabetizar de forma científica a toda la sociedad<sup>[3]</sup>, especialmente a los estudiantes de ciencias de cualquier nivel educativo.

Por las razones anteriormente expuestas, desde el grupo de investigación TESEA de la Universidad de Valladolid se ha realizado una propuesta de divulgación titulada «La Química dentro del grupo TESEA» en el marco de las actividades relacionadas con la Semana de la Ciencia 2021 que ha estado compuesta de dos ejes: i) Taller de laboratorio dirigido a estudiantes de Bachillerato y de Formación Profesional Básica ii) Charla de orientación dirigida a estudiantes de los últimos cursos del grado en Química.

Los objetivos son los siguientes i) Motivar la vocación científica de los jóvenes ii) Mostrar la utilidad e importancia de la química en la resolución de problemas iii) Descubrir el porqué de las cosas y sus razones iv) Despertar la curiosidad por la química y hacer crecer la pasión de esta disciplina en los jóvenes v) Mejorar el vínculo alumno-ciencia vi) Dotar a los alumnos de una visión holística de las oportunidades que les brinda la química vii) Proporcionar a los alumnos herramientas y posibilidades para su futuro laboral.

## Metodología

El grupo de investigación TESEA perteneciente al Instituto Universitario CINQUIMA de la Universidad de Valladolid ha organizado y realizado dos actividades de divulgación científica dentro de la Semana de la Ciencia (8-14 noviembre 2021) organizada por la Unidad de Cultura Científica y el Parque Científico de la Universidad de Valladolid.

Las actividades realizadas han sido un taller y una charla de divulgación científica en el área de química. Estas se han dirigido a estudiantes de enseñanzas medias (Formación Profesional y Bachillerato) y alumnos universitarios empleando una metodología participativa.

En el primer caso, algunas de las prácticas propuestas las han llevado a cabo los propios alumnos siendo ellos protagonistas de su propio aprendizaje (Figuras 1, 2 y 3). Se ha hecho hincapié en la interacción con los alumnos lanzando preguntas, aportando ejemplos y corrigiendo las respuestas incorrectas. Se ha establecido un flujo de información bidireccional dinámico que ha generado debate induciendo al reordenamiento y a la ampliación del conocimiento.

En el segundo caso, al finalizar la intervención de la charla expositiva, se ha planteado una ronda de preguntas que ha permitido ahondar en las inquietudes personales de los alumnos. A través de los emails de los profesores se han resuelto las dudas que han surgido semanas después de la finalización de la charla.

## Muestra

Los alumnos procedían de Valladolid (España) y estaban agrupados como muestra la Tabla 1.

Tabla 1. Alumnos participantes.

Nº de alumnos	Curso	Ratio Hombres:Mujeres
13	1º Bachillerato	7:6
13	2º Formación Profesional Básica (FPB): Electricidad y Electrónica	13:0
35	3º y 4º grado en Química	14:21

Se ha procurado adaptar el nivel de las actividades a los alumnos de enseñanzas medias dado que previamente se conocía su procedencia tan diversa.

## Instrumentos y técnicas

Las técnicas seleccionadas junto a los instrumentos que han permitido recoger información y datos, evaluar los conocimientos adquiridos, el impacto y el grado de satisfacción, son:

- 1) Realizar una breve encuesta de satisfacción (ver Tabla 2) al finalizar las sesiones a través de un cuestionario. La elaboración ha sido propia y ha permitido recopilar información cualitativa globalizadora de la muestra y establecer hipótesis de estudio. En el caso de estudiantes de enseñanzas medias la encuesta era de respuesta cerrada mientras que para alumnos universitarios se combinaron preguntas cerradas y abiertas. La plataforma empleada para crear la encuesta fue Microsoft Forms.

Tabla 2. Características de la encuesta de satisfacción.

Público	Tipos de preguntas
Alumnos no universitarios	7 cerradas
Alumnos universitarios	4 cerradas + 2 abiertas

- 2) Realizar un test Kahoot! en los estudiantes de enseñanzas medias para constatar el grado de afianzamiento de los conceptos.
- 3) Observación en tiempo real y como participante.

En ambos casos, para tener una constancia del número de asistentes, se envió previamente un formulario de inscripción. Al comienzo de las prácticas se entregaron los guiones a los alumnos para que ellos pudieran leerlos y seguir el protocolo. Al finalizar, se entregaron los certificados de participación a los estudiantes.

## Propuesta

### Taller

El taller «Desafíos Científicos: Experimentos de química que te dejarán con la boca abierta» se desarrolló en dos sesiones independientes con los dos grupos de estudiantes de enseñanzas medias. El total de alumnos se dividió en grupos de 4 personas y la duración del taller fue de dos horas. El título de las prácticas junto a su objetivo y la categoría a la que pertenecen, se recoge en la Tabla 3.

### Materiales

Los elección de las distintas prácticas se hizo teniendo en cuenta que los materiales que emplearan tuvieran las siguientes características: i) Bajo coste ii) Uso sencillo iii) Baja peligrosidad iv) No generan grandes residuos. Algunos de estos fueron: a) Material de uso común en el laboratorio como

Tabla 3. Experiencias realizadas.

Título	Objetivo	Categoría
El semáforo químico	Observar las distintas coloraciones de un indicador rédox	Óxido-reducción
El chupinazo	Producir la descomposición del agua oxigenada y entender la influencia del empleo de catalizadores	Catálisis
Los colores cambian	Comprender la influencia del estado físico de los reactivos	Cinética
La botella azul	Observar las distintas coloraciones de un indicador rédox	Óxido-reducción
Juego de monedas	Cambiar la apariencia física de las monedas empleando reacciones químicas	Óxido-reducción
Lluvia de oro	Formar un precipitado y ver la variación de la solubilidad con la temperatura y la cristalización	Precipitación
Embellecimiento de objetos cotidianos	Realizar una electrodeposición de cobre sobre un objeto metálico	Electroquímica

matraces aforados, probetas, vaso de precipitados, vidrios de reloj, pipetas, espátulas y varillas b) Indicadores como azul de metileno y carmín de indigo c) Reactivos como hidróxido sódico, ácido clorhídrico, amoníaco, peróxido de hidrógeno, yoduro de potasio, dióxido de manganeso, dióxido de plomo, glucosa, nitrato de plomo (III), cinc en polvo y sulfato de cobre.

### Procedimiento

El procedimiento a seguir en las prácticas se resumió de forma esquemática en los guiones que se entregaron a los alumnos. Además, previamente se explicaron en la pizarra los conceptos básicos y el modo de operar. A continuación se muestra un ejemplo que ilustra la experiencia de «Juego de monedas».

**Parte 1: Formación de una moneda de plata.** Se lavan monedas de cinco céntimos con la ayuda de un estropajo usando abundante agua y jabón. Es importante limpiar bien la superficie de la suciedad que pueda haber para que el resultado quede uniforme. Después, se disuelven en un vaso de precipitados de 100 mL, cuatro cucharadas de hidróxido sódico en 50 mL de agua. Encender la placa calefactora a 80°C y agitar hasta disolución completa. Añadir media cucharada de cinc en polvo, remover y sumergir las monedas con unas pinzas. Aumentar la temperatura hasta 100°C. Revisar periódicamente las monedas y darlas la vuelta para que la deposición ocurra por ambas caras. Tras varios minutos sumergir las monedas en agua para lavarlas y secarlas para apreciar el recubrimiento de color plateado.



Figuras 1, 2 y 3. Experiencias de laboratorio realizadas con alumnos no universitarios.

**Parte 2: Formación de una moneda de oro.** Cubrir la placa calefactora con papel de aluminio y colocar las monedas de color plata de la experiencia anterior. Calentar hasta 100°C durante 2 minutos. Las monedas irán tomando color dorado que simula el oro.

### Charla

La charla «La vida más allá del grado en Química: alternativas para tu futuro» se desarrolló en dos horas de manera presencial y telemática por la situación de la COVID-19.

Los puntos a tratar en esta presentación fueron: i) Salidas del grado en Química ii) Plataformas para buscar trabajo iii) Tipos de másteres iv) Becas para jóvenes investigadores v) Programas de prácticas remuneradas para estudiantes y graduados vi) La descarga de artículos científicos vii) La importancia del inglés viii) El currículum, carta de presentación y motivación ix) Otros enlaces de interés x) Dudas y preguntas.

## Resultados

Se ha evidenciado una diferencia de nivel entre los grupos de FPB y Bachillerato, lo cual puede deberse a los requisitos exigidos para cursar esta primera titulación.

En todas las ocasiones, el grado de participación ha sido alto lo que ha motivado el planteamiento de preguntas y ha inducido al debate. Respecto al modo de trabajo, los grupos de estudiantes no universitarios han trabajado como un equipo. No ha existido ningún tipo de rivalidad o enfrentamiento, lo que ha permitido un ambiente de trabajo relajado. El grado de homogeneidad de los estudiantes universitarios ha sido mucho mayor sin encontrarse evidencias significativas entre ellos.

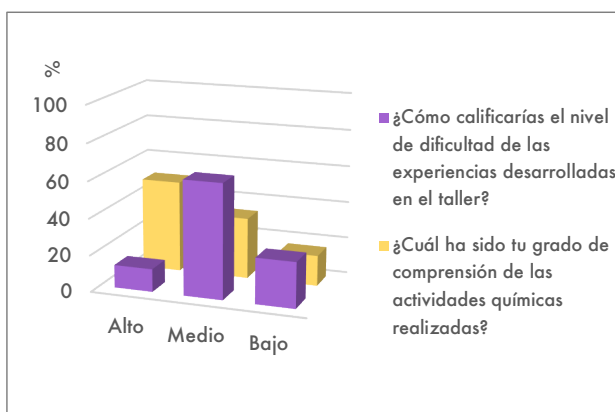
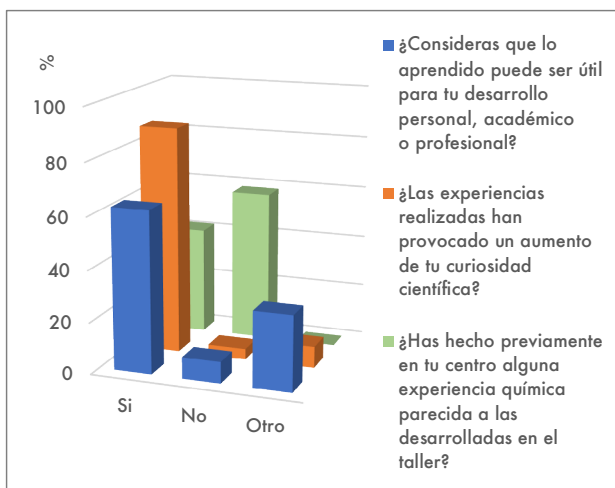
### Cuestionario Kahoot!

Se registraron un total de 126 aciertos y 68 fallos lo que representa un 69% y 37% respectivamente. La nota media obtenida fue de 7 sobre 10. En ambos grupos (FPB y Bachillerato) se observó que el mayor número de fallos se producía en la práctica «Embellecimiento de objetos cotidianos», mientras que, por el contrario, el mayor número de aciertos fue en «Juego de monedas». Este hecho puede explicarse debido a que los conceptos de electroquímica no han sido todavía abordados en el periodo en el cual se impartió esta actividad.

### Encuesta de satisfacción

**Alumnos no universitarios.** Todos los alumnos estaban altamente satisfechos tanto con las actividades del taller como con la organización y recomiendan este tipo de iniciativas a otros estudiantes. Las Figuras 4 y 5 muestran los resultados en forma de gráfico 3D de barras. Más del 50% considera de utilidad lo aprendido y que esto tendrá una repercusión positiva en su futuro. Un 88% de estudiantes piensan que estas experiencias han provocado un aumento de la curiosidad científica y la mitad de ellos no había realizado ninguna experiencia de este tipo previamente. Respecto del grado de comprensión de estas, el 50% de los estudiantes considera que la comprensión ha sido alta y un 33% refleja que la comprensión ha sido media.

**Alumnos universitarios.** La mayoría de los estudiantes comentó que la charla había sido muy completa y se abordaron tópicos importantes que les ayudaron a resolver sus dudas



Figuras 4 y 5. Comparación de las respuestas de los estudiantes.

sobre sus oportunidades y futuro. El 100% de los asistentes manifestó que recomendaría la charla a otros estudiantes y el 50% de ellos había oído hablar brevemente de estos temas. Consideran que sería recomendable facilitarles algunos de los materiales explicados durante la jornada como una lista de páginas web para encontrar trabajo como químico. Destacan que sería una buena idea que este tipo de iniciativas se repitieran todos los años en tercer o cuarto curso del grado en Química.

## Conclusiones y perspectivas futuras

Esta propuesta de actividades de divulgación científica constituye una primera aproximación hacia la transferencia de conocimiento entre los jóvenes. A través de la realización de estas experiencias, se ha querido despertar la curiosidad científica de los estudiantes de enseñanzas medias. Estos estudiantes han entendido la química que se esconde detrás de un conjunto de prácticas de laboratorio mejorándose el vínculo alumno-ciencia. Del mismo modo, se ha mostrado la utilidad de la química en la resolución de problemas. Además, este proyecto ha servido a los estudiantes como una

primera toma de contacto con un laboratorio de Química Analítica. Por otro lado, se ha formado a los estudiantes universitarios con recursos, herramientas y consejos que les permitirá tomar decisiones con una actitud más crítica. En este sentido, se les ha dotado de una visión holística de las oportunidades y beneficios que les brinda la química.

Se ha verificado la efectividad de las experiencias propuestas a través del interés mostrado por el alumnado por continuar implementando este tipo de actividades. Lógicamente se han encontrado diferencias entre los alumnos procedentes de Bachillerato y Formación Profesional Básica que se explican conociendo previamente su distinto contexto y origen sociocultural. El grado de satisfacción de los participantes y los resultados han sido medidos y evaluados a través de un cuestionario Kahoot! y una encuesta de satisfacción. Se ha constatado gracias a ambos instrumentos el impacto positivo de esta iniciativa.

En cuanto a líneas de continuidad de este trabajo, a la luz de los resultados obtenidos en esta intervención, se ha corroborado la necesidad por continuar realizando actividades de divulgación científica en el área de la química. En nuestro grupo de investigación TESEA tenemos en marcha distintos proyectos de esta índole que nos permitirán trabajar de un modo similar para recopilar más información. Además, a raíz del panorama actual donde cada vez son más las noticias falsas, mitos y desinformación sobre ciencia que

encontramos en las redes sociales, se hacen inminentemente necesarias este tipo de actividades para conseguir lidiar y solventar esta situación.

## Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo del Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física y la Química (GEDH) de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) y de la Unidad de Cultura Científica de la Universidad de Valladolid (UVa Divulga) por el apoyo económico a la actividad «La Química dentro del grupo TESEA».

## Bibliografía

- [1] Pinto G., Martín M., Martín M.T., Prolongo M.L. Enseñanza y divulgación de la química y la física. *Garceta Grupo Editorial*, Madrid. **2012**, 25-32.
- [2] Blanco A., España E., Joaquín A. Competencias y prácticas científicas en problemas de la vida diaria. *Alambique: Didáctica de las ciencias experimentales*. **2018**, 45-51.
- [3] Fernández M., Jiménez-Granados A. La química cotidiana en documentos de uso escolar: análisis y clasificación. *Educ. quim.* **2014**, 25 (1), 7-13.



# Validación del uso de medidores de pH de bajo coste en valoraciones ácido/base

Antonio Tomás-Serrano y Marta Pastor-Belda

## ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA



A. Tomás-Serrano<sup>1</sup>

M. Pastor-Belda<sup>2</sup>

<sup>1</sup> IES Vega del Táder  
Avda. Gutiérrez Mellado  
Molina de Segura,  
30500 Murcia.

<sup>2</sup> Universidad de Murcia,  
Departamento de Química Analítica,  
Facultad de Química, Campus de  
Espinardo, 30100 Murcia  
Murcia, España.

C-e: [atserrano@gmail.com](mailto:atserrano@gmail.com)

C-e: [marta.pastor@um.es](mailto:marta.pastor@um.es)

Recibido: 27/12/2021

Aceptado: 26/07/2022

**Resumen:** El aprendizaje de conceptos químicos más complejos suele verse limitado al uso de instrumentación sencilla, pero muy especializada que, generalmente, se encuentra en todos los laboratorios, aunque a un precio relativamente elevado. Sin embargo, en los últimos años, los avances tecnológicos y la globalización han hecho posible la aparición de instrumental de bajo coste (balanzas, termómetros, manómetros, medidores de pH, etc.) que, a pesar de su baja exactitud, pueden resultar muy útiles para detectar cambios significativos en una magnitud y, por tanto, pueden ser utilizados en experiencias didácticas fuera de los laboratorios tradicionales. Este trabajo se centra en la validación de medidores de pH de bajo coste no profesionales para su uso como detectores potenciométricos en valoraciones ácido/base. Se ha validado su uso en valoraciones ácido fuerte/base fuerte y ácido débil/base fuerte obteniéndose únicamente un 1% de error con respecto a la curva teórica en ambos casos. Así, estos medidores de pH se han utilizado para la determinación del contenido de amoníaco de un limpiador doméstico tras su valoración con ácido clorhídrico obteniéndose resultados muy satisfactorios.

**Palabras clave:** Medidores de pH de bajo coste, valoraciones potenciométricas, curva de valoración ácido/base, punto de equivalencia.

**Abstract:** The study of complex chemical concepts is often limited to the use of simple and specialised instrumentation, that is commonly found in all laboratories, although at a relatively high price. However, in recent years, technological advances and globalisation have made possible the emergence of low-cost instruments (balances, thermometers, manometers, pH meters, etc.) that, despite their low accuracy, can be very useful for detecting significant changes in a magnitude and, therefore, they can be used for didactic experiences outside traditional laboratories. This work focuses on the validation of a low-cost non-professional pH meter, used in swimming pools and fish tanks, for use them as potentiometric detector in acid-base titrations. Their use has been validated in strong acid/strong base and weak acid/strong base titrations, obtaining only a 1% error respecting to the theoretical curve in both cases. Thus, these pH-meters have been used to determine the ammonia content of a household cleaner after titration with hydrochloric acid, obtaining excellent results.

**Keywords:** Low cost pH-meters, potentiometric titrations, acid/base titration curve, equivalence point.

## Introducción

La valoración, o titulación, ácido/base es una de las técnicas analíticas más utilizadas para conocer la concentración de un ácido o una base (reactivo valorado) mediante una reacción de neutralización, conociendo la concentración de uno de los reactivos implicados en la reacción (reactivo valorante). Para ello se debe determinar, con la mayor exactitud posible, el punto de equivalencia de la reacción, es decir, el punto en el cual ocurre un cambio brusco de pH en la disolución.

Este cambio puede ser detectado de varias formas; la más sencilla consiste en añadir un indicador ácido/base a la muestra problema y tomar, como mejor aproximación al punto de equivalencia, el instante en que el indicador cambia de color (punto final de la valoración). Otra posibilidad es utilizar un medidor de pH para registrar la variación del pH en función del volumen,  $V$ , de valorante añadido (curva de

valoración) y determinar el punto final a partir de la correspondiente representación gráfica.

Este artículo trata sobre esta segunda técnica de valoración (valoración potenciométrica) y muestra que se puede emplear un medidor de pH de bajo coste cuando la variación de pH sea muy acusada en las proximidades del punto de equivalencia, como ocurre en la mayoría de las neutralizaciones en las que interviene un ácido fuerte o una base fuerte.<sup>[1]</sup>

## Medidores de pH de bajo coste

Un medidor de pH es, en esencia, un voltímetro de alta impedancia que mide la diferencia de potencial entre dos electrodos, introducidos en la disolución problema, y expresa el resultado en unidades de pH.

Como electrodo de referencia se usa, generalmente, un electrodo de plata/cloruro de plata ( $\text{Ag(s)}|\text{AgCl(s)}$ ,

KCl(saturada) | |), dado que su potencial, frente al electrodo normal de hidrógeno, no depende del pH del medio y permanece constante durante la medida.<sup>[2]</sup> El segundo electrodo, o electrodo indicador, es el elemento sensible a la concentración de iones hidronio, ya que su potencial depende de dicha concentración. Este electrodo consta de una delgada membrana de un vidrio especial que encierra una disolución de ácido clorhídrico diluido, saturada en cloruro de plata, o una disolución reguladora de pH que contiene ion cloruro. Debido a pequeñas irregularidades en la composición y estructura de esta membrana, así como al deterioro que sufre en su cara externa con el uso ordinario, el potencial del electrodo de vidrio varía ligeramente con el tiempo, aunque la concentración de iones hidronio permanece constante.<sup>[3]</sup> Por este motivo, es necesario calibrar frecuentemente el electrodo de vidrio utilizando disoluciones patrón de pH conocido (disoluciones reguladoras de pH, o tampones).<sup>[4]</sup>

En la actualidad, existe una amplia gama de medidores de pH cuyo nivel de prestaciones suele estar estrechamente relacionado con su precio. Así, podemos encontrar modelos de altas prestaciones (como los usados en los laboratorios de química), equipos portátiles (diseñados para trabajos de campo) y modelos compactos (extremadamente simples y mucho más económicos) para uso no profesional (Figura 1).



Figura 1. Izquierda: Medidor de pH de sobremesa para laboratorio. Centro: Equipo portátil para trabajo de campo. Derecha: Tres modelos de medidores de pH de bajo coste.

Los medidores de pH que se han utilizado para llevar a cabo este trabajo se encuentran en el segmento de precio más bajo del mercado (Figura 1-dcha., con un coste inferior a 25 €). Se caracterizan por tener un diseño muy compacto (tipo *bolígrafo*), un rango de medida de 0 a 14 unidades de pH y una resolución de 0,01 unidades de pH que, a efectos prácticos es de 0,1 unidades, ya que la segunda cifra decimal, frecuentemente, no llega a estabilizarse.

Estos instrumentos se pueden calibrar en uno o dos puntos de la escala de pH. Los tampones necesarios para su calibración se preparan disolviendo, en una cantidad dada de agua, el contenido de unos sobrecitos que se pueden adquirir (por menos de 0,50 € la unidad) en comercios *online*.

La mayoría de estos medidores lleva una sonda que mide la temperatura de la disolución problema para corregir automáticamente la lectura de pH, en el caso de que la temperatura de la disolución sea diferente a la temperatura a la que se calibró el medidor<sup>[5]</sup> (Figura 2).



Figura 2. Izquierda. Imagen en detalle de un medidor de pH no profesional, de izquierda a derecha: electrodo de referencia, sensor de temperatura y electrodo de vidrio. Derecha. Detalle del bulbo del electrodo de vidrio, en cuyo interior hay una disolución de pH constante y un alambre de plata que conecta el electrodo de vidrio al circuito del medidor.

La exactitud de estos aparatos está comprendida entre  $\pm 0,1$  y  $\pm 0,5$  unidades de pH,<sup>[6]</sup> pero puede llegar a ser hasta de  $\pm 1$  unidad si el pH de la disolución que se analiza es inferior a 2 o superior a 12. Estos niveles de incertidumbre pueden ser aceptables en los usos para los que están diseñados estos medidores (tales como control del pH de aguas de riego, de acuarios domésticos, de piscinas, etc.), donde los valores de pH no suelen alcanzar valores extremos, pero suponen una seria limitación si se desea obtener una medida fiable de la concentración de ion hidronio.

En efecto, si se tiene en cuenta que, para disoluciones diluidas, la relación entre el pH y la concentración  $c$  de iones hidronio es logarítmica ( $\text{pH} = -\log c_{\text{H}_3\text{O}^+}$ ), una desviación de  $\pm 0,1$  en la medida de un pH determinado  $x$ , se traduce en un error relativo en la concentración de ion hidronio de

$$\frac{\Delta c}{c} = \frac{10^{-(x \pm 0,1)} - 10^{-x}}{10^{-x}} = 10^{\pm 0,1} - 1 = \begin{cases} -0,206 & (\text{para } \Delta \text{pH}) = +0,1 \\ +0,259 & (\text{para } \Delta \text{pH}) = -0,1 \end{cases}$$

esto es, del  $-21\%$  para  $\Delta \text{pH} = +0,1$  (o del  $26\%$  si la incertidumbre absoluta en el pH es de  $-0,1$  unidad).

Otro problema que presentan estos medidores es que sus electrodos se deterioran con mayor rapidez que los de un equipo de laboratorio. Este deterioro conlleva un aumento progresivo en el tiempo de respuesta y una disminución de la exactitud, sobre todo, cuando la disolución problema está mal tamponada, como sucede en las proximidades del punto de equivalencia de una valoración ácido fuerte/base fuerte. No obstante, en los modelos de bajo coste de algunas empresas, de reconocido prestigio en el sector de la instrumentación, se pueden realizar algunas operaciones de mantenimiento que alargan la vida útil de estos medidores.<sup>[6]</sup>

Aunque la precisión y la exactitud de estos aparatos es notablemente inferior a la de los equipos utilizados en un laboratorio, la sencillez de su manejo, su bajo precio y los aceptables resultados que se obtienen con ellos en valoraciones ácido/base, ofrecen interesantes posibilidades de aplicaciones didácticas, especialmente, en el último curso de bachillerato, estudios de formación profesional o en las primeras etapas de los estudios universitarios en los que se cursan asignaturas de química, como Farmacia, Bioquímica



ca, Química, etc.<sup>[7]</sup> Este trabajo demuestra la viabilidad de usar este tipo de medidores no profesionales para realizar valoraciones potenciométricas ácido/base, ya que en esta técnica es más importante el volumen de valorante al que se produce el salto de pH, en la curva de valoración, que el valor absoluto de pH al que ocurre dicho salto.<sup>[8]</sup>

## Materiales y procedimiento experimental

Las mediciones de pH se han realizado con diferentes modelos de un tipo de medidor muy simple que se calibra manualmente, accionando un potenciómetro con un destornillador, hasta que la indicación de la pantalla coincida con el valor nominal del pH de la disolución reguladora utilizada (Figura 3). Como este aparato solo tiene un punto de calibración, normalmente se usa un tampón de pH cercano a 7; en los modelos con dos, o más puntos de calibración, se usan tampones de pH próximos a 4 y 10, de modo que las medidas a realizar queden comprendidas dentro del intervalo de calibración.<sup>[9, 10]</sup>



**Figura 3.** El medidor de la izquierda se calibra girando el potenciómetro, que lleva en la parte superior trasera, con un destornillador. El de la derecha se calibra automáticamente (reconoce el pH de dos tampones de calibrado).

Con el objetivo de poder comparar la curva de valoración experimental con la correspondiente curva teórica, en los experimentos realizados se han utilizado disoluciones comerciales de ácido clorhídrico, de ácido acético (HOAc) y de hidróxido sódico de concentración conocida (Tabla 1). Además, se ha usado un medidor de pH convencional (Crison, Basic 20), similar al mostrado en la Figura 1-izqda., para contrastar los resultados experimentales obtenidos.

Las valoraciones se llevan a cabo con 10,00 mL de disolución 0,1 M del analito (HCl o HOAc) en un vaso de precipitados en el que se introduce el medidor (previamente calibrado) y se añaden 20 mL de agua desionizada para que la disolución cubra completamente los electrodos del aparato. El agente valorante (NaOH) se deposita en la bu-

**Tabla 1.** Materiales utilizados para efectuar las valoraciones.

Reactivos	Distribuidor	Concentración nominal $c_0$ (mol/L)
HCl	Panreac	$0,0999 \leq c_0 \leq 0,1001$
NaOH	Panreac	$0,0999 \leq c_0 \leq 0,1001$
HOAc	Labkem	$0,996 \leq c_0 \leq 1,004$
Instrumentos		Distribuidor
Medidor de pH de bajo coste	Hanna Instruments Comercios <i>online</i>	
Medidor de pH profesional	Crison Instruments	

reta y se vierte controladamente sobre la disolución problema. Las adiciones de valorante pueden ser relativamente grandes al principio de la valoración, pero deben ser lo más pequeñas posible (normalmente, de 0,1 mL) cerca del punto final (Figura 4).

Dado que la respuesta de los medidores de bajo coste es más lenta que la de los equipos convencionales de laboratorio, es necesario utilizar un agitador magnético que garantice la rápida mezcla de los reactivos y facilite la estabilización de las lecturas del medidor tras cada adición de valorante, especialmente, en las inmediaciones del punto de equivalencia.<sup>[11]</sup>



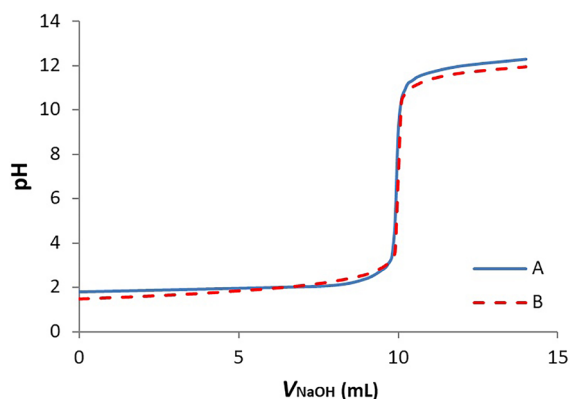
**Figura 4.** Montaje experimental para registrar la variación del pH a medida que, desde la bureta, se añade el valorante a la disolución problema.

## Resultados y discusión

### Valoración potenciométrica de un ácido fuerte con una base fuerte

A menos que los reactivos estén muy diluidos, las curvas de valoración de un ácido fuerte con una base fuerte son las que presentan un salto de pH mayor y más definido cuando ocurre la neutralización.<sup>[8]</sup> Por este motivo se han utilizado estas valoraciones en primer lugar para evaluar la utilidad de los medidores de pH no profesionales.

En la Figura 5 se representa la curva de valoración, obtenida experimentalmente, junto a la correspondiente curva de valoración teórica calculada a partir del estudio de los equilibrios ácido/base que intervienen en este proceso.<sup>[8]</sup>



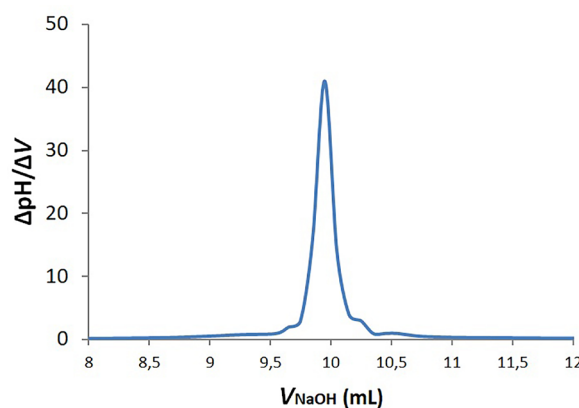
**Figura 5.** Curva de valoración experimental, obtenida con un medidor de pH de bajo coste (A) y curva de valoración teórica (B), para la titulación de  $1 \times 10^{-3}$  mol de HCl, disuelto en 30 mL de agua, con NaOH 0,1 M.

La comparación de las curvas de valoración experimental y teórica (Figura 5) revela que, a pesar de que las dos curvas difieren al principio y al final de la valoración (tanto más, cuanto más extremo sea el valor del pH), las dos gráficas se superponen ampliamente en la región de máxima pendiente, esto es, en la zona en la que se localiza el punto de equivalencia.<sup>[2]</sup>

Para hallar la concentración de la muestra analizada, asumiremos que el punto final debe encontrarse muy próximo al punto de máxima pendiente de la curva de valoración (punto de inflexión),<sup>[11]</sup> lo que en términos matemáticos equivale a afirmar que la primera derivada de la curva de valoración presentará un máximo en el punto de inflexión, mientras que la segunda derivada deberá anularse en dicho punto ( $d^2\text{pH}/dV^2 = 0$ ). Si los incrementos de volumen, cerca del punto final, son suficientemente pequeños, las derivadas primera y segunda se podrán aproximar a los respectivos cocientes incrementales ( $\Delta\text{pH}/\Delta V$  e  $\Delta^2\text{pH}/\Delta V^2$ ) y la gráfica de la segunda derivada cortará al eje de abscisas en el punto final de la valoración ( $\Delta^2\text{pH}/\Delta V^2 = 0$ ). En la Tabla 2 se calculan los valores de ( $\Delta\text{pH}/\Delta V$  e  $\Delta^2\text{pH}/\Delta V^2$ ) y en las Figuras 6 y 7 se representan frente al volumen de valorante añadido.

**Tabla 2.** Cálculo de los cocientes incrementales en las proximidades del punto final de la curva de valoración experimental representada en la Figura 5.

V (mL)	pH	$\Delta\text{pH}/\Delta V$	$\Delta^2\text{pH}/\Delta V^2$
9,6	2,9	...	...
9,7	3,1	$\frac{3,1 - 2,9}{9,7 - 9,6} = 2$	$\frac{3 - 2}{0,1} = 10$
9,8	3,4	$\frac{3,4 - 3,1}{9,8 - 9,7} = 3$	$\frac{16 - 3}{0,1} = 130$
9,9	5,0	16	250
10,0	9,1	41	-270
10,1	10,5	14	-100
10,2	10,9	4	-10
10,3	11,2	3	-20
10,4	11,3	1	-20
		...	...

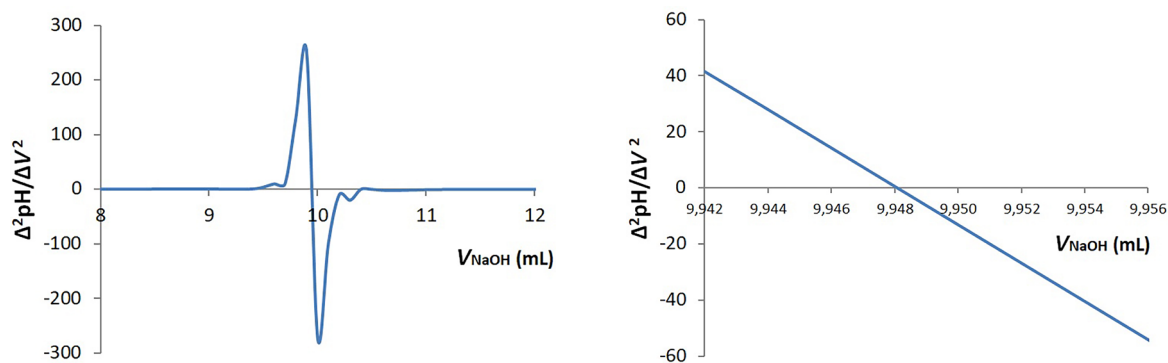


**Figura 6.** Gráfica de la primera derivada de la curva de valoración experimental para la valoración de  $1 \times 10^{-3}$  mol de HCl, disuelto en 30 mL de agua, con NaOH 0,1 M.

Como se observa en la Figura 6, la primera derivada de la curva de valoración es prácticamente nula, excepto en el punto final ( $V_{\text{NaOH}} \cong 10$  mL), donde presenta un máximo muy pronunciado. Este punto se puede determinar, con mayor exactitud, expandiendo la escala horizontal de la gráfica de la segunda derivada (Figura 7).

Procediendo de este modo, se obtiene para el punto final un volumen de valorante  $V_{\text{NaOH}} \cong 9,95$  mL. Si se admite que la incertidumbre, en las medidas de volumen con la bureta y la pipeta de doble enrase es, de  $\pm 0,05$  mL y de  $\pm 0,02$  mL, respectivamente, la concentración de HCl ( $c_{\text{HCl}}$ ) en la muestra analizada será:

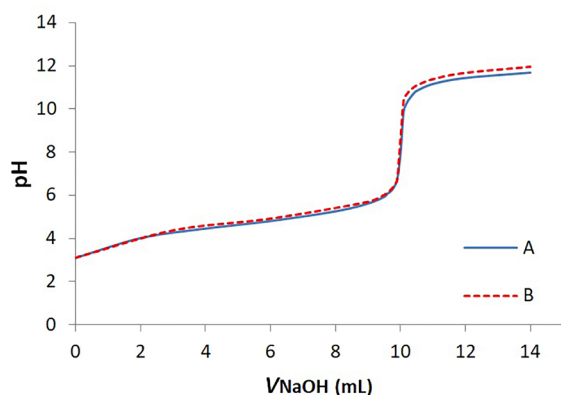
$$c_{\text{HCl}} = \frac{V_{\text{NaOH}} \cdot c_{\text{NaOH}}}{V_{\text{HCl}}} = \frac{(9,95 \pm 0,05) \times 10^{-3} \times (0,1 \pm 0,0001)}{(10,00 \pm 0,02) \times 10^{-3}} = 0,100 \pm 0,001 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$



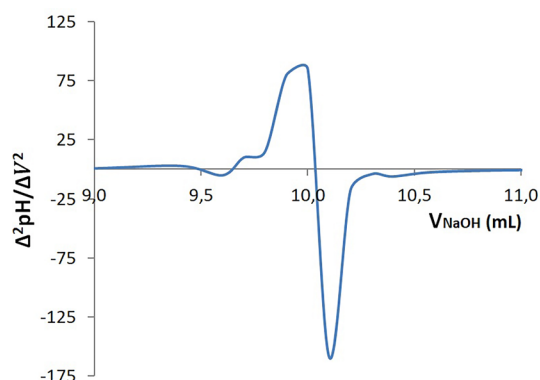
**Figura 7.** Izqda.: La segunda derivada cambia de signo antes y después del punto de inflexión y corta al eje de abscisas en un punto cercano a 10 mL. Dcha.: Zona central de la gráfica de  $\Delta^2\text{pH}/\Delta V^2$  con la escala horizontal expandida para localizar el punto de inflexión de la curva de valoración

un resultado que difiere en menos de un 1 % respecto del valor de la concentración nominal de la disolución problema ( $c_{0, \text{HCl}} = 0,1000 \text{ M}$ ).

#### Valoración potenciométrica de un ácido débil con una base fuerte



**Figura 8.** Curvas de valoración experimental (A) y teórica (B) para la valoración de  $1 \times 10^{-3} \text{ mol}$  de HOAc, disuelto en 30 mL de  $\text{H}_2\text{O}$ , con NaOH 0,1 M.



**Figura 9.** Izqda.: La gráfica de  $\Delta^2\text{pH}/\Delta V^2$  corta al eje horizontal en un punto próximo a 10 mL. Dcha.: Fragmento de la gráfica de la segunda derivada de la curva de valoración con la escala horizontal expandida para localizar el punto de inflexión ( $V_{\text{NaOH}} \cong 10,037 \text{ mL}$ ) de la curva de valoración experimental de la Figura 8.

El uso de estos medidores de pH de bajo coste también ha sido estudiado en valoraciones de ácido débil con base fuerte.

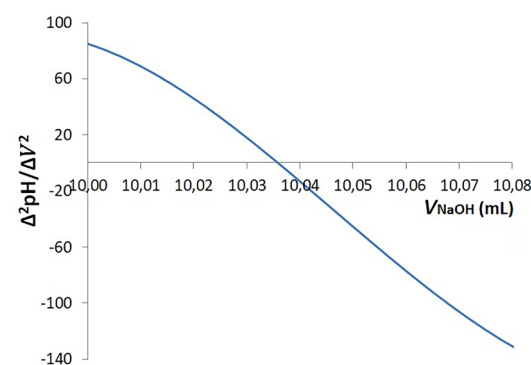
Para ello, se prepara una disolución de ácido acético de concentración  $0,100 \pm 0,001 \text{ M}$ , mediante dilución de la disolución comercial de ácido acético de concentración  $1,000 \pm 0,004 \text{ M}$ , y se valoran 10,00 mL de esta disolución diluida con NaOH comercial 0,1000 M.

En la Figura 8 se muestra la curva de valoración experimental obtenida, con el medidor de pH de bajo coste, junto a su correspondiente curva teórica. Como puede observarse, las dos curvas se superponen en la región en la que ocurre el salto de pH.

El punto final puede determinarse a partir de la representación gráfica de la segunda derivada de la curva de valoración (Figura 9):

De acuerdo con el volumen de valorante estimado para el punto de equivalencia ( $V_{\text{NaOH}} \cong 10,04 \text{ mL}$ ), y las incertidumbres asociadas a esta determinación, la concentración de HOAc en la muestra analizada será:

$$c_{\text{HOAc}} = \frac{V_{\text{NaOH}} \times c_{\text{NaOH}}}{V_{\text{HOAc}}} = \frac{(10,04 \pm 0,05) \times 10^{-3} \times (0,1 \pm 0,0001)}{(10,00 \pm 0,02) \times 10^{-3}} = 0,100 \pm 0,001 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$



Los resultados de estos experimentos ponen de manifiesto que, a pesar de que la variación de pH, en las proximidades del punto de equivalencia, es notablemente menor en estas valoraciones que en las correspondientes valoraciones de ácido fuerte con base fuerte, generalmente, el incremento de pH es lo suficientemente acusado como para ser detectado por un medidor de pH de bajo coste y permitir la localización del punto final de la valoración con un error inferior al 1 %.

### Aplicación para determinar la cantidad de amoníaco en un producto de uso doméstico

Para llevar a cabo este experimento se ha utilizado como disolución problema un limpiador amoniacal (limpiador para uso doméstico, sin detergente) que contiene un mínimo del 5 % en masa de amoníaco, correspondiente a una densidad de, aproximadamente, 0,977 g/cm<sup>3</sup> y una concentración en amoníaco  $c_{\text{NH}_3} \geq 2,87\text{M}$ . Para ello, y dada la relativa alta concentración inicial de este producto, se diluyen 10,00 mL del limpiador hasta 250 mL y se valoran 10,00 mL del producto diluido (analito) con disolución de HCl (valorante,  $c_0 = 0,1000\text{M}$ ).

Para confirmar la posible utilidad de los medidores de bajo coste en estos experimentos, y puesto que la concentración de amoníaco en el limpiador doméstico es desconocida, se ha registrado el curso de la valoración empleando simultáneamente dos medidores de pH, un medidor de pH de laboratorio y un medidor de bajo coste. El resultado de dicha valoración se muestra en la Figura 10. Nótese que, a pesar de que las lecturas del medidor de bajo coste (A) se desvían hasta en  $\pm 0,75$  unidades de pH, respecto del equipo de laboratorio (B), las dos curvas de valoración se confunden en la región de máxima pendiente y presentan puntos de inflexión virtualmente idénticos, que solo se diferencian en un 0,02 % (12,140 mL y 12,139 mL, respectivamente).

Si se toma como volumen de valorante en el punto final  $V_{\text{HCl}} \cong 12,14\text{ mL}$  (Figura 10), la concentración de amoníaco en el limpiador (sin diluir) valdrá:

$$c_{\text{NH}_3} = \frac{V_{\text{HCl}} \times c_{\text{HCl}}}{V_{\text{NH}_3}} \times \frac{250}{10} = \frac{(12,14 \pm 0,05) \times 10^{-3} \times (0,1 \pm 0,0001) \times 250/10}{(10,00 \pm 0,02) \times 10^{-3}} = 3,04 \pm 0,02 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

un resultado acorde con la indicación del contenido mínimo en amoníaco que figura en la etiqueta del producto de limpieza analizado.

### Determinación del punto final mediante interpolación polinómica

El empleo de una hoja de cálculo agiliza extraordinariamente el tratamiento de los datos experimentales para identificar el punto final de la valoración,<sup>[12, 13]</sup> esto es, el cálculo de los cocientes incrementales (Tabla 2) y la representación gráfica de las derivadas de la curva de valoración (Figuras 6 y 7). De hecho, muchos textos de Análisis Cuantitativo dedican, al menos, un capítulo para exponer algunas de las características de estos programas, tales como su sencillez de manejo, su versatilidad y su potencia de cálculo.<sup>[1, 2, 8]</sup>

Esta herramienta permite, además, utilizar un método alternativo, basado en sustituir la región de máxima pendiente de la curva de valoración por un polinomio de ajuste, con el que se puede hallar rápidamente el volumen de valorante en el punto final (Figura 11).

Bajo el supuesto de que el punto final debe estar muy próximo al punto de inflexión de la curva de valoración, mediante la hoja de cálculo se halla la ecuación de un polinomio de grado  $n$  que se ajuste lo mejor posible a los puntos de la zona de mayor pendiente de la curva de valoración. El punto de inflexión  $x_i$  de este polinomio se calcula igualando a cero su segunda derivada. En la mayoría de los casos es suficiente con seleccionar entre seis y diez puntos de la curva de valoración más cercanos al punto final (celdas sombreadas en la Figura 11) y usar un polinomio de tercer grado:

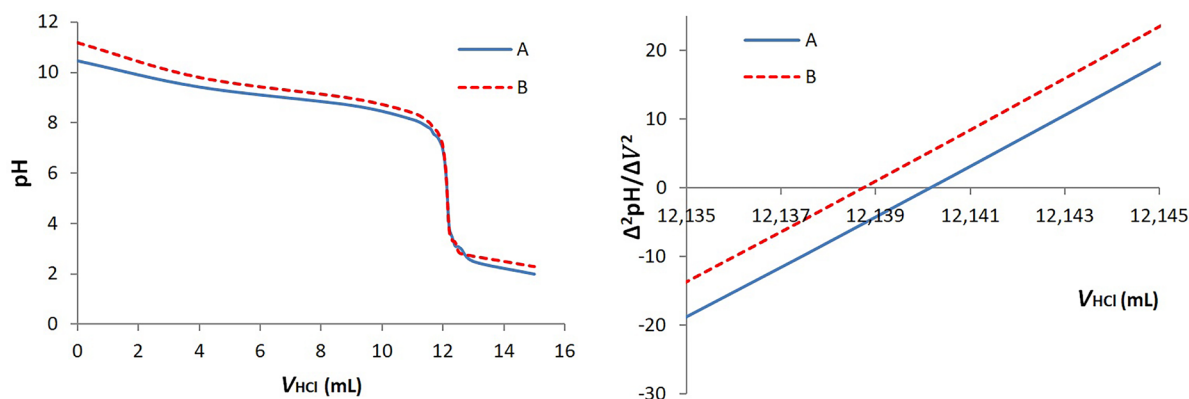
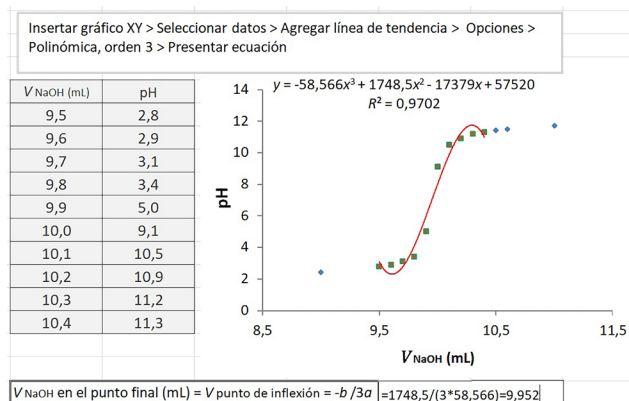


Figura 10. Izqda.: Variación del pH en la valoración de una disolución de  $\text{NH}_3$  con HCl. La curva de trazo continuo (A) se ha obtenido con un medidor de pH no profesional; la curva de trazo discontinuo (B) corresponde a un equipo de laboratorio. Dcha.: Región central de la gráfica de la segunda derivada con la escala horizontal expandida para determinar el punto final de la valoración con ambos dispositivos

$$y = ax^3 + bx^2 + cx + d; \quad \frac{d^2y}{dx^2} = 6ax + 2b = 0; \quad x_i = -b/3a.$$



**Figura 11.** Captura de pantalla de la hoja de cálculo utilizada para determinar el punto final, mediante un polinomio interpolador de tercer grado, en la valoración de 10 mL de HCl 0,1 M con NaOH 0,1 M (Figuras 5, 6 y 7). En el recuadro superior se indica la secuencia de acciones a realizar para obtener la ecuación del polinomio de ajuste.

El volumen en el punto de equivalencia usando esta metodología es de 9,952 mL, un resultado que sólo se diferencia en un 0,04% al obtenido con el método de la segunda derivada.

En teoría, se podrían emplear polinomios de grado superior, p. ej.,  $n = 5$ , para mejorar el ajuste sobre un mayor número de puntos experimentales, pero el cálculo para determinar el punto final no sería tan inmediato, ya que habría que resolver una ecuación de tercer grado para encontrar los tres puntos de inflexión que puede presentar un polinomio de quinto grado.<sup>[14]</sup>

La ventaja principal de este procedimiento es que asigna el punto de inflexión al conjunto de puntos seleccionados y minimiza, por tanto, la influencia de una o más lecturas erróneas de pH en las proximidades del punto de equivalencia.

### Otras aplicaciones prácticas usando medidores de bajo coste

Los medidores de pH de bajo coste pueden resultar muy útiles en la formación de los futuros estudiantes de Química y técnicos de laboratorio. En bachillerato se pueden usar estos

medidores para obtener curvas de valoración ácido/base y estudiar sus características (desde un punto de vista cualitativo) en función del tipo de valoración efectuada (fortaleza ácido/base y concentración de los reactivos). Para niveles superiores, siempre y cuando se disponga de disoluciones valoradas, se podrán utilizar las curvas de valoración para llevar a cabo otras determinaciones ácido/base tales como las sugeridas en la Tabla 3.

En todo caso, deben respetarse las pautas elementales del manejo de los medidores de pH, entre las cuales se pueden citar:

- Calibrar el aparato antes de llevar a cabo la valoración.
- Mantener siempre humedecido, con una disolución reguladora, el electrodo de vidrio.
- Utilizar agua destilada o desionizada para diluir y lavar los electrodos del medidor.
- Añadir suficiente agua al recipiente, en que se lleva a cabo la valoración, para que los electrodos del medidor estén completamente sumergidos en la disolución problema.
- Mantener una adecuada agitación de la disolución (puede sustituirse la agitación magnética por la manual con una varilla).

### Conclusiones

Los medidores de pH de bajo coste no son adecuados, en general, para efectuar medidas directas de pH con elevada exactitud, porque tales medidas tienen, como mínimo, una imprecisión absoluta de  $\pm 0,1$  unidades de pH o, lo que es equivalente, una incertidumbre relativa de más del 20 % en la concentración de iones hidronio. Además, estos medidores tienen un tiempo de respuesta mucho mayor que el de los medidores de pH de laboratorio y pueden tardar varios minutos en dar una lectura estable de pH, sobre todo, en las proximidades del punto de equivalencia.

A pesar de estas limitaciones, estos aparatos pueden ser una alternativa razonable para detectar el punto final de una valoración ácido/base (sobre todo, si no se dispone de equipos convencionales de laboratorio), ya que el hecho experimental que nos permite localizar el punto final no es tanto el valor del pH en momentos concretos de la valoración

**Tabla 3.** Algunas determinaciones ácido/base usando medidores de pH de bajo coste

Experimento	Procedimiento	Observaciones
Determinación de HCl en sulfamán	Diluir 10 mL de sulfamán hasta 1 L. Valorar 10 mL del diluido con NaOH 0,1 M.	Manejar con mucho cuidado la disolución concentrada (guantes y gafas de seguridad).
Determinación de ácido acetil salicílico en un analgésico	Disolver una tableta de 500 mg en 20 mL de etanol y diluir con agua hasta 100 mL. Valorar 10 mL de disolución con NaOH 0,1 M.	La celulosa y el almidón (excipientes insolubles en etanol) no interfieren en la determinación. No usar fármacos que contengan otros productos que puedan interferir (efervescentes, gastrorresistentes, etc.).
Determinación del grado de acidez de un vinagre	Diluir 10 mL de vinagre a 100 mL. Valorar 10 mL de disolución con NaOH 0,1 M.	Usar preferentemente vinagre de vino blanco de acidez 6° (g de HOAc/100 mL de vinagre).

ción, sino la brusca variación de pH que sucede al ocurrir la neutralización.

Como se ha puesto de manifiesto en los ejemplos prácticos expuestos en las páginas anteriores, las curvas de valoración, obtenidas con un medidor de bajo coste, pueden diferir notablemente de las correspondientes curvas teóricas (o de las obtenidas con un medidor de pH de laboratorio) durante casi toda la valoración, pero coinciden en la región de máxima pendiente. De hecho, con estos medidores se puede determinar, con un error inferior al 1 %, el punto final en la mayoría de las valoraciones que suele llevar a cabo un estudiante de ciencias.

Por otra parte, estos aparatos también pueden ser muy útiles en el plano cualitativo para familiarizar al alumnado con la medición del pH, para introducirles en la técnica de las valoraciones potenciométricas, o para estudiar el comportamiento de disoluciones reguladoras frente a diluciones o adiciones de pequeñas cantidades de ácidos y bases fuertes.

## Bibliografía

- [1] G. D. Christian, *Química Analítica*, 6.ª ed., McGraw-Hill Interamericana, México, 2009.
- [2] D. A. Skoog, D. M. West, F. J. Holler, S. R. Crouch, *Fundamentos de Química Analítica*, 9.ª ed., Cengage Learning, México, 2015.
- [3] D. A. Skoog, F. J. Holler, S. R. Crouch, *Principios de Análisis Instrumental*, 6.ª ed., Cengage Learning, México, 2008.
- [4] K. L. Cheng, Da-Ming Zhu, «On Calibration of pH Meters», *Sensors* **2005**, 5(4), 209-219. <https://doi.org/10.3390/s5040209>.
- [5] M. E. Ali, O. A. Sharif, «Temperature Compensation in pH meter-A Survey», *Journal of Engineering and Computer Science* **2015**, 16, 2. [https://www.researchgate.net/publication/344395784\\_Temperature\\_Compensation\\_in\\_pH\\_meter-A\\_Survey](https://www.researchgate.net/publication/344395784_Temperature_Compensation_in_pH_meter-A_Survey).
- [6] Hanna instruments, «Tester de pH/Tabla técnica», [https://www.hannainst.es/parametros/4674-tester-de-ph-temperatura.html#/452-resolucion-0\\_1](https://www.hannainst.es/parametros/4674-tester-de-ph-temperatura.html#/452-resolucion-0_1) (visitada 30/10/2021).
- [7] H. Jin, Y. Qin, S. Pan, A. U. Alam, S. Dong, R. Ghosh, M. J. Deen, *J. Chem. Educ.*, **2018**, 95(2), 326-330.
- [8] D. C. Harris, *Análisis Químico Cuantitativo*, 3.ª ed., Reverté, Barcelona, 2016.
- [9] PCE-Instruments, «Pocket pH Meter Instruction Manual», [https://www.pce-instruments.com/english/slot/2/download/5950199/man-ph-meter-pce-ph-281-en\\_1366988.pdf](https://www.pce-instruments.com/english/slot/2/download/5950199/man-ph-meter-pce-ph-281-en_1366988.pdf) (visitada 30/10/2021).
- [10] Mettler Toledo, «A guide to pH measurement» [https://www.mt.com/mt\\_ext\\_files/Editorial/Generic/1/Guides\\_to\\_Electrochemical\\_Analysis\\_0x000248ff00025c9a00093c4a\\_files/guideph.pdf](https://www.mt.com/mt_ext_files/Editorial/Generic/1/Guides_to_Electrochemical_Analysis_0x000248ff00025c9a00093c4a_files/guideph.pdf) (visitada 30/10/2021).
- [11] L. Meites, J. A. Goldman, Theory of titrations curves, *Anal. Chim. Acta* **1963**, 29, 472-479. [http://lib3.dss.gov.th/fulltext/scan\\_ebook/anal\\_1963\\_v29\\_no5.pdf](http://lib3.dss.gov.th/fulltext/scan_ebook/anal_1963_v29_no5.pdf).
- [12] Levie, R., *Cómo utilizar Excel® en Química Analítica y en análisis de datos científicos generales*, Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
- [13] R. D. Osorio, A. N. Granados, *Uso de la hoja de cálculo en Química Analítica*, Universidad de Antioquía, Medellín, 2002.
- [14] NIST/SEMATECH, «e-Handbook of Statistical Methods, Polynomial functions», <https://www.itl.nist.gov/div898/handbook/pmd/section8/pmd811.htm> (visitada 30/10/2021).

# XVIII SIMPOSIO DE JÓVENES INVESTIGADORES QUÍMICOS SEVILLA 2022



# Aproximación histórica al principio de le Châtelier: aceptación, cuestionamiento, problemas de enseñanza y dificultades de aprendizaje. Implicaciones didácticas

Juan Quílez 

## ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA



J. Quílez Pardo

IES Lluís Vives (Valencia)

C-e: [jquilez@uji.es](mailto:jquilez@uji.es)

Recibido: 21/03/2021

Aceptado: 30/07/2022

ORCID: 0000-0001-5428-4617

**Resumen:** Se realiza un estudio histórico sobre el principio de Le Châtelier. Después de una primera aceptación, el principio fue ampliamente cuestionado por sus limitaciones, así como por el carácter vago y ambiguo de sus intentos de formulación cualitativa. Nuevas críticas han surgido a las distintas reglas que se han enunciado con fines didácticos. A pesar de ello, se suele presentar como regla universal, fácil de recordar y aplicar, por lo que se ha consolidado como instrumento didáctico dentro del tema de equilibrio químico, lo que ha propiciado que sea uno de los elementos esenciales de su evaluación.

**Palabras clave:** Limitaciones del principio de Le Châtelier, problemas de lenguaje, regla como instrumento didáctico, dificultades de aprendizaje.

**Abstract:** A historical study is carried out on Le Châtelier's principle. After its first acceptance, the principle was widely questioned because of both its limitations and the vague and ambiguous character of the different attempts performed to qualitatively enunciate it. New criticisms emerged to the various rules that have been formulated for educational purposes. Apart from this, it is usually presented as a universal rule, easy to remember and apply, which may explain why it has been consolidated as a didactic tool within the topic of chemical equilibrium, which has led to be one of the essential elements for its assessment.

**Keywords:** Le Châtelier's principle limitations, language problems, the rule as a didactic instrument, learning difficulties.

## Introducción

El presente trabajo es una breve aproximación histórica de la regla general formulada en 1884 y 1888 por H.L. Le Châtelier. Después de una primera aceptación, el denominado principio de Le Châtelier (PLC) fue inicialmente cuestionado por diferentes autores por el carácter vago y ambiguo de la regla cualitativa y por los casos en los que se encuentra limitado.

Posteriormente, a partir de mediados del siglo XX, un numeroso grupo de autores analizaron los problemas didácticos de entendimiento y aplicación de los distintos enunciados formulados por los autores de libros de texto de química. Estas críticas no han impedido que esta regla se haya consolidado como un elemento esencial en el estudio del equilibrio químico.

## Formulación del principio de Le Châtelier

En el año 1884 J.H. van't Hoff<sup>[1]</sup> formuló el denominado *principio de equilibrio móvil*:

Todo equilibrio entre dos condiciones diferentes de materia (sistemas) se desplaza reduciendo la temperatura, a volumen constante, hacia el sistema cuya formación genera calor.

En el mismo año, H.L. Le Châtelier,<sup>[2]</sup> citando inicialmente a van't Hoff, extendió el enunciado de variación de la temperatura en sistemas en equilibrio químico a cambios de

presión y de concentración, formulando la siguiente regla, como generalización empírica del conocimiento de toda una serie de procesos químicos conocidos:

Todo sistema en equilibrio químico estable, sometido a la influencia de una causa externa que tiende a cambiar su temperatura o su condensación (presión, concentración, número de moléculas en la unidad volumen), ya sea en su totalidad o en algunas de sus partes, sólo puede experimentar modificaciones internas que, de producirse solas, provocarían un cambio de temperatura o de condensación de signo opuesto al resultante de la causa externa.

Este enunciado tuvo como base su intento de construir una teoría química del equilibrio tomando como modelo la mecánica, que era una idea compartida por otros científicos como Ostwald.<sup>[3]</sup> En concreto, la pretensión de asumir como principio general la oposición que se produce a la acción experimentada, como extensión a la química de la tercera ley de Newton, queda plasmada en una nueva formulación que proporcionó cuatro años más tarde.<sup>[4]</sup>

Todo sistema en equilibrio experimenta, debido a la variación de uno solo de los factores que afectan al equilibrio, una reordenación del sistema en una dirección que, de producirse sola, conduciría a una variación de signo contrario a la del cambio original.

Posteriormente, en su libro *Leçons sur le carbone, la combustion et les lois chimiques*<sup>[5]</sup> señaló lo siguiente:

En un sistema homogéneo el aumento de masa de una de las sustancias en equilibrio conduce a una reacción que tiende a disminuir su masa.

El PLC fue inicialmente bien acogido por la comunidad científica por su aplicación a diversos procesos industriales<sup>[6]</sup> (la síntesis del amoníaco, la obtención del cloro por el procedimiento Deacon o la fabricación del ácido sulfúrico por el método de contacto, entre otros). También se aceptó por prestigiosos autores de libros de química de principios del siglo xx<sup>[7]</sup> por la simplicidad de su enunciado y su pretendida universalidad. Esta tendencia se mantuvo en los manuales de otros reconocidos autores como Glasstone.<sup>[8]</sup> Nuevos impulsos, como el proporcionado por Pauling en su reconocido libro *College Chemistry*,<sup>[9]</sup> contribuyeron a consolidar su aceptación:

El estudiante (o el científico) haría bien en abstenerse de utilizar una ecuación matemática a menos que comprenda la teoría que representa y pueda hacer una afirmación sobre la teoría que no consista sólo en leer la ecuación. Es una suerte que exista un principio cualitativo general, llamado principio de Le Châtelier, que se relaciona con todas las aplicaciones de los principios del equilibrio químico. *Cuando hayas adquirido una comprensión del principio de Le Châtelier, podrás pensar en cualquier problema de equilibrio químico que surja y, mediante el uso de un argumento simple, emplear un enunciado cualitativo al respecto...* Algunos años después de haber terminado tus estudios universitarios, es posible que (a menos que te conviertas en químico o trabajes en algún campo relacionado) hayas olvidado todas las ecuaciones matemáticas relacionadas con el equilibrio químico. Sin embargo, espero que no hayas olvidado el principio de Le Châtelier.

## El principio cuestionado

Destacados investigadores pronto pusieron de relieve las dificultades de interpretación del enunciado cualitativo, sin soporte matemático. En el año 1911 Ehrenfest<sup>[10]</sup> señaló el carácter vago e impreciso de esta regla. En concreto, demostró que en ocasiones los equilibrios químicos perturbados evolucionaban oponiéndose a la perturbación, pero en otros la favorecían. Por ello, indicó que era preciso que los cambios producidos tuvieran presente la variación de la variable intensiva considerada ( $Y$ ), asociada con la de la correspondiente variable extensiva conjugada ( $y$ ), formulando las correspondientes ecuaciones matemáticas que acotaban los distintos casos que podían presentarse.

Nuevos estudios críticos se publicaron en los que se analizaban situaciones concretas en las que el PLC estaba limitado.<sup>[11]</sup> Posthumus<sup>[12]</sup> demostró que en el equilibrio de síntesis directa del amoníaco, si a un sistema en equilibrio químico se añadía nitrógeno, a  $P$  y  $T$  constantes, se formaba

una mayor cantidad de amoníaco si la fracción molar inicial del nitrógeno era menor que 0,5; en caso contrario, se descomponía una mayor cantidad de amoníaco (contrariamente a lo predicho por el PLC).

El propio Le Châtelier,<sup>[13]</sup> advertido por Montagne (quien ese año había publicado un trabajo relacionado con el problema señalado<sup>[14]</sup>), comprobó que existía un estudio termodinámico previo<sup>[15]</sup> que también había analizado esta situación. Por todo ello, señaló:

He advertido que mis diferentes afirmaciones de la ley del desplazamiento del equilibrio no eran todas equivalentes, como yo había creído... El error cometido fue considerar que el aumento de concentración y el de la masa eran siempre paralelos... La primera formulación que di a esta ley en 1884 es correcta... Por el contrario, el enunciado que di cuatro años después, que consideré equivalente al primero, es incorrecto.

De esta forma, se vio en la necesidad de reformular la parte de su enunciado correspondiente al cambio de concentración:

En una mezcla homogénea en equilibrio químico, el aumento de concentración de uno de los reactivos provoca el desplazamiento del equilibrio en una dirección tal que la reacción tiende a disminuir la concentración de esta sustancia.

En este enunciado Le Châtelier hace referencia a la fracción molar al mencionar la concentración de la sustancia añadida.

De nuevo Posthumus, un año después,<sup>[16]</sup> eligiendo el mismo ejemplo que en su trabajo previo de 1933<sup>[12]</sup> demostró que si el nitrógeno se añade al sistema en equilibrio, a  $P$  y  $T$  constantes, y su fracción molar es menor que 0,5, se forma una mayor cantidad de amoníaco por reacción del nitrógeno con parte del hidrógeno presente, pero la fracción molar del nitrógeno aumenta. Por el contrario, si la fracción molar es mayor que 0,5 entonces esta adición produce la descomposición del amoníaco, formando una mayor cantidad de nitrógeno, pero su fracción molar disminuye, demostrándose que los cambios de masa y de concentración no son siempre paralelos.

Por su parte, en el año 1945 Verschafelt<sup>[17]</sup> señaló que un cambio de volumen en un sistema homogéneo en equilibrio disminuye las concentraciones molares de todas las sustancias presentes. La reacción subsiguiente hace que unas aumenten su concentración y que otras la disminuyan. Esta nueva circunstancia añadía un nuevo problema a las pretendidas variaciones paralelas de masa y de concentración que inicialmente había establecido Le Châtelier.

Nuevas críticas al enunciado cualitativo del PLC se realizaron en la segunda mitad del siglo xx. Por ejemplo, en el año 1958 Palacios<sup>[18]</sup> advirtió que debido a la vaguedad y a la ambigüedad con la que suele estar formulado el PLC en algunos casos parece que se confirma o se contradice dependiendo del juego de palabras que se emplee para su



formulación. Por su parte, Prigogine y Defay<sup>[19]</sup> en su análisis termodinámico advirtieron que el PLC presenta muchas excepciones, añadiendo que si se pudiera enunciar cualitativamente de forma general, necesariamente su formulación sería muy compleja.

## Intentos de reformulación matemática y precisa del PLC

El tratamiento matemático realizado por Ehrenfest<sup>[10]</sup> en su crítica al PLC se continuó por científicos del prestigio de Bijoet<sup>[20]</sup> y Planck,<sup>[21]</sup> lo que fue recogido posteriormente en libros de termodinámica de reconocidos autores, como fueron Epstein,<sup>[22]</sup> Verschafel<sup>[23]</sup> y, más recientemente, de Heer:<sup>[24]</sup>

$$\left(\frac{\partial Y_1}{\partial y_1}\right)_{y_2} < \left(\frac{\partial Y_1}{\partial y_1}\right)_{y_2}$$

$$\left(\frac{\partial y_1}{\partial Y_1}\right)_{y_2} > \left(\frac{\partial y_1}{\partial Y_1}\right)_{y_2}$$

Ejemplos de variables conjugadas  $Y$ - y son los siguientes:

$$T - S; P - V; \mathcal{A} - \xi; \mu - n$$

Para comprender el significado de estas dos ecuaciones, restringiremos su aplicación a la situación que nos interesa relacionada con la evolución de sistemas en equilibrio químico perturbados. Para ello vamos a considerar el siguiente par de variables conjugadas  $Y_2 - y_2$ :  $\mathcal{A} - \xi$ , en donde  $\mathcal{A}$  es la denominada *afinidad química* ( $\mathcal{A} = -\Delta_r G = -\left(\frac{\partial G}{\partial \xi}\right)_{p,T} = -\left(\frac{\partial A}{\partial \xi}\right)_{p,T}$ ) y  $\xi$  es el grado de avance de la reacción.

Apliquemos la primera de las dos inecuaciones referidas anteriormente al caso de la adición de uno de los componentes de una mezcla gaseosa en equilibrio químico. En este caso, para la variación del potencial químico ( $\mu$ ) con la cantidad de sustancia ( $n$ ) de una de las especies químicas ( $j$ ), participante en el proceso, se puede escribir:

$$\left(\frac{\partial \mu_j}{\partial n_j}\right)_A < \left(\frac{\partial \mu_j}{\partial n_j}\right)_\xi$$

El cambio del potencial químico causado por la adición de una cierta cantidad de una de las sustancias participantes en el proceso es menor si el equilibrio químico se mantiene que cuando no hay reacción química en el sistema. Es decir, la reacción que tiene lugar una vez el equilibrio químico ha sido perturbado debe disminuir el potencial químico,  $\mu_j$ . Pero esta disminución no nos indica, en primera instancia, el sentido de la reacción que se produce, lo que significa conocer el signo de  $\delta \xi$ .

Estudiemos el caso de la adición de un gas reactivo, a presión y temperatura constantes, a una mezcla gaseosa inicialmente en equilibrio químico. Para un comportamiento ideal, el potencial químico se puede expresar:

$$\mu_j = \mu_j^0(T) + RT \ln |p_j|$$

dado que  $p_j = \frac{n_j}{n} P$ , se puede escribir

$$\mu_j = \mu_j^0(T) + RT \ln \frac{n_j}{n} |P|$$

Ya que  $\mu_j$  debe disminuir,  $p_j$  también debe hacerse menor. Estudiemos lo que implica esta variación de presión parcial cuando tiene lugar la subsiguiente reacción, una vez el equilibrio ha sido perturbado:

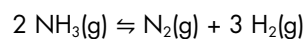
$$\left(\frac{\partial p_j}{\partial \xi}\right)_{p,T} = \frac{p}{n^2} \left(n \frac{\partial n_j}{\partial \xi} - n_j \frac{\partial n}{\partial \xi}\right)$$

Como sabemos que  $\Delta v = \sum v_i$  y que  $d\xi = \frac{\partial n_j}{v_i}$ , podemos ahora escribir

$$\left(\frac{\partial p_j}{\partial \xi}\right)_{p,T} = \frac{p}{n^2} (n v_i - n_j \Delta v)$$

$$\left(\frac{\partial p_j}{\partial \xi}\right)_{p,T} = \frac{p}{n} \left(v_i - \frac{n_j}{n} \Delta v\right)$$

Apliquemos esta ecuación a la adición de  $N_2(g)$  al equilibrio:



$$(v_{N_2} = 1; \Delta v = 2; \chi_{N_2} = \frac{n_{N_2}}{n}):$$

$$\left(\frac{\partial p_{N_2}}{\partial \xi}\right)_{p,T} = \frac{p}{n} (1 - 2\chi_{N_2})$$

Recordemos que  $\delta p_{N_2} < 0$ , lo que supone dos posibilidades:

- si  $\chi_{N_2} > \frac{1}{2}$ , se cumple que  $\delta \xi > 0$ ; es decir, la adición de  $N_2$  produce la descomposición de una mayor cantidad de amoníaco;
- si  $\chi_{N_2} < \frac{1}{2}$ , se cumple que  $\delta \xi < 0$ ; es decir, la adición de  $N_2$  produce la formación de una mayor cantidad de amoníaco. Más ejemplos que suponen esta doble posibilidad de desplazamiento pueden encontrarse en un artículo reciente.<sup>[25]</sup>

Por su parte, Prigogine y Defay<sup>[19]</sup> formularon cuantitativamente la condición de proceso espontáneo para condiciones isotérmicas, que evidentemente es aplicable a la perturbación de un equilibrio químico, en función de la afinidad química ( $\mathcal{A} = -\Delta_r G$ ):

$$\mathcal{A} \cdot \mathbf{v} > 0$$

en donde  $\mathbf{v} = d\xi/dt$ .

Para perturbaciones en condiciones isotérmicas, a partir de la ecuación anterior, se utiliza el criterio de comparar el valor del cociente de reacción ( $Q$ ) con el de la constante de equilibrio ( $K$ ), fundamentado en la ecuación que relacionan estas dos magnitudes con la energía libre de reacción ( $\Delta_r G$ ):<sup>[26]</sup>

$$\Delta_r G = RT \ln \frac{Q}{K}$$

Reacción directa Reactivos  $\rightarrow$  Productos:  $\Delta_r G < 0$ ;  $Q < K$ ;  
Reacción inversa Productos  $\rightarrow$  Reactivos:  $\Delta_r G > 0$ ;  $Q > K$ ;  
Equilibrio:  $\Delta_r G = 0$ ;  $Q = K$

Para un estudio más avanzado y particularizado se pueden consultar diferentes estudios previos.<sup>[27]</sup>

## El PLC como instrumento didáctico y de evaluación

A pesar de los problemas señalados, algunos autores han intentado reformular cualitativamente el principio con fines didácticos de una forma precisa. Por ejemplo, en el año 1957 de Heer,<sup>[28]</sup> siguiendo el planteamiento realizado por Ehrenfest, enunció el principio en la forma de dos enunciados complementarios:

- I) El cambio de una variable intensiva causado por el cambio de la variable extensiva correspondiente es menor si se mantiene el equilibrio químico que si no puede tener lugar ninguna reacción en el sistema.
- II) El cambio de una variable extensiva causado por el cambio de la variable intensiva correspondiente es mayor si se mantiene el equilibrio químico que si no puede tener lugar ninguna reacción en el sistema.

El inconveniente de este tipo de enunciados es que tiene poca aplicabilidad con fines didácticos.

Los problemas acerca del carácter limitado del PLC, así como el carácter vago y ambiguo de su formulación cualitativa tradicional que se iniciaron a principios del siglo XX, se volvieron a poner de manifiesto en estudios a partir de la segunda mitad del siglo XX en los que se cuestionaba su utilidad con fines didácticos. Estos análisis críticos han continuado hasta nuestros días. En todos estos trabajos se analizan situaciones concretas en las que se ponen de manifiesto los problemas de interpretación de un enunciado vago e impreciso, que suele ser fuente de errores conceptuales. En la Tabla 1 se relacionan los autores más destacados.

**Tabla 1.** Autores que han discutido las limitaciones, la interpretación imprecisa, así como los problemas de formulación y aplicación de los distintos enunciados didácticos del PLC.

Periodo	Autores
1950-1959 <sup>[28],[29]</sup>	Bever y Rocca (1951); de Heer (1957, 1958); Haigh (1957); Copley (1959)
1960-1969 <sup>[30]</sup>	Driscoll (1960); Katz (1961); Wright (1969)
1980-1989 <sup>[24],[31]</sup>	Haydon (1980); Treptow (1980); Allsop y George (1984); Gold y Gold (1984, 1985); Senent y de Felipe (1985); Bridgart y Kemp (1985); de Heer (1986); de Berg (1986); Kemp (1987)
1990-1999 <sup>[32]</sup>	Jordaan (1993); Hillert (1995); Bucat y Fensham (1995); Quílez (1995, 1997, 1998); Quílez y Solaz (1995); Solaz y Quílez (1995); Liu et al. (1996); Quílez y Sanjosé (1996); Solaz y Quílez (1998)
2000-2009 <sup>[33]</sup>	Voska y Heikkinen (2000); Stravridou y Solomonidou (2000); Piquette (2001); van Driel y Gräber (2002); Canagaratna (2003); Corti y Franses (2003); Lacy (2005); Uline y Corti (2006); Martínez (2007); Olivera-Fuentes y Colina (2007); Levine (2009)
2010-2022 <sup>[34]</sup>	Marchetti et al. (2010); Scerri (2019); Quílez (2021, 2022)

Las situaciones discutidas en los trabajos sobre los errores conceptuales asociados al PLC corresponden a predicciones erróneas de alumnos de bachillerato y universitarios, así como de profesores en formación y en ejercicio. Particularmente:<sup>[35]</sup> a) adición de un gas reactivo a una mezcla gaseosa en equilibrio, a presión y temperatura constantes; b) adición de un gas inerte; c) cambio del volumen del reactor y predicción de los cambios de concentración/presión parcial producidos; d) dilución de un equilibrio acuoso y predicción de los cambios de cantidad de sustancia y concentración producidos en todas las sustancias participantes; e) adición simultánea de un reactivo y un producto de reacción. Se debe destacar que, en muchos casos, estos errores están además asociados al empleo de un razonamiento causal lineal simple.<sup>[36]</sup>

Por otro lado, en distintos trabajos previos<sup>[25],[37]</sup> se ha puesto de manifiesto la habitual ausencia de un control de las variables implicadas en los enunciados de problemas de perturbación del equilibrio químico presentes en muchos libros de texto, así como en pruebas oficiales de acceso a la universidad. Además, cuando sí que se especifican las magnitudes que permanecen constantes, en muchos casos se dificulta la correcta predicción de la evolución correspondiente. Como ejemplo de este tipo de cuestiones nos vamos a detener en el análisis de un problema reciente (PAU del año 2021):

### Cuestión 3. Desplazamiento del equilibrio químico.

Dado el equilibrio:  $2 \text{NH}_3(\text{g}) \rightleftharpoons \text{N}_2(\text{g}) + 3 \text{H}_2(\text{g})$   $\Delta H = 185 \text{ kJ}$

Justifique si son verdaderas o falsas las siguientes afirmaciones: **(0,5 puntos cada apartado)**

- a) Al aumentar la temperatura, manteniendo constante el volumen, se favorece la formación de  $\text{NH}_3$ .
- b) Al disminuir el volumen del reactor, con la temperatura constante, se favorece la formación de  $\text{N}_2$ .
- c) Si eliminamos cierta cantidad de  $\text{H}_2$ , el equilibrio se desplaza hacia la derecha.
- d) Si las concentraciones de las tres especies se duplican, el equilibrio no se desplaza en ningún sentido.

Nos centraremos en el apartado a). Un primer razonamiento, probablemente admitido como correcto por quienes lo propusieron, señala que un aumento de temperatura desplaza el equilibrio en el sentido que es endotérmico, lo que supone la descomposición de una mayor cantidad de amoníaco. Pero, en las condiciones establecidas se produce un aumento de la presión del sistema. Si un alumno intenta aplicar el PLC considerando únicamente este cambio puede concluir que un aumento de la presión produce un desplazamiento del equilibrio en el sentido de disminución de la presión del sistema, lo que se consigue mediante la disminución de las cantidades de sustancia de las especies químicas participantes; es decir, aumentando la cantidad de amoníaco. Ante estas dos predicciones que suponen sentidos desplazamientos opuestos, un alumno de este nivel no tiene conocimientos suficientes para determinar la respuesta correcta. Llama la atención que, en ocasiones, quizás para evitar esta posible disyuntiva, algunos autores de libros de

texto de Química realizan un control de variables ciertamente cuestionable.<sup>[38]</sup>

Supongamos la siguiente reacción que, hacia la derecha, desprende calor (exotérmica). Evidentemente, la reacción inversa será endotérmica:  $A + B \rightleftharpoons C + D + \text{calor}$  ( $\Delta H^\circ < 0$ ). Si, una vez alcanzado el equilibrio, se aumenta la temperatura, manteniendo la presión y el volumen constantes (simplemente por calentamiento), el sistema tenderá a eliminar calor desplazándose hacia la izquierda. Por el contrario, si se disminuye la temperatura (por un enfriamiento), el sistema tenderá a reponer calor, para lo cual deberá desplazarse hacia la derecha.

Además, debe hacerse notar que en el ejercicio PAU que estamos discutiendo el cambio de temperatura se ha realizado a volumen constante, por lo que, en rigor, el valor del calor de reacción que se debería haber proporcionado es el de la energía interna ( $\Delta U$ ), en lugar de la entalpía ( $\Delta H$ ). Este dato no es trivial, ya que no se debe presuponer que los signos de ambas magnitudes necesariamente deben coincidir siempre. Un proceso químico puede ser endotérmico a presión constante y exotérmico a volumen constante, por lo que los cambios de temperatura producirían desplazamientos opuestos en cada una de las dos situaciones. De la expresión matemática que relaciona estas dos magnitudes:  $\Delta U = \Delta H - \Delta nRT$  y dado que en este ejercicio  $\Delta n = 2$ , en principio habrá una temperatura a la que el signo de la variación de energía interna ya no será positivo,  $\Delta U < 0$ . Ciertamente, el valor de  $\Delta H$  proporcionado implica que a una temperatura muy elevada se produce este cambio de signo. Si se hubiera indicado simplemente que  $\Delta H > 0$ , la situación se habría vuelto todavía más confusa. Esta confusión se incrementa en el caso de una situación semejante en la que el valor de  $\Delta H$  es mucho más pequeño, ya que a temperaturas moderadas se produce que  $\Delta H > 0$  y  $\Delta U < 0$ .<sup>[39]</sup> Evidentemente, una discusión rigurosa de este tipo no está al alcance de un estudiante preuniversitario de Química. Estos problemas se evitan si se razona de forma precisa con la ayuda de las ecuaciones de van't Hoff.<sup>[28]</sup>

Para finalizar este apartado, pondremos de manifiesto la diversidad de enunciados existentes en los libros de texto de Química. En varios estudios previos<sup>[40]</sup> se ha incidido en la dificultad de la correcta interpretación de los distintos enunciados del PLC formulados con fines didácticos por los autores de libros de química general tanto preuniversitarios como universitarios. Se pueden integrar las distintas reglas cualitativas en una formulación general que tiene tres partes:

- 1) Si en un sistema de equilibrio se modifica [cambia] alguno de los factores que lo afectan [Si en un sistema de equilibrio se introduce una perturbación/restricción externa que altera/trastorna el equilibrio] [Si el sistema en equilibrio experimenta una transformación/variación/perturbación/tensión] [Si un sistema es forzado a salir del equilibrio]
- 2) el sistema evolucionará [se reorganizará] [responde-rá] [se ajustará] [se reajustará] [reaccionará] [cambiará] [pasará] [se desplazará] [determinará una

reorganización del sistema] en la dirección [de alguna manera] [para] [que tiende a]

- 3) contrarrestar [contrarrestar parcialmente la modificación] [oponerse] [minimizar] [cancelar] [cancelar parcialmente] [reducir] [anular] [anular parcialmente] [eliminar] [restaurar] [restaurar las condiciones originales] [compensar] [parcialmente compensar] [negar] [disminuir] [mitigar] [acomodar] [absorber] [debilitar] [restablecer] [aliviar] [deshacer] [regresar] [neutralizar]
- a) la variación/cambio realizado [la perturbación, modificación producida, introducida] [la transformación experimentada]
- b) el efecto de la modificación / cambio producido.

Como se puede observar, la mayoría de las palabras utilizadas se emplean en el lenguaje cotidiano y además poseen un marcado carácter teleológico, por lo que se hace necesario explicar su significado preciso en este contexto científico, lo que normalmente no realizan los autores de los libros de texto.<sup>[40]</sup> Además, en la mayoría de los casos, los diferentes términos de cada una de las partes indicadas no son sinónimos, lo que dificulta entender el verdadero significado de los mismos.<sup>[41]</sup> Si únicamente seleccionamos las palabras clave que corresponden a cada parte de los distintos enunciados didácticos, esta circunstancia queda resumida de la siguiente forma:

- 1) modificación, cambio, perturbación, transformación, tensión, ruptura, alteración, estrés, variación, impacto, restricción, trastornar, forzar, sufrir, introducir;
- 2) evolucionar, reorganizar, responder, ajustar, reajustar, reaccionar, cambiar, someterse, desplazar, deshacer, determinar;
- 3) contrarrestar, oponerse, minimizar, cancelar, reducir, anular, eliminar, restaurar, compensar, negar, disminuir, mitigar, acomodar, absorber, debilitar, aliviar, restablecer, retornar, neutralizar.

Sin embargo, independientemente del enunciado empleado, los autores normalmente encuentran la respuesta correcta. Vamos a ejemplificar esta situación con la ayuda de dos enunciados sobre predicciones de cambio de temperatura. El primero corresponde al ya analizado sobre el deficiente control de variables realizado.<sup>[38]</sup> En el mismo se indica que ante un aumento de temperatura el sistema tiende a *eliminar* calor. En cambio, en el ejemplo que se cita a continuación,<sup>[42]</sup> se señala que el sistema *absorbe* calor. A pesar de que absorber y eliminar calor no parecen sinónimos, en ambos casos se llega a la respuesta correcta. Para el sistema en equilibrio:  $C(s) + H_2O(g) \rightleftharpoons CO(g) + H_2(g)$ ;  $\Delta H = + 131.2 \text{ kJ}$ , se razona de la siguiente forma:<sup>[42]</sup>

De acuerdo con el principio de Le Châtelier, al aumentar la temperatura en un sistema en equilibrio químico se produce la reacción en el sentido en que es endotérmica, lo que entraña una absorción de calor que contrarresta parcialmente la elevación de temperatura que perturbó el equilibrio inicial. Como la reacción dada es endotérmica de izquierda a derecha, la elevación de temperatura favorece la formación de  $CO$  y  $H_2$ .

Finalmente, resaltar las dos formas diferentes con las que acaba el enunciado general integrativo señalado anteriormente. En unos casos se indica que el sistema se opone al cambio experimentado y en otros finaliza señalando que el sistema se opone al efecto del cambio producido. La aplicación literal de estos dos finales distintos produce predicciones opuestas. Sin embargo, dado que los autores conocen ya la respuesta, adaptan en cada caso la explicación para realizar la predicción correcta. Todos estos problemas de comprensión de un enunciado aparentemente sencillo y fácil de recordar producen una amplia variedad de errores conceptuales, no sólo en el caso de alumnos preuniversitarios, sino que esos razonamientos incorrectos se han encontrado también en alumnos universitarios e incluso entre el profesorado de química.<sup>[35]</sup>

## Conclusiones

El enunciado cualitativo formulado en 1884 por Le Châtelier fue aceptado por varios motivos: a) se presentó como una extensión de las leyes de la mecánica al contexto de la química; b) encontró aplicación en diferentes procesos de importancia industrial y c) se consideró un enunciado simple e intuitivo, fácil de recordar, sin que necesitara apoyo matemático y con capacidad de predecir la evolución de cualquier equilibrio químico perturbado. Pero pronto surgieron estudios críticos que señalaron sus limitaciones, así como su carácter vago y ambiguo.

El PLC es un elemento prescriptivo del currículum de química en niveles preuniversitarios en la mayoría de países y suele ser un elemento esencial en la evaluación del equilibrio químico en exámenes oficiales, en los que los enunciados de las distintas cuestiones adolecen de un adecuado control de las variables implicadas. Esta gran popularidad y presencia del PLC contrasta con: a) las distintas situaciones en las que está limitado, b) las dificultades que existen para formularlo cualitativamente de forma precisa, c) los problemas de entendimiento de los distintos enunciados didácticos que realizan normalmente los autores de libros de texto y d) los errores conceptuales que generan estos aspectos problemáticos. Incluso, algunos de estas deficiencias las han mostrado autores de trabajos de investigación educativa.<sup>[43]</sup>

Por ello, muchos de los autores relacionados en la Tabla 1 han recomendado la eliminación del PLC del currículum de Química. Como alternativa didáctica, las perturbaciones del equilibrio químico se pueden estudiar acotando adecuadamente dos casos generales de perturbación de un sistema en equilibrio químico: a) cambios de concentración de una o más de las sustancias participantes, en condiciones isotérmicas, para lo que resulta recomendable el análisis de la comparación del valor del cociente de reacción ( $Q$ ) con el de la constante equilibrio ( $K$ ) y b) cambios de temperatura, basados en la interpretación de ecuación que proporciona la variación de la constante de equilibrio con la temperatura. Sólo algunos libros de texto modernos de química general<sup>[44]</sup> siguen estas recomendaciones. Considerando estudios iniciales en esta línea de trabajo,<sup>[45]</sup> esta propuesta se muestra potencialmente eficaz a la hora de evitar y reducir los errores conceptuales que señala la bibliografía relacionada con

este tema. En este sentido, sería conveniente un proceso de reflexión crítica entre el profesorado de química<sup>[46]</sup> en su adecuada comprensión de los problemas de enseñanza y aprendizaje relacionados con el PLC, de forma que le posibilite encontrar procesos alternativos que le permitan superar las dificultades encontradas.

## Bibliografía

- [1] a) J. H. Van't Hoff, *Études de Dynamique Chimique*. 1884. Müller; b) J. H. Van't Hoff, *Studies in Chemical Dynamics*. 1896. Williams & Norgate.
- [2] H. L. Le Châtelier. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences* **1884**, 99, 786–789.
- [3] W. Ostwald, *Outlines of General Chemistry*. 1890. MacMillan.
- [4] H. L. Le Châtelier. *Annales des Mines* **1888**, 13, 157–382.
- [5] H. L. Le Châtelier, *Leçons sur le carbone, la combustion et les lois chimiques*. 1908. Dunod.
- [6] a) R. Dubrisay. *L'enseignement scientifique*, **1937**, 10 (97), 193–197; b) C. H. Desch, *J. Chem. Soc.* **1938**, part. 1, 139–150.
- [7] W. Nernst, *Theoretical chemistry. From the standpoint of Avogadro's rule and thermodynamics*. 1904. MacMillan.
- [8] S. Glasstone, *A textbook of physical chemistry*. 1946. MacMillan.
- [9] L. Pauling, *College chemistry*. 1957. Freeman & Company.
- [10] P. Ehrenfest. *Zeitschrift für Physikalische Chemie* **1911**, 77, 227–244.
- [11] M. R. Etienne. *Comptes Rendus Académie de Sciences* **1933**, 196, 1887–1889.
- [12] K. Posthumus. *Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas* **1933**, 52, 25–35.
- [13] H. L. Le Châtelier. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences* **1933**, 196, 1557–1560; 1753–1757.
- [14] M. P. Montagne. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, **1933**, 196, 928–930.
- [15] E. Ariès, *La Statique Chimique basée sur les deux principes fondamentaux de la Thermodynamique*. 1904. Hermann.
- [16] K. Posthumus. *Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas* **1934**, 53, 308–311.
- [17] J. E. Verschaffelt. *Bull. Acad. Roy. de Belg. (Cl. Se.)*, **1945**, 31, 201–213.
- [18] J. Palacios, *Termodinámica y Mecánica Estadística*. 1958. Espasa-Calpe.
- [19] I. Prigogine, R. Defay, *Chemical thermodynamics*. 1954. Longmans Green.
- [20] J. M. Bijvoet. *Chemisch Weekblad* **1933**, 30, 742–747.
- [21] M. Planck. *Annalen der Physik* **1934**, 19, 759–768.
- [22] P. E. Epstein, (1937). *Textbook of thermodynamics*. Wiley.
- [23] J. E. Verschaffelt, *Aanvullingen der Thermostatica*. 1938. Antwerpen.
- [24] J. de Heer, *Phenomenological thermodynamics with applications to chemistry*. 1986. Prentice Hall.
- [25] J. Quílez. *An. Quím.* **2017**, 113, 247–252.
- [26] a) F. Brenon-Audat, C. Busquet, C. Mesnil, *Thermodynamique chimique*. 1993. Hachette; b) J. Quílez, J. J. Solaz. *Ed. Quím.* **1996**, 7, 202–208; c) J. Quílez. *Ens. Cien.*, **2009**, 27, 317–330; d) J. Quílez. *J. Chem. Educ.* **2012**, 89, 87–93; e) A. Quílez-Díaz, J. Quílez-Pardo. *Química Nova* **2015**, 38, 151–155.

- [27] a) J. J. Solaz, J. Quílez. *Chem. Educ. Res. Pract. Eur.* **2001**, *2*, 303–312; b) J. Quílez. *Ed. Quím.* **2002**, *13*(3), 170–187.
- [28] J. de Heer. *J. Chem. Educ.* **1957**, *34*, 375–380.
- [29] a) M. B. Bever, R. Rocca. *Revue de Métallurgie* **1951**, *48*(5), 365–368; b) J. de Heer. *J. Chem. Educ.* **1958**, *35*(133), 135–136; c) C. W. Haigh. *School Science Review*, 1957, *39*, 319–320; d) G. N. Copley. *School Science Review* **1959**, *41*(2), 386–388.
- [30] a) D. R. Driscoll. *Australian Science Teachers Journal* **1960**, *6*, 7–15; b) L. Katz. *J. Chem. Educ.* **1961**, *38*, 375–377; c) P. G. Wright. *Ed. Chem.* **1969**, *6*, 9 y 18.
- [31] a) A. J. Haydon. *School Science Review* **1980**, *62*, 318–320; b) R. S. Treptow. *J. Chem. Educ.* **1980**, *57*(6), 417–420; c) R. T. Allsop, N. H. George, Ed. *Chem.* **1984**, *21*, 54–56; d) J. Gold, V. Gold. *Chemistry in Britain*, **1984**, *20*, 802–804; e) J. Gold, V. Gold. *Ed. Chem.* **1985**, *22*, 82–85; f) S. Senent, E. Felipe. *Acta Científica Compostelana* **1985**, *22*(1), 395–411; g) G. J. Bridgart, H. R. Kemp. *The Australian Science Teachers' Journal*, **1985**, *31*, 60–62; h) K. C. de Berg. *Chemeda: Australian Journal of Chemical Education*, **1996**, *45*, 2–7.
- [32] a) F. Jordaan. *Chemeda: The Australian Journal of Chemical Education* **1993**, *38*, 175–181; b) B. Bucat, P. Fenshan, en *Selected papers in chemical education research*, 1995, pp. 167–171. IUPAC-Committee on Teaching Chemistry. Delhi: IUPAC-Shatabdi Computers; c) J. Quílez. *Rev. Mex. Fís.* **1995**, *41*, 586–598; d) J. Quílez. *Infancia y Aprendizaje* **1997**, *78*, 73–86; e) J. Quílez, en E. Banet, A. de Pro (Eds.) *Investigación e Innovación en la Enseñanza de las Ciencias*, 1998, Vol. 1 pp. 115–125. Universidad de Murcia; f) J. J. Solaz, J. Quílez. *Rev. Mex. Fís.* **1995**, *41*, 128–138; g) M. Hillert. *J. Phase Equil.* **1995**, *16*(5), 403–410; h) Z.-K. Liu, J. Ågren, M. Hillert. *Fluid Phase Equilibria* **1996**, *121*, 167–177; i) J. Quílez, V. Sanjosé. *Ens. Cien.* **1996**, *14*, 381–390; j) J. J. Solaz, J. Quílez. *Phys. Educ.* **1998**, *15*, 29–33.
- [33] a) K. W. Voska, H. W. Heikinen. *J. Res. Sci. Teach.* **2000**, *37*, 160–176; b) H. Stavidou, C. Solomonidou. *Didaskalia* **2000**, *16*, 107–134; c) J. Piquette. *An analysis of strategies used by chemistry instructors to address student alternate conceptions in chemical equilibrium*. 2001. PhD Thesis. University of Northern Colorado; d) J. van Driel, W. Gräber, en J. K. Gilbert, O. De Jong, R. Justi, D. Treagust, J. H. van Driel. *Chemical education: Towards Research-based Practice*. 2002, pp. 271–292. Kluwer; e) S. G. Canagaratna. *J. Chem. Educ.* **2003**, *80*, 1211–1219; f) D. Corti, S., E. J. Frances. *Chem. Eng. Educ.* **2003**, *37*, 290–299; g) J. E. Lacy. *J. Chem. Educ.* **2005**, *82*, 1192–1193; h) M. J. Uline, D. S. Corti. *J. Chem. Educ.* **2006**, *83*, 138–144; i) E. Martínez. *J. Chem. Educ.* **2007**, *84*, 516–519. j) C. Olivera-Fuentes, C. M. Colina. *International Conference on Engineering Education*. 2007. Coimbra; k) I. N. Levine. *Physical chemistry*. 2009. McGrawHill.
- [34] a) F. Marchetti, C. Pettinari, R. Pettinari, C. Di Nicola, A. Cingolani. *La Chimica nella Scuola* **2010**, *32*, 35–45; b) E. R. Scerri. *Found. Chem.* **2019**, *21*, 61–69; c) J. Quílez. *Sci. & Educ.* **2021**, *30*, 1253–1288; d) J. Quílez. *Alambique. Didáctica de las Ciencias Experimentales* **2022**, *107*, 40–46.
- [35] a) M. Selvaratnam, M. J. Frazer, *Problem Solving in Chemistry*. 1982. Heinemann: Londres; b) J. Quílez, J. J. Solaz, Castelló, M., V. Sanjosé. *Ens. Cien.* **1993**, *11*, 281–288; c) J. Quílez, J. J. Solaz. *J. Res. Sci. Teach.* **1995**, *32*, 939–958; d) J. Quílez, V. Sanjosé. *Ens. Cien.* **1995**, *13*, 78–80; e) J. Quílez. *Ed. Quím.* **1998**, *9*, 267–377; f) L. Tyson, D. F. Treagust, R. B. Bucat. *J. Chem. Educ.* **1999**, *76*, 554–558; g) M. Kousathana, G. Tsaparlis. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2002**, *3*, 5–17; h) J. Quílez. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2004**, *5*(3), 281–300; i) H. Özmen. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2008**, *9*, 225–233; j) J. Quílez. *Chem. Educator* **2008**, *13*, 61–66; k) D. Cheung. *J. Chem. Educ.* **2009**, *86*, 514–518; l) R. M. García-Lopera, M. L. Calatayud, J. Hernández. *Asian J. Educ. e-learning* **2014**, *2*(6), 448–463. m) M. Karpudewan, D. F. Treagust, M. Mocerino, M. Won, M. Chandrasegaran. *Int. J. Envir. Sci. Educ.* **2015**, *10*, 845–863.
- [36] a) J. Quílez. *Infancia y Aprendizaje* **1997**, *78*, 73–86; b) J. Quílez. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2004**, *5*(3), 281–300.
- [37] J. Quílez. *Ens. Cien.* **2006**, *24*, 219–240.
- [38] G. A. Carriedo, J. M. Fernández, M. J. García. *Química*. **2016**. Madrid: Paraninfo.
- [39] a) G. J. Bridgart, H. R. Kemp. *The Australian Science Teachers' Journal*, **1985**, *31*, 60–62; b) J. J. Solaz, J. Quílez. *Phys. Educ.* **1998**, *15*, 29–33; c) K. C. de Berg. *Chemeda: Australian Journal of Chemical Education*, **1996**, *45*, 2–7.
- [40] a) J. Quílez. *Infancia y Aprendizaje* **1997**, *78*, 73–86; b) J. Quílez. *Alambique. Didáctica de las Ciencias Experimentales* **1998**, *17*, 105–111; c) A. Quílez-Díaz, J. Quílez-Pardo. *Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias* **2016**, *13*(1), 20–35; d) J. Quílez. *Sci. & Educ.* **2021**, *30*, 1253–1288.
- [41] J. Quílez. *Stud. Sci. Educ.* **2019**, *55*(2), 121–167.
- [42] J. I. del Barrio, A. Sánchez, A. I. Bárcena, A. Caamaño. *Química*. 2016. Madrid. SM.
- [43] a) M. Aydeniz, A. Dogan. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2016**, *17*, 111–119; b) M. Peris. *CTI* **2021**, ahead of print.
- [44] a) J. Quílez, S. Lorente, F. Sendra, E. Enciso. *Afinidad. Química-2*. 2009. ECIR; b) A. Blackman, S. E. Bottle, S. Schmid, M. Mocerino, U. Wille. *Chemistry*. 2016. Wiley.
- [45] J. Quílez. *Ed. Quím.* **1997**, *8*(1), 46–54.
- [46] a) D. Cheung. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2009**, *10*, 97–108; b) E. Mavhunga. *Res. Sci. Educ.* **2020**, *50*, 748–767; c) J. Sjöström, I. Eilks, V. Talanquer. *J. Chem. Educ.* **2020**, *97*, 910–915.

ENSEÑANZA  
DE LA QUÍMICA



F. de Prada Pérez de Azpeitia

Dpto. Física y Química  
IES Las Lagunas (Rivas-Madrid)  
E-mail: [fernando.pradaperez@educa.madrid.org](mailto:fernando.pradaperez@educa.madrid.org)  
Recibido: 01/07/2022  
Aceptado: 10/08/2022  
ORCID: 0000-0002-4897-2082

# La cámara termográfica: una seductora herramienta didáctica

Fernando I. de Prada Pérez de Azpeitia

**Resumen:** La cámara termográfica ofrece una interesante y atractiva visión de procesos invisibles al ojo humano, relacionados con la materia y la transferencia de energía térmica. A nivel didáctico, esta nueva tecnología es una eficaz herramienta para mejorar la comprensión de fenómenos en los que la química está implicada.

**Palabras clave:** Cámara termográfica, cámara infrarroja, termografía y química.

**Abstract:** The thermographic camera provides an interesting and visually appealing view of processes invisible to the human eye, related to matter and the transfer of thermal energy. At a didactic level, this new technology constitutes an effective tool for improving comprehension of chemical phenomena.

**Keywords:** Thermographic camera, infrared camera, thermography and chemistry.

## Introducción

Las nuevas tecnologías emplean el conocimiento generado por la ciencia para mejorar sus técnicas e instrumentos. A su vez, la tecnología que ofrecen estos instrumentos hace posible el progreso de la ciencia. Un buen ejemplo lo encontramos en la tecnología de las cámaras termográficas (térmicas o de infrarrojos), que permiten captar la radiación infrarroja que emiten los cuerpos y hacerla visible a nuestros ojos. Las imágenes térmicas presentan un enorme potencial en numerosos campos;<sup>[1]</sup> desde la investigación, para comprender el universo hasta la enseñanza, para mejorar el aprendizaje científico (Fig. 1).



Figura 1. La fascinación que provoca la visión termográfica estimula el deseo de adquirir conocimiento.

En la industria química, la cámara térmica es una herramienta fundamental en distintos sectores, para controlar procesos de fabricación, detectar defectos en las instalaciones, descubrir fugas de gases y de energía, etc.

Las ventajas que presenta la termografía de medir en tiempo real, su fácil lectura y no necesitar de contacto con el cuerpo, la hacen también una herramienta muy útil en medicina, tanto para controlar la propagación de enfermedades contagiosas (Covid-19), como para detectar inflamaciones causadas por la congestión sanguínea en los tejidos, que suelen ser síntomas de procesos patológicos.

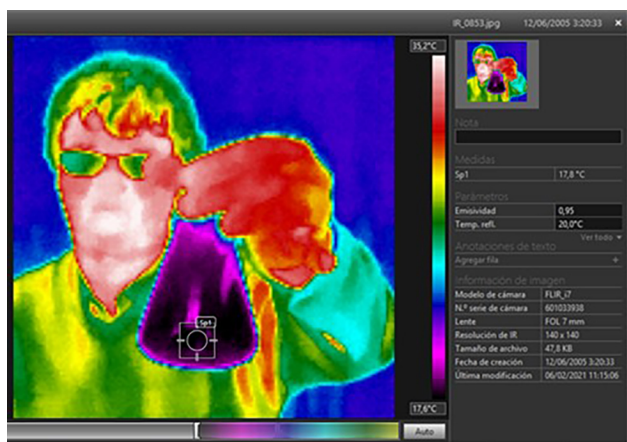
## La termografía aplicada al aula

El sistema más utilizado en los laboratorios didácticos para medir la temperaturas es el termómetro de varilla, que contiene un líquido coloreado, como alcohol etílico (o mercurio, a pesar de que su fabricación y comercialización está prohibida en la Unión Europea desde 2009) que se dilata o contrae al aumentar o disminuir, respectivamente, la temperatura. El sistema de medida de las cámaras térmicas se basa en la radiación infrarroja que emiten los cuerpos, proporcionando una imagen (termograma) con diferentes colores y tonos según la temperatura (Fig. 2).

La visión que ofrece las cámaras térmicas proporcionan un interesante recurso didáctico que facilita la comprensión de todos aquellos procesos físico-químicos en los que se producen una variación de energía térmica.<sup>[2]</sup> Los estudiantes pueden visualizar fenómenos térmicos invisibles a nuestros ojos, como la evaporación, la condensación, el calor latente de cambios de fase, el calor de disolución, el descenso crioscópico, la entalpía de reacción, etc.

La reducción del coste de esta tecnología hace que algunos modelos de smartphones ya la incorporen. Lo que la hace cada vez más accesible y permite al docente, de los departamentos de Física y Química, su incorporación a la programación didáctica de ESO y bachillerato. Este tipo de cámaras pueden ser aprovechadas tanto para realizar demostraciones en el aula y prácticas de laboratorio, como para desarrollar proyectos de investigación.<sup>[3]</sup>

El modelo de cámara utilizado (Flir i7) es uno de los más sencillos y económicos, con un rango de  $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$  a  $250\text{ }^{\circ}\text{C}$ , precisión de  $\pm 2\text{ }^{\circ}\text{C}$ , sensibilidad térmica de  $0,1\text{ }^{\circ}\text{C}$  y una calidad de imagen de  $140 \times 140$  píxeles. Dado que cada píxel corresponde a un valor térmico, cada imagen equivale a 19.600 termómetros midiendo la temperatura de un cuerpo a la vez. Si bien, la precisión de las cámaras térmicas es inferior a la de los termómetros de varilla, su mayor sensibilidad permite detectar y apreciar cambios de temperatura con mayor exactitud.



**Figura 2.** El software del fabricante permite el posterior análisis y tratamiento de la imagen térmica o termograma.

Entre los principales objetivos que se pretenden con esta nueva herramienta didáctica, se encuentran:

- 1) Visibilizar fenómenos relacionados con la química en los que hay transferencia de energía térmica, invisibles a simple vista, para mejorar su comprensión.
- 2) Mejorar la calidad de enseñanza y propiciar el desarrollo de proyectos de investigación.
- 3) Alentar el deseo de aprendizaje y estimular la indagación.

A continuación se muestran algunos procesos susceptibles de ser visibles y analizados con la cámara termográfica.

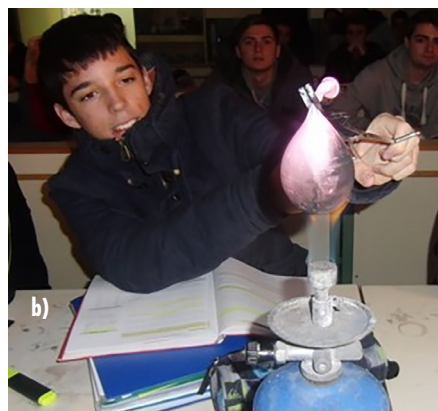
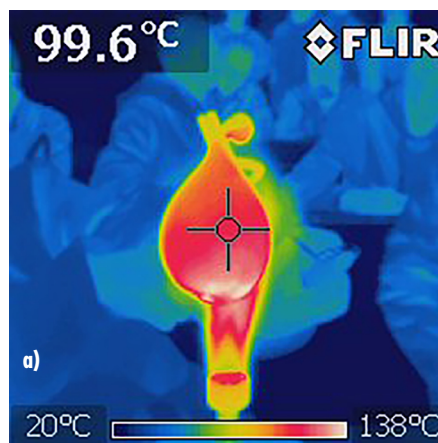
### Experiencia 1. Efecto puente de hidrógeno

El puente de hidrógeno es una unión de tipo intermolecular, formado por fuerzas atractivas entre el hidrógeno de una molécula (carga parcial positiva) y un átomo muy elec-

tronegativo y de pequeño tamaño de otra molécula, como el flúor, el oxígeno o el nitrógeno. Aunque no son uniones tan fuertes como el enlace covalente, son responsables de los altos valores de algunas propiedades físico-químicas que presenta el agua, y que pueden analizarse termográficamente.

Si inflamamos un globo de latex y lo ponemos bajo la llama de un mechero Bunsen. La temperatura ascenderá rápidamente hasta que el polímero (isopreno) se descomponga y el globo explote. Sin embargo, si llenamos el globo de agua y lo situamos bajo la llama, se observa que no explota (Figura 3a). Este efecto se explica por el alto calor específico del agua ( $4180\text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ) y el elevado calor latente de vaporización ( $2260\cdot 10^3\text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}$ ), que absorbe todo el calor generado en la combustión y hace que la temperatura no supere el punto de ebullición del agua ( $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ , a 1 atm), por lo que el polímero del globo a esta temperatura no se ve alterado. A diferencia de lo que sucede con el globo lleno de aire; mezcla que presenta un calor específico ( $1012\text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ), unas cuatro veces menor que el del agua.

La alta capacidad que presenta el agua de absorber calor, se puede visualizar en la imagen térmica de la figura 3b, en la que se comprueba que el agua contenida en el globo no supera la temperatura de ebullición, algo inferior a  $100\text{ }^{\circ}\text{C}$  por no estar a nivel del mar, no alcanzando la temperatura de ignición del plástico.



**Figura 3.** Imagen visible (a) y térmica (b) del calentamiento de un globo lleno de agua mediante un mechero Bunsen.

### Experiencia 2. Cambios de estado: vaporización

Los efectos producidos en los cambios de estado es el resultado de la variación de energía térmica que se produce en su entorno y que se cuantifica mediante el calor latente. En el caso de las sustancias covalentes, depende de las fuerzas entre las moléculas: cuanto más intensas sean, mayor será la energía necesaria para vencer las fuerzas atractivas intermoleculares y mayor será el calor latente.

Para visualizar y analizar la vaporización, basta con mojar con agua y etanol sendos trozos de papel (Fig. 4a) y enfocar la cámara térmica. En breves segundos, en la imagen se aprecia un contraste en el papel humedecido con respecto a la temperatura ambiente, indicando una variación en la temperatura. En el caso del agua, disminuye de 33 °C a 27 °C. Este descenso es consecuencia de la evaporación del agua, que absorbe calor del entorno y enfría el papel. Sin embargo, en el papel mojado en etanol se aprecia un mayor descenso de la temperatura, hasta 19 °C (Fig. 4b). ¿Cómo se explica? El agua tendría que absorber más calor teniendo en cuenta que calor latente de vaporización del agua (2257 kJ·kg<sup>-1</sup>) es mayor que el del etanol (854 kJ·kg<sup>-1</sup>)?

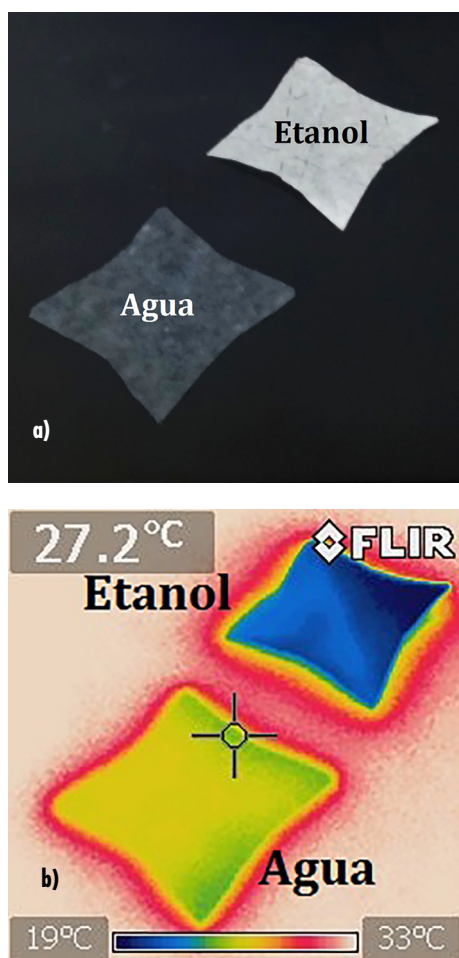


Figura 4. Imagen visible (a) y térmica (b): comparativa entre la vaporización del agua y el etanol.

El etanol, aunque absorba menos energía térmica al evaporarse que el agua, al ser más volátil lo hace mucho más rápidamente. Pero el calor total absorbido durante la evaporación del agua es mayor que el absorbido por la misma masa de etanol. Esto se puede comprobar al cabo de unos minutos, cuando el alcohol etílico se ha evaporado totalmente pero el agua sigue absorbiendo calor del entorno para cambiar de estado.<sup>[4]</sup>

### Experiencia 3. Capilaridad y condensación

Los procesos físico-químicos a menudo no se presentan de forma aislada. Como sucede al mojar un material poroso con agua. Para analizar el proceso se sujeta una tira de papel de filtro, enrollada sobre sí misma, a una pinza con soporte universal, y se sumerge en un vaso con agua (Fig. 5a).

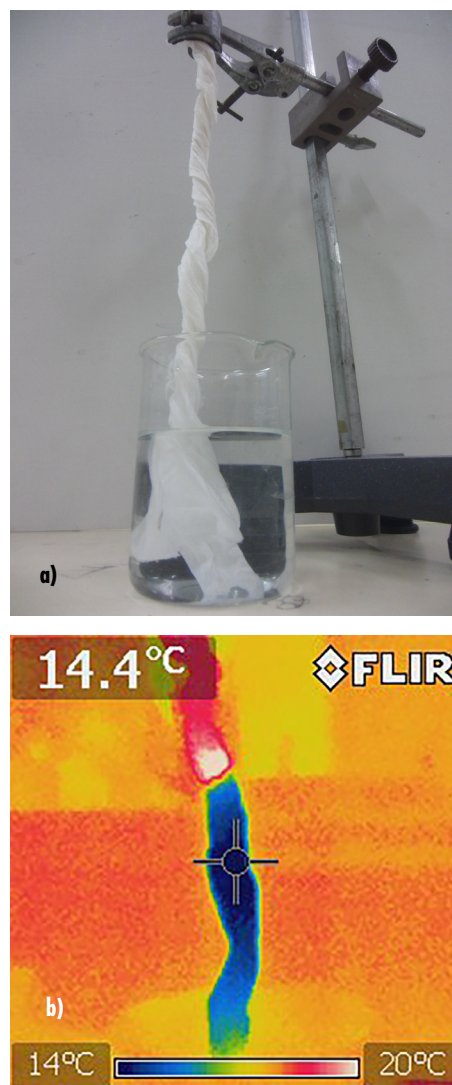


Figura 5. Imagen visible (a) y térmica (b) del proceso de la capilaridad de una tira de papel sumergida en agua: evaporación (color azul) y condensación del agua (color blanco y rojo).



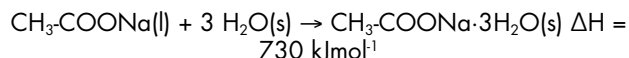
El análisis del termograma muestra cómo el agua asciende por capilaridad a través del papel a la vez que se va evaporando y enfriando la superficie; 4 °C por debajo de la temperatura ambiente, que es de 18 °C. Pero en el frente del papel se observa un fenómeno curioso: un aumento de temperatura de 2 °C respecto a la ambiental (Fig. 5b).

#### Experiencia 4. Efecto de la cristalización

La cristalización es un proceso químico que tiene lugar cuando los iones de una disolución se ordenan para formar una red cristalina. Así por ejemplo, si se prepara una disolución sobresaturada de acetato de sodio trihidratado ( $\text{CH}_3\text{-COONa}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ) y se rompe el equilibrio mediante una perturbación (pequeño cristal, impureza o leve agitación), instantáneamente se produce la cristalización de la sal, acompañada de un aumento de la temperatura. En este efecto se basan algunas bolsas térmicas para calentar las manos y biberones o aliviar dolores musculares (Fig. 6a).

El acetato de sodio tiene un punto de fusión de 58 °C, siendo un sólido a temperatura ambiente. Al comunicarle energía térmica y fundirlo, se forma una disolución sobresaturada en que el disolvente está formado por las moléculas de agua presente en la sal hidratada. Al enfriarse, la sal líquida forma una disolución inestable que contiene mayor cantidad de soluto que la solubilidad máxima. Alterando el equilibrio por una ligera perturbación -haciendo "clac" en una placa metálica- el exceso de sal cristaliza para formar un sistema estable.

Como resultado de la alteración se origina un núcleo de inicio que impulsa la cristalización del sólido disuelto, alrededor del cual, de forma rápida y espontánea crecen los cristales. La pérdida de energía cinética de las partículas (iones) se traduce en calor desprendido,<sup>[6]</sup> como se refleja en el termograma de la figura 6b y conforme a la ecuación:



#### Experiencia 5. Descenso crioscópico

En los procesos de disolución de un soluto, se origina una variación en la temperatura límite de los cambios de estado respecto a las del disolvente puro. Así por ejemplo, las temperaturas de congelación de las disoluciones son siempre menores que las del disolvente puro. Esta variación se explica por un aumento en el desorden (entropía) de la disolución. La presencia del soluto contribuye a un aumento de la entropía del líquido que se opone al proceso de congelación. En consecuencia, se debe alcanzar una temperatura más baja antes de lograr el equilibrio entre el sólido y la disolución. Como resultado, el punto de congelación disminuye (descenso crioscópico).

En el caso del agua, que se congela a 0 °C a 1 atm, cuando se mezcla con un soluto, solidificará a menor temperatura. Para comprobar el descenso crioscópico, se añaden trocitos de hielo con agua, a dos recipientes. Cuando la temperatura

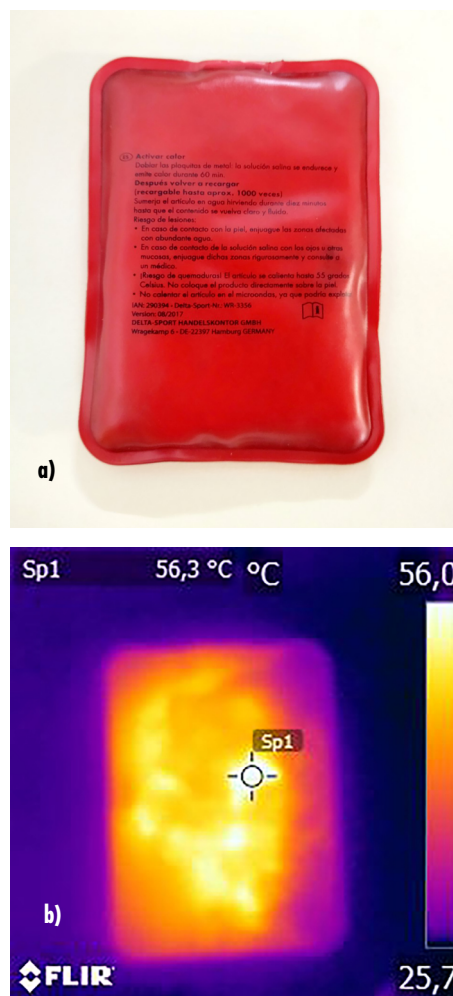


Figura 6. Imagen visible (a) y térmica (b) de la cristalización de una bolsa térmica con acetato de sodio trihidratado.

se estabiliza en unos 0 °C, se agrega a uno de ellos una sal ( $\text{NaCl}$ ,  $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{FeCl}_2$  o  $\text{MgCl}_2$ ) y remueve la mezcla (Fig. 7a). A simple vista, se observa que el hielo comienza a fundirse más rápidamente en la disolución salina. La imagen térmica confirma que no se debe a un aumento de la temperatura, sino a que el hielo se derrite debido a la disminución del punto de fusión de la mezcla,<sup>[7]</sup> alcanzando los 10 °C bajo cero (Fig. 7b).

Esta propiedad coligativa de las disoluciones es aprovechada para fundir y prevenir la formación de peligrosas placas de hielo en vías y carreteras.

#### Experiencia 6. Entalpía de disolución

En la mayoría de reacciones de interés químico y biológico, al menos uno de los reactivos se encuentra en disolución acuosa. Una experiencia complementaria a la anterior, consiste en demostrar que por el simple hecho de disolver una sal en agua se produce una variación en la temperatura de

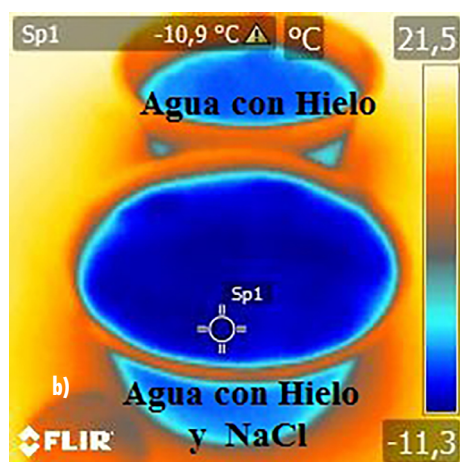


Figura 7. Imagen visible (a) y térmica (b) de la disolución de un soluto sólido (cloruro de sodio) en agua con hielo.

la mezcla. Los procesos de disolución de un soluto sólido en un disolvente líquido, como el agua, van acompañados de una variación de energía que se denomina entalpía o calor de disolución. Este valor depende fundamentalmente del balance energético entre dos magnitudes: la energía necesaria para separar un mol de sal y pasarlo a sus iones en estado gaseoso (energía reticular) y el cambio de entalpía asociado al proceso de solvatación (hidratación) de los iones.

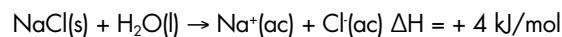
$$\Delta H_{\text{disolución}} = \text{Energía reticular} + \Delta H_{\text{hidratación}}$$

En algunos casos es fácil apreciar el cambio energético, como ocurre en la disolución de urea en agua ( $\Delta H_{\text{disolución}} = 14 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ). En otros, como en la disolución de cloruro de sodio en agua, el balance energético es muy pequeño:

$$\Delta H_{\text{disolución}} = 788 \text{ kJ/mol} - 784 \text{ kJ/mol} = 4 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

Gracias a la termografía infrarroja, el pequeño enfriamiento puede detectarse y visualizarse termográficamente de forma clara.<sup>[8]</sup> Para ello, se disuelve un par de cucharadas

de cloruro de sodio en un vaso con 100 mL de agua. La temperatura desciende desde 23,4 °C (temperatura inicial) hasta 22,3 °C, según el proceso:



El efecto térmico contrario se produce cuando se disuelve en agua una sal como el cloruro de calcio. En este caso se aprecia un aumento de la temperatura hasta los 25 °C, debido a que la energía de hidratación es mayor que la que mantiene unida a la red iónica (Fig. 8), conforme a la ecuación:

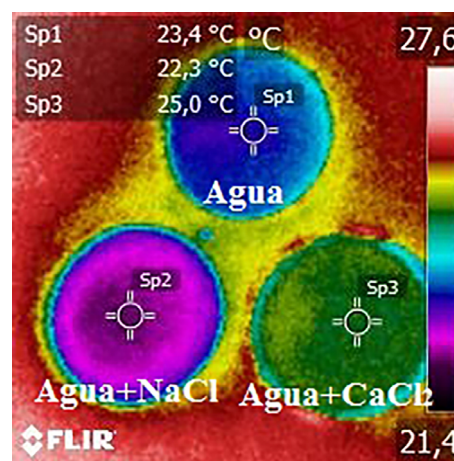
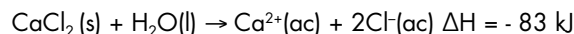


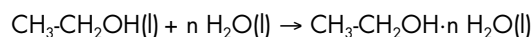
Figura 8. Comparativa térmica de diferentes disoluciones.

### Experiencia 7. Efecto de dilución

Asociado al proceso de dilución hay una transferencia de energía térmica, que depende de la concentración original de la disolución y de la cantidad de disolvente añadido. A medida que se añade más disolvente, el calor se aproxima a un límite, denominado valor de la disolución infinitamente diluida.

En el caso de la mezcla de etanol y agua, el proceso es exotérmico debido a la formación de puentes de hidrógeno entre las moléculas de etanol, que provoca un desprendimiento de energía calorífica.<sup>[9]</sup> En la imagen térmica de la figura 9b, se observa el aumento de temperatura ( $\approx 5 \text{ °C}$ ) producido al mezclar volúmenes iguales de etanol y agua respecto a un vaso de control con solo agua (Fig. 9a).

La dilución de etanol en agua se representa por la ecuación:



Es interesante realizar una comparativa entre el calor desprendido al añadir unas gotas de diferentes ácidos sobre el agua. En el caso del ácido sulfúrico concentrado, se libera tanto calor que el agua puede hervir violentamente y provocar quemaduras. Por ello la forma recomendada es añadir el ácido gota a gota sobre el agua, agitando para disipar el calor desprendido.

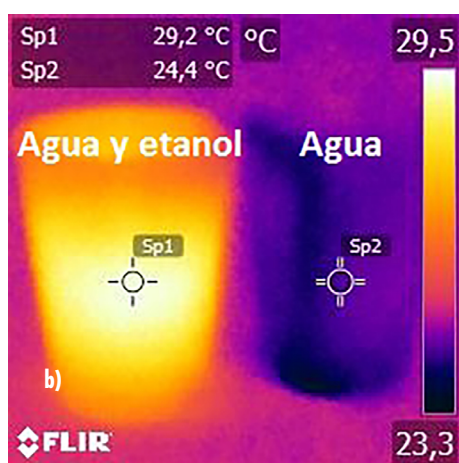
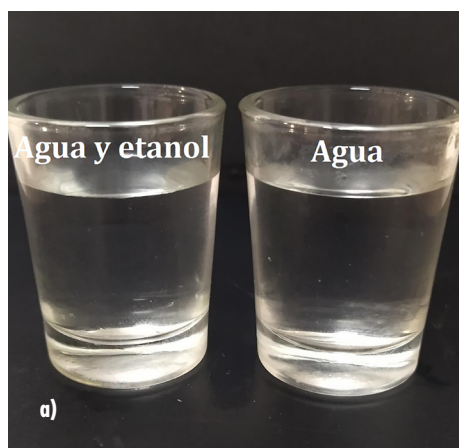


Figura 9. Imagen visible (a) y térmica (b) de la dilución del etanol.

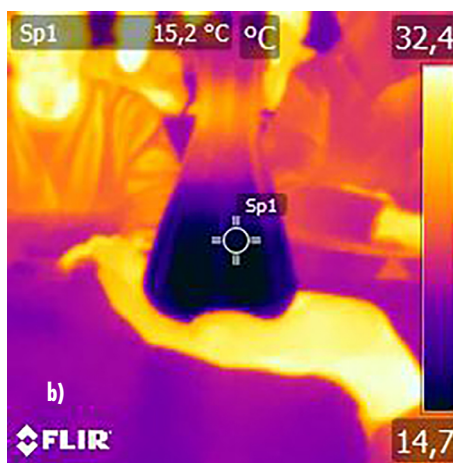
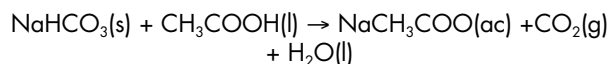
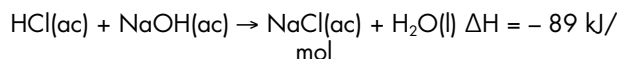


Figura 10. Imagen visible (a) y térmica (b) de la reacción entre el ácido acético y el bicarbonato de sodio.

### Experiencia 8. Entalpía de neutralización

Las reacciones químicas van acompañadas de una variación de energía que depende del tipo y número de enlaces en los reactivos y productos. Así por ejemplo, la mayoría de reacciones de neutralización son exotérmicas, como la que tiene lugar al combinar un ácido fuerte (HCl) con una base fuerte (NaOH):

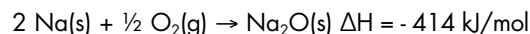


Sin embargo, en otros casos la neutralización es endotérmica<sup>[9]</sup>, como la reacción que se produce entre el bicarbonato de sodio y el ácido acético (Fig. 10a). Para analizar el proceso, se añade a un matraz Erlenmeyer el ácido, se mide la temperatura y añaden unas cucharadas de bicarbonato de sodio sólido, agitando hasta la total disolución. La reacción va acompañada de una absorción de energía térmica, que se detecta por una disminución de la temperatura del matraz (Fig. 10b).<sup>[10]</sup> La neutralización se representa por la ecuación:

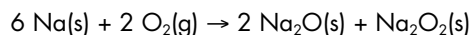
### Experiencia 9. Reactividad de los metales.

Uno de los factores que influyen en la velocidad de reacción es la naturaleza de los reactivos. Hay metales, como los alcalinos, que son tan reactivos, que no existen libres en la naturaleza. Así, al cortar un trozo del metal sodio y exponerlo al aire, pierde su brillo y apariencia plateada, formándose una capa grisácea que lo recubre, que contiene óxido de sodio (Fig. 11a). La rápida oxidación del sodio es un proceso exotérmico, como muestra la imagen térmica por el aumento de temperatura que se origina en los trozos de sodio cortados y puestos al aire (Fig. 11b).

La oxidación del sodio se suele representar por la ecuación termoquímica:



Sin embargo, durante el proceso de oxidación también se forma, en menor proporción, peróxido de sodio, según indica la ecuación:



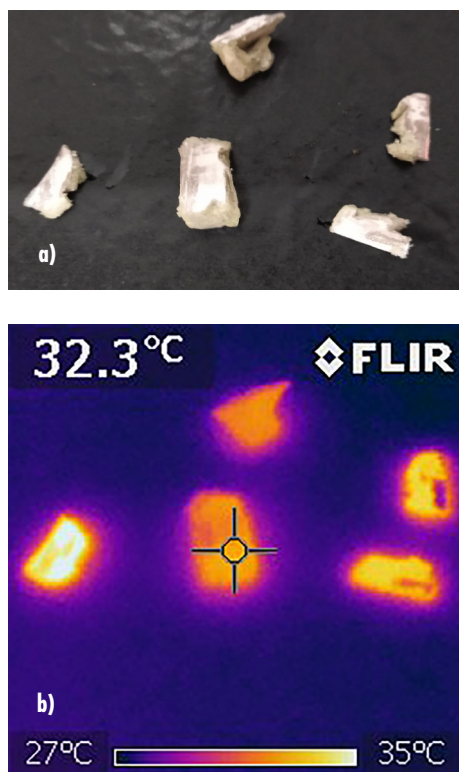


Figura 11. Imagen visible (a) y térmica (b) de la oxidación del sodio.

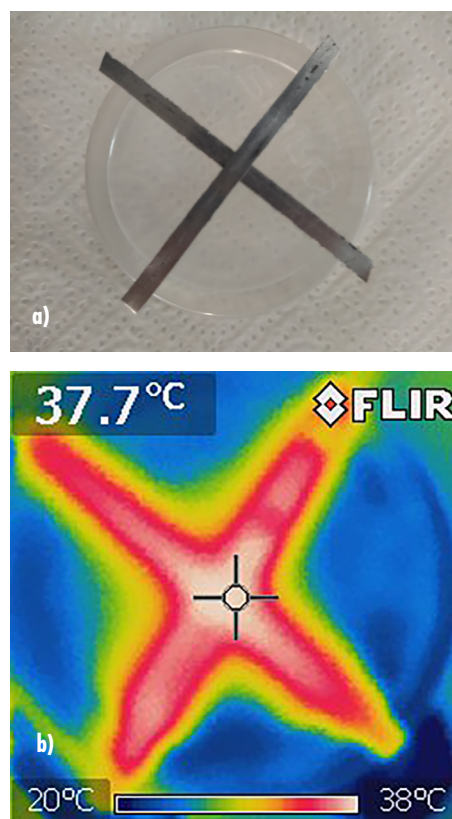
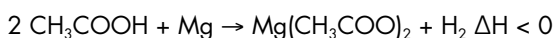


Figura 12. Imagen visible (a) y térmica (b) de la reacción entre el magnesio y el ácido acético.

Otros metales, como el magnesio, reaccionan frente al aire de forma más lenta, casi inapreciable, pero frente a un ácido, como el acético (Fig. 12a), lo hacen más rápidamente, liberando calor. Esta variación de energía es posible de visualizar con la cámara térmica, como se aprecia en la figura 12b, donde se han colocado en cruz dos cintas de magnesio, a la que se han añadido unas gotas de vinagre. El termograma muestra un aumento de temperatura, desde 20 °C hasta 38 °C, que corresponde a la ecuación exotérmica:



## Conclusiones

Las cámaras térmicas hacen posible la sorprendente visibilización de numerosos procesos, relacionados con la materia y la energía, en los que se produce un intercambio de calor, que de otra forma no sería posible. Por lo que se presenta como un recurso muy interesante para mejorar la didáctica de la química y aumentar el interés del alumnado por aprender.

La facilidad de manejo, y su precio cada vez más asequible, hacen de esta tecnología una herramienta altamente recomendable para el docente y que no debería faltar en ningún departamento de física y química de los centros de enseñanza preuniversitaria.

## Bibliografía

- [1] M. Vollmer and K-P. Möllmann. *Infrared Thermal Imaging: Fundamentals, Research and Applications*, 2018, 2<sup>o</sup> ed. Wiley-VCH, Berlín.
- [2] M. Vollmer, K.-P. Möllmann. *There is more to see than eyes can detect*. *Phys. Teach.* **2001**, 39, 371–376.
- [3] J. Haglund, J. Fredrik. *Students framing of laboratory exercises using infrared cameras*. *Physical Education Research*. **2015**, 11, 020127.
- [4] *Evaporation of Water and Ethanol (with Thermal Imaging Camera)*. 2020. Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Prague.
- [5] C. Xie, E. Hazzard. *Infrared Imaging for Inquiry-Based Learning*. *The Physics Teacher*, **2011**, 49, 368.
- [6] A. Wood. *A simple latent heat demonstration*. *School Science Review*, **1995**, 76, 277. 80-81.
- [7] C. Xie, *Visualizing chemistry with infrared imaging*. *J. Chem. Educ.* **2011**, 88, 881-885.
- [8] T. C. Green et al. *Invisibility Cloaks and Hot Reactions: Applying Infrared Thermography in the Chemistry Education Laboratory*. *J. Chem. Educ.* **2020**, 97, 3, 710–718.
- [9] C. P. Wong, R. Subramaniam. *Exploring thermal effects and behaviors of chemical substances using an infrared camera*. *J. Chem. Educ.* **2019**, 96(10), 2339-2344.
- [10] C. Bohrmann-Linde, S. Kleefeld. *Can You See the Heat? Using a Thermal Imaging Camera in the Chemistry Classroom*. *J. Chem. Educ.* **2019**, 7, 2, 179-184.

ENSEÑANZA  
DE LA QUÍMICA

# El movimiento STEM en el currículum: origen, fundamentación y análisis crítico



J. Quílez Pardo

IES Lluís Vives (Valencia)

E-mail: [jquilez@uji.es](mailto:jquilez@uji.es)

Recibido: 20/04/2022

Aceptado: 07/09/2022

ORCID: 0000-0001-5428-4617

Juan Quílez

**Resumen:** Se realiza una breve introducción del origen del movimiento STEM. Posteriormente, se analizan los problemas que surgen de su falta de conceptualización precisa y del intento de su puesta en práctica en el ámbito educativo, señalándose las críticas que recibe el enfoque integrado desde tres campos relacionados: las didácticas específicas, la psicología cognitiva y la teoría curricular.

**Palabras clave:** STEM, integración, indagación, competencias, conocimiento.

**Abstract:** A brief introduction to the origins of the STEM movement is given. Subsequently, the problems arising from both the lack of its precise conceptualisation and the attempts to its implementation in educational settings are analysed, pointing out the criticisms its integrated approach has received from three related fields: specific didactics, cognitive psychology and curriculum theory.

**Keywords:** STEM, integration, inquiry, competences, knowledge.

## Introducción

En un artículo reciente se hace una crítica fundamentada al nuevo marco legislativo que regula la enseñanza secundaria en España.<sup>[1]</sup> Este trabajo toma una posición semejante sobre un aspecto concreto:<sup>[2]</sup> la Lomloe establece que las materias se pueden agrupar por ámbitos de conocimiento hasta 3º de ESO. Ello supone fusionar dos o tres asignaturas, lo que implica que las materias afectadas pierden su carácter disciplinar. Por ejemplo, el ámbito científico-tecnológico suele agrupar en 1º de ESO a tres asignaturas, que son Biología, Matemáticas y Tecnología. En 2º de ESO, la estructura normal supone sustituir Biología por Física y Química.

El objetivo de este trabajo es conocer el origen y los fundamentos que han inspirado esta nueva estructura curricular, así como realizar un análisis de esta integración de materias a partir de lo que emana de la investigación educativa procedente de las distintas didácticas específicas, así como de la psicología cognitiva y de la teoría curricular.

## Del lanzamiento del satélite Sputnik al movimiento STEM

El Sputnik I fue el primer satélite de la historia. Se puso en órbita el 4 de octubre de 1957. Su lanzamiento por parte de la antigua Unión Soviética supuso un verdadero shock para la sociedad estadounidense.<sup>[3,4]</sup> Se pensó que tanto el sistema de defensa como el liderazgo económico de esta parte de Norteamérica necesitaban un decidido impulso en

la formación de científicos, matemáticos e ingenieros. La consecuencia inmediata fue la revisión y la actualización del currículum de las materias relacionadas con las ciencias y las matemáticas.<sup>[5]</sup> Ejemplos de estas reformas curriculares para la enseñanza secundaria son *Physical Science Curriculum Study (PSCS)*, 1960 y *CHEM Study*, 1960.

Esta preocupación propició que, en el año 1959, la *National Academy of Science* organizara *The Woods Hole Conference*. Este congreso estuvo presidido por Jerome Bruner. Otros participantes relevantes fueron Skinner, Inhelder y Cronbach. Dos años después, Bruner publicó su influyente trabajo *The Act of Discovery*,<sup>[6]</sup> que, como veremos posteriormente, ha permeado de forma importante enfoques posteriores de enseñanza de las ciencias.

Tras la crisis del satélite Sputnik, más o menos cada veinte años,<sup>[3]</sup> nuevas situaciones análogas han resurgido en Estados Unidos (*A Nation at Risk-1983*, *No Child Left Behind-2002*) reavivando los mismos sentimientos de miedo por amenazas militares y de pérdida de liderazgo económico, recayendo de nuevo en la supuesta baja calidad del sistema educativo la responsabilidad de los peligros asociados a la defensa nacional y de la alarma generada por la posible pérdida de su posicionamiento destacado en el mercado internacional. En definitiva, los cambios educativos estuvieron siempre enmarcados en valoraciones de índole militar y comercial.<sup>[7]</sup>

En este contexto fue tomando cuerpo a principios de este siglo el movimiento denominado STEM (*Science, Technology, Engineering and Mathematics*),<sup>[8]</sup> que rápidamente ha ido adquiriendo una gran aceptación y un enorme desarrollo, extendiéndose ampliamente en el ámbito internacional.<sup>[9]</sup> Básicamente, se señala que estas disciplinas son las responsables

del crecimiento económico de Estados Unidos en el contexto de globalización actual y que su impulso también permite atender aspectos de seguridad nacional.<sup>[4]</sup> Se asume además que el sistema educativo debería estar formando un mayor número de profesionales en las áreas STEM para atender la creciente oferta de empleos relacionados con estos campos.

Sin embargo, diferentes estudios<sup>[10-12]</sup> han demostrado que estas ideas no tienen un fundamento sólido, siendo como mínimo exageradas. A pesar de ello, se han aceptado acríticamente por la sociedad, más por la insistencia con la que cíclicamente reaparecen con la ayuda de los medios de comunicación en contextos de crisis (reales o generados)<sup>[13]</sup> que por su fundamentación basada en hechos demostrados. Por tanto, una serie de mitos como la carencia de profesionales STEM<sup>[14-16]</sup> o de ideas zombi relacionadas con aspectos económicos y militares<sup>[16-20]</sup> ha permitido que el movimiento STEM sea bien recibido por la sociedad estadounidense y que haya encontrado también una buena acogida en el contexto internacional,<sup>[21-23]</sup> facilitando en todos los casos que el currículum se articule dentro de parámetros de corte neoliberal.<sup>[12,14,18]</sup>

## La integración de materias STEM

Una vez señalado que las raíces fundacionales del movimiento STEM no son estrictamente educativas sino que su cimentación se enmarca principalmente en parámetros económicos y militares, así como en un intento de control del currículum, particularmente de las ciencias,<sup>[24]</sup> conviene conocer cómo se ha asentado firmemente en el mundo académico.

Diferentes organismos (OCDE y el Banco Mundial, entre otros)<sup>[25]</sup> han trasladado con éxito una serie de capacidades/competencias del ámbito de la empresa al contexto educativo. Particularmente, se habla del 'capital humano'<sup>[24]</sup> y de 'las buenas prácticas'<sup>[26]</sup> de la escuela y también se señala que a los estudiantes se les debe preparar en el desarrollo de una serie de habilidades o capacidades generales para su adecuada formación en su futura vida laboral.<sup>[27]</sup> Por ello, se deben potenciar cualidades 'de hacer' que se centren en la 'resolución de problemas' prácticos, relacionados con situaciones de la vida real y que supongan el diseño y la realización de distintos artefactos, en los que se desarrolle un 'pensamiento crítico', así como un 'espíritu emprendedor', con capacidad de 'trabajo interdisciplinar'.

Esta visión ha encontrado un perfecto acomodo en la 'nueva' pedagogía,<sup>[28]</sup> que se basa en las ideas de Dewey (aprendizaje por indagación o experimental; cuestionamiento del aprendizaje disciplinar; conocimiento surgido del estudio de problemas cotidianos),<sup>[29]</sup> Kilpatrick (aprendizaje por proyectos)<sup>[30]</sup> y Bruner (aprendizaje por descubrimiento),<sup>[6]</sup> en las que se pone el énfasis en el método científico, focalizado en actividades prácticas, así como en el fomento de la capacidad general de resolución de problemas. En el contexto español, algunos pedagogos como Jurjo Torres<sup>[31]</sup> ya recuperaron estas ideas en la etapa previa a la ley de educación de 1990 (LOGSE). Particularmente, este autor indicaba que las distintas materias proporcionan una visión fragmentada de la realidad, por lo que defendía un currículum integrado

o globalizado, con propuestas interdisciplinares que aboradaran problemas auténticos y que atendieran las necesidades e intereses de los alumnos. En el ámbito internacional, podemos encontrar visiones similares.<sup>[32]</sup> Finalmente, estos mismos fundamentos han permeado las reformas curriculares de muchos países de la OCDE,<sup>[33]</sup> de forma que se ha potenciado:<sup>[23,34]</sup> a) un currículum interdisciplinar a partir de la integración de materias (en donde el movimiento STEM aparece como ejemplo paradigmático) y b) el aprendizaje centrado en el alumno mediante prácticas de indagación por descubrimiento, otorgando al profesorado un papel auxiliar.

## Problemas educativos de la integración STEM

### Conceptualización STEM

El concepto STEM posee una cierta ambigüedad conceptual,<sup>[4]</sup> ya que abarca diferentes planos o ámbitos: a) el estrictamente profesional que encuadra a quienes trabajan en una de las áreas del acrónimo; b) el político-social, que suele emplearse como un eslogan muy seductor y c) el educativo, articulado en un supuesto marco de innovación y modernidad.<sup>[35,36]</sup>

Si nos centramos en el marco estrictamente educativo, la bibliografía no proporciona un significado claro, preciso y compartido en lo que hace referencia a sus prácticas<sup>[37]</sup> y a los principios que lo fundamentan.<sup>[38]</sup> En cualquier caso, se trata de una moda a la que se está adhiriendo un creciente número de autores<sup>[39,40]</sup> y que ha cuajado rápidamente en los planes educativos de muchos países,<sup>[26]</sup> aceptándose de forma acrítica.<sup>[16]</sup>

Si bien en muchos contextos educativos STEM hace referencia de forma genérica a cada una de las disciplinas individuales que componen el acrónimo,<sup>[41]</sup> parece que se está asumiendo que estas siglas implican un tratamiento integrado de las distintas materias que lo componen,<sup>[42]</sup> aunque la realidad es muy diversa. En general, las diferentes formas en las que se ha conceptualizado han generado una cierta confusión en la comunidad educativa.<sup>[43,44]</sup> Otros acrónimos más recientes, como STEAM, en el que se añade el término 'Arts' han introducido nuevos elementos de desorientación por falta de concreción y de fundamentación teórica ajustada.<sup>[45,46]</sup> Ante esta falta de marco conceptual claro, los problemas que surgen acerca de su efectividad (según se analiza en los siguientes apartados) y la diversidad con la que en la práctica se materializa, algunos autores han jugado irónicamente con el significado en inglés del acrónimo, señalando que *steam* sólo es 'humo'<sup>[39]</sup> o que habría que saber quiénes son los 'sádicos' (S) y quiénes los 'masoquistas' (M) de STEM.<sup>[47]</sup>

Finalmente, señalar que la práctica docente hace que en muchos casos STEM se entienda simplemente como ciencia y matemáticas, ya que los profesores no encuentran sencillo integrar la tecnología y la ingeniería, reduciendo en muchos casos este enfoque a simplemente emplear el ordenador como medio de búsqueda de conocimiento.<sup>[4]</sup> Por otro lado, también se ha señalado que existe otro grupo importante de investigaciones y de profesores que se decantan hacia la T

y la E del acrónimo,<sup>[48]</sup> por ser la tecnología y la ingeniería las áreas que permiten proporcionar una dimensión práctica a esta integración.<sup>[8]</sup> Se trataría de potenciar actividades ‘de hacer’, más que de pensar o conceptualizar, mediante la construcción de distintos artefactos, destacando los relacionados con la robótica.<sup>[11,39]</sup> Este enfoque trivializa la enseñanza de las matemáticas al otorgarle un papel meramente instrumental; de forma análoga, las ciencias suelen tomar un papel secundario.<sup>[16]</sup> Esta focalización práctica o manual tan restrictiva propicia que en sus concreciones curriculares se excluyan las dimensiones socioculturales,<sup>[16,49]</sup> como es el caso de la educación cívica.<sup>[19]</sup>

### Investigación didáctica

Un análisis crítico acerca de cómo conceptualizar y llevar a la práctica la integración STEM supone considerar los siguientes puntos clave:

#### *Las carencias teóricas que fundamentan y posibiliten la integración adecuada STEM*

Las distintas materias que conforman el acrónimo tienen unos fundamentos conceptuales, procedimentales y epistemológicos propios que, según algunos autores,<sup>[36,50]</sup> hacen inviable su integración, más allá de situaciones puntuales o anecdóticas,<sup>[39]</sup> por lo que las conexiones entre materias deberían realizarse únicamente desde planteamientos que conserven la identidad de las mismas,<sup>[51]</sup> siempre teniendo como prerequisite un conocimiento previo disciplinar profundo.<sup>[52]</sup>

Esta imposibilidad no permitiría otorgar a STEM un status epistemológico propio. Todo ello provoca que exista una falta de concreción de lo que supone realizar esta integración de materias.<sup>[53]</sup> Este marco teórico difuso, unido a la formación del profesorado como especialistas (normalmente de sólo una de las materias que integran el acrónimo STEM), hace que cuando esta aproximación interdisciplinar se impone obligatoriamente a todo el profesorado,<sup>[54]</sup> éste realice aproximaciones superficiales e irrelevantes en sus intentos de conexión entre las distintas materias.

Entre los peligros que surgen en los intentos de esta fusión disciplinar, otros autores señalan que se pueden generar serias lagunas conceptuales,<sup>[55]</sup> así como impedirse una adecuada visión de la estructura, fines y prácticas específicas de cada una de las distintas disciplinas.<sup>[56]</sup> Éstas poseen conceptos estructurantes particularmente jerarquizados que requieren presentaciones y procesos de construcción singulares, que se difuminan o se distorsionan con esta nueva forma de trabajo.<sup>[57]</sup> Estos efectos se acrecientan por trivializaciones excesivas en los casos elegidos para la integración de materias.<sup>[55]</sup> Esta metodología que se centra esencialmente sobre lo práctico devalúa de forma relevante la enseñanza de la ciencia y de las matemáticas al desconsiderar como importantes las formas de pensamiento que permiten trabajar con ideas abstractas y modelos.<sup>[56]</sup> Además, esta minusvaloración del aspecto conceptual dificulta el aprendizaje del alumnado, ya que la terminología académica que se emplea en cada

materia posee su significado concreto que debería hacerse explícito en cada contexto.<sup>[58]</sup> Esta barrera lingüística está asociada al empleo de un vocabulario específico que cobra distinto significado dependiendo del contexto particular en el que se emplea. Se pueden citar como ejemplos de léxico académico polisémico el término argumentación, que se conceptualiza de forma diferente en ciencias y en matemáticas, así como la palabra modelo, que adopta un significado diferente en ciencias y en ingeniería.

#### *La existencia de un número escaso de estudios empíricos que muestren la efectividad de un modelo consolidado*

Existen múltiples estudios que muestran la efectividad de un tratamiento puntual integrado de dos o más materias STEM, fundamentalmente en lo que hace referencia al aspecto motivacional del alumnado,<sup>[59]</sup> aunque una revisión reciente concluye que esta forma de trabajo no es bien recibida por los estudiantes.<sup>[60]</sup>

Las distintas revisiones realizadas concluyen que no existe suficiente investigación empírica que muestre la efectividad de un modelo consolidado de integración STEM sostenido en el tiempo.<sup>[54,61]</sup>

Particularmente, los intentos de integración ciencias-matemáticas tienen una larga historia acerca de su escasa efectividad,<sup>[47,62]</sup> que se remonta a principios del siglo XX a partir del marco curricular establecido por Kilpatrick y Dewey. Por otro lado, los estudios que han analizado el impacto de la inclusión de la tecnología y la ingeniería en el currículum de ciencias no han encontrado soporte experimental que muestre una mejora del conocimiento científico.<sup>[11]</sup> En una revisión reciente,<sup>[46]</sup> de los 548 artículos inicialmente obtenidos que respondían a un aprendizaje interdisciplinar STEM, finalmente únicamente se encontraron 11 trabajos que proporcionarían un verdadero soporte empírico sobre su mayor efectividad en el aprendizaje de los alumnos. Sin embargo, llaman la atención dos de estos once artículos seleccionados<sup>[63,64]</sup> por el esfuerzo realizado por sus autores para presentarse desde el enfoque STEM integrado. En realidad, uno de ellos<sup>[63]</sup> es básicamente un estudio de química sobre un trabajo práctico de electrólisis; análogamente, el otro<sup>[64]</sup> se corresponde a una acción dentro del campo de la biología, ya que discute una mejora específica en el aprendizaje de la genética.

Finalmente, un aspecto no desdeñable es cómo realizar la evaluación del ámbito STEM,<sup>[52]</sup> ya que se debe pasar de una evaluación puramente disciplinar a otra que valore el conocimiento transdisciplinar. Thibaut<sup>[42]</sup> señaló la falta de criterios claros a la hora de evaluar proyectos STEM integrativos. En este sentido, los profesores que trabajan en el ámbito STEM han indicado la dificultad de evaluar individualmente a los estudiantes, ya que su trabajo se realiza en grupo.<sup>[65]</sup>

#### *Out-of-field teachers*

Diversas investigaciones sobre la calidad de la enseñanza revelan que uno de los principales factores que determinan el éxito del proceso de enseñanza/aprendizaje es la calidad del profesorado responsable de su desarrollo.<sup>[66]</sup>

Cuando un profesor tiene que enseñar fuera de su campo de especialización surgen serios problemas que afectan a la calidad del trabajo que se realiza en el aula. La problemática asociada a esta baja cualificación docente se enmarca en una línea de investigación muy potente denominada *out-of-field teachers*, que se ha convertido en un aspecto central en el ámbito de la enseñanza de las ciencias.<sup>[67]</sup> Por ello, sorprende que en la metodología de STEM integrado un solo profesor sea quien se encarga normalmente de impartir todo el ámbito. Los profesores suelen tener formación inicial como especialistas de sólo una de las materias que componen el acrónimo. Esta circunstancia comporta tres problemas asociados: a) el profesorado STEM no tiene un conocimiento profundo de toda la materia a impartir (normalmente sólo de una parte), lo que supone que no se sienta ni seguro ni preparado<sup>[68]</sup> y que manifieste un número importante de errores conceptuales sobre conceptos fundamentales;<sup>[69]</sup> b) su conocimiento pedagógico (didáctico) de ese contenido (PCK, en sus siglas en inglés, a partir del trabajo de Shulman<sup>[70]</sup>) es muy limitado;<sup>[71]</sup> c) las dos limitaciones anteriores tienen consecuencias sobre la escasa preparación para diseñar la aproximación holística de la integración disciplinar que deben realizar.<sup>[54,72]</sup> Estas restricciones representan un serio obstáculo para generar una enseñanza apropiada en contextos STEM, ya que su escasa preparación está asociada con una baja confianza en su trabajo, lo que ocasiona una deficiente calidad de las clases y, en consecuencia, un bajo rendimiento académico de los estudiantes y una reducción de su motivación hacia el estudio.<sup>[73]</sup>

### Aprendizaje por descubrimiento. La visión de la psicología cognitiva

El cuestionamiento de la instrucción directa por el profesor, dejando que los alumnos construyan su propio aprendizaje mediante procesos de indagación autónoma sobre problemas cotidianos, ha demostrado ser un auténtico desastre educativo.<sup>[74]</sup> A pesar de ello, las ideas de Bruner y de Dewey han emergido periódicamente bajo diferentes denominaciones (aprendizaje por descubrimiento, experimental, basado en problemas o por indagación, entre otros)<sup>[75]</sup> hasta llegar a nuestros días, impregnando de forma relevante los planteamientos educativos que fundamentan los proyectos curriculares de países de la OCDE, según se ha señalado previamente.

Los conocimientos actuales de psicología cognitiva acerca de cómo se aprende y cómo se organiza el conocimiento<sup>[76]</sup> permiten asegurar que el aprendizaje por descubrimiento es inefectivo.<sup>[77]</sup> En este ambiente de trabajo los alumnos se sienten frustrados y desorientados, generando al mismo tiempo errores conceptuales.<sup>[75]</sup> Estos resultados negativos se acrecientan cuanto mayor es el tiempo que el alumno trabaja en este ambiente.<sup>[78]</sup>

Los problemas reales de la vida diaria son muy complejos. La memoria de trabajo que va a permitir filtrar e integrar la nueva información en la memoria a largo plazo tiene una capacidad muy limitada. Si estas situaciones no se acotan adecuadamente, se produce un bloqueo por tener

que atender demasiados elementos a la vez, impidiendo que los alumnos aprendan significativamente, facilitando con ello un aprendizaje nulo o puramente memorístico. Es misión de los profesores administrar y graduar la información que se proporciona a los alumnos para que estos puedan procesarla adecuadamente.<sup>[79]</sup> Por ejemplo, la presentación y resolución por parte del profesor de problemas en situaciones concretas facilita el aprendizaje, ya que disminuye la carga cognitiva de la memoria de trabajo.<sup>[80]</sup>

Por otro lado, la psicología cognitiva<sup>[81]</sup> también señala que el trabajo de capacidades científicas procedimentales (como, por ejemplo, la resolución de problemas), es efectivo cuando se desarrolla en contextos específicos en los que la memoria a largo plazo tiene los conocimientos previos suficientes para poner en práctica esas habilidades. Si no se dispone de una adecuada estructura de conceptos en la memoria a largo plazo, esos procesos no se pueden desarrollar, lo que cuestiona el pretendido efecto del trabajo de competencias o capacidades generales que presuntamente se pueden transferir a cualquier situación de aprendizaje.

Diferentes estudios realizados a gran escala,<sup>[82]</sup> tomando como referencia pruebas internacionales, coinciden en señalar que el aprendizaje por indagación abierto produce una merma del aprendizaje y que éste mejora considerablemente cuando el profesorado asume un verdadero papel protagonista en su papel de proporcionar conocimiento.

### Teoría curricular. El conocimiento poderoso

El enfoque pedagógico que promueve el aprendizaje por competencias desatiende el conocimiento,<sup>[83]</sup> ya que priva a los estudiantes de los aspectos teóricos de las distintas disciplinas,<sup>[84]</sup> devaluando la práctica instruccional al centrarse en aspectos casi exclusivamente prácticos,<sup>[85]</sup> lo que supone una desprofesionalización del profesorado.<sup>[86]</sup> Según algunos autores,<sup>[23]</sup> un aspecto esencial (junto a la calidad del profesorado), que propicia que los alumnos puedan verdaderamente aprender, es la existencia de un currículo bien organizado, secuenciado y suficientemente detallado que facilite su comprensión y desarrollo por el profesorado.

Los conocimientos disciplinares son los que permiten al alumno desarrollar un conocimiento más amplio y más profundo que el que adquiere de su experiencia en su entorno cotidiano.<sup>[87]</sup> El conocimiento epistémico no se promueve en los estudiantes a partir del estudio de temas generales, asociados a competencias genéricas y procedimientos de indagación autónoma.<sup>[88]</sup> Esta carencia de una base que permita un pensamiento crítico dificulta a los alumnos una valoración de distintas concepciones que pueden competir entre sí a la hora de entender elementos básicos de su vida diaria. Por ello, la teoría curricular<sup>[89]</sup> cuestiona la tradición pedagógica pavidocentrista basada en el marco instruccional articulado por Dewey.<sup>[29]</sup> En consecuencia, esta visión crítica descarta que el profesorado deba tener un papel secundario como simple facilitador del aprendizaje, ya que su función como profesional de la enseñanza debe ser la de actuar como autoridad pedagógica, fruto del análisis de su expe-



riencia, compartida con otros profesores, y de su profundo conocimiento disciplinar y didáctico.<sup>[90]</sup>

Young<sup>[91]</sup> señala que el currículum no debe estar centrado en el alumno sino en intentar responder a la siguiente pregunta: ¿Cuál es el conocimiento que un alumno (de secundaria, por ejemplo) tiene derecho a tener acceso? En su respuesta proporciona una serie de características de ese conocimiento:<sup>[89]</sup> a) se trata de un conocimiento en el que se puede confiar; b) resulta de mejor calidad que el que el alumno adquiere de su experiencia cotidiana, ya que le permite abrir nuevas ventanas de comprensión y entendimiento; c) aporta ideas y conceptos que le ayudan a pensar de una forma abstracta y a construir nuevos significados, potenciando con ello su desarrollo intelectual; d) las explicaciones que proporciona se pueden poner a prueba; e) está sujeto a revisión; f) se adquiere en instituciones especializadas; g) normalmente está asociado a un aprendizaje disciplinar, que proporciona parámetros específicos de contextualización. Esta distinción entre dos formas de conceptualizar:<sup>[92]</sup> 1) de forma teórica (científica) y 2) basada en experiencias cotidianas o de sentido común, cuestiona de forma muy significativa el aprendizaje por descubrimiento.<sup>[6]</sup>

Además, esta perspectiva curricular también pone en duda la efectividad de la integración de materias y un currículum genérico, asociado todo ello a un planteamiento competencial,<sup>[85,93]</sup> ya que este conocimiento disciplinar<sup>[94]</sup> se adquiere en contextos específicos instruccionales, perfectamente delimitados por las distintas materias impartidas por profesores especialistas. En este entorno académico el profesor se asegura de establecer tanto las relaciones existentes entre los conceptos de su materia como las conexiones que se pueden realizar con otras, así como de proporcionar ejemplos significativos de aplicación. Se debe destacar que este enfoque pedagógico resulta especialmente beneficioso para los estudiantes que provengan de entornos socioeconómicos desfavorecidos, ya que este conocimiento poderoso<sup>[95]</sup> es el único medio que poseen de ascender, por lo menos en el plano intelectual, desde sus circunstancias particulares.

Finalmente, señalar que la teoría curricular plantea una objeción adicional al enfoque competencial, ya que éste establece que existen unas competencias generales como capacidad de expresión práctica o método universal. Esta visión posee una deficiencia fundamental: esas competencias sólo toman sentido en contextos muy específicos, que están ligados a los conocimientos particulares que emanan de cada una de las materias para situaciones concretas. Por tanto, no sólo se cuestiona la fundamentación pedagógica de existencia de esas capacidades generales, sino que se pone en seria duda que el trabajo de STEM integrado sobre proyectos 'de hacer' permita una preparación adecuada para la futura vida laboral, ya que la adquisición de una competencia específica no significa que se pueda transferir a otros contextos.<sup>[85]</sup>

## Conclusiones

Los principios de índole económica y militar fundacionales del movimiento STEM, reavivados periódicamente en épocas de crisis, han propiciado que durante los últimos veinte años

este acrónimo se haya consolidado con gran éxito para la enseñanza de las ciencias. Su enorme atractivo se ha convertido en una acción pretendidamente salvadora que ha seducido a las autoridades educativas de muchos países, lo que ha provocado que se regulen cambios curriculares significativos en la enseñanza secundaria.

Sin embargo, existe una gran confusión entre la comunidad académica en lo que se refiere tanto a los principios teóricos que inspiran esta visión disciplinar como a los aspectos prácticos que permiten su desarrollo efectivo en las aulas. La integración STEM no posee una definición conceptual clara y compartida. A ello se debe añadir que se han planteado serias dudas sobre la viabilidad de esta fusión de materias a partir del estudio de los principios epistemológicos de cada una de las distintas disciplinas del acrónimo. En cada caso, sus conceptos, su significado específico y su estructura singular tienen implicaciones relevantes acerca de cómo se deben presentar, organizar y secuenciar para su aprendizaje, lo que cuestiona enormemente que se pueda conseguir con éxito la unificación de materias como alternativa pedagógica.

La pretendida efectividad de la enseñanza STEM se ha examinado desde distintos marcos relacionados. En el campo de las didácticas específicas se han formulado una serie de objeciones, entre las que destacan: a) la falta de atención de las ciencias y las matemáticas, que pasan a tener un papel secundario; b) la ausencia de evidencia empírica acerca del éxito del enfoque STEM integrado auténtico, sostenido en el tiempo, más allá de acciones puntuales; c) la dificultad de la evaluación; d) la práctica imposibilidad de que la mayor parte del profesorado domine tanto los contenidos de todas las materias como su didáctica, así como la práctica de aula que implica su agrupación; e) la escasa calidad del aprendizaje por descubrimiento, basado en aspectos eminentemente prácticos. Por su parte, la psicología cognitiva también es muy crítica por considerar que el profesorado debe tener un mayor protagonismo a la hora de ayudar en la organización del conocimiento de sus estudiantes. Un papel esencial del profesorado de cada materia es la de introducir conceptos y procedimientos, graduados según el nivel académico, así como proporcionar los ejemplos relevantes al alumnado, acotando adecuadamente los problemas de estudio. De esta forma, se evita que su memoria de trabajo se sature por tener que enfrentarse a problemas reales abiertos, debido a que éstos poseen intrínsecamente muchos elementos a considerar, lo que los hace cognitivamente muy complejos. Por último, la teoría curricular también proporciona nuevos elementos críticos, señalando la devaluación del conocimiento que se produce por un enfoque competencial, abogando por un conocimiento poderoso, desarrollado por profesores especialistas a partir de un currículum bien organizado. La concreción en el aula de esta estructura curricular debe permitir al alumnado trascender más allá de su experiencia cotidiana mediante la construcción de ideas científicas que le posibiliten conceptualizar de una forma mejor y más segura, lo que supone dominar el lenguaje académico<sup>[58]</sup> para razonar, argumentar y debatir sobre cuestiones sociocientíficas. Finalmente, señalar otro aspecto relacionado que cuestiona el énfasis puesto en la pretendida adquisición de competen-

cias generales (la resolución de problemas o el pensamiento crítico, por ejemplo). Estas capacidades o habilidades sólo cobran sentido asociadas a conceptos particulares en contextos concretos, con dificultad de transferencia a otros terrenos, máxime si no se dominan los conocimientos necesarios.

De todos estos análisis se concluye que una aproximación interdisciplinar puede ser efectiva cuando ya se dominan los principios básicos de cada una de las materias a relacionar. Se infiere que las conexiones entre asignaturas se deben realizar desde cada uno de campos de estudio, en donde el papel de cada uno de los profesores especialistas es determinante a la hora de elegir el momento y la duración en que se trabajan esos nexos y aplicaciones. Los cambios curriculares precisan un soporte sólido conceptual y un apoyo empírico que demuestre su posible validez. Con estos prerrequisitos se evitarían imposiciones y adhesiones acríticas a modos de escasa efectividad que ponen en peligro una apropiada formación académica del alumnado.

## Bibliografía

- [1] J. A. De Azcárraga, *Rev. Esp. Pedagog.* **2022**, 80(281), 111-129.
- [2] a) J. Quílez, *An. Quím.* **2021**, 117 (1), 7-8; b) J. Martínez-Torregrosa, J. Carrascosa, *Vitruvian Cogitationes* **2021**, 2(1), 1-13.
- [3] A. Steeves, P. E. Bernhardt, J. P. Burns, M. K. Lombard, *Am. Educ. Hist. J.* **2009**, 36(1), 71-87
- [4] R. W. Bybee *The case for STEM education: challenges and opportunities*. Arlington, VA: NSTA Press. 2013.
- [5] C. Wissehr, J. Concannon, L. H. Barrow, *Sch. Sci. Rev.* **2011**, 111(7), 368-375.
- [6] J. S. Bruner, *Harv. Educ. Rev.* **1961**, 31, 21-32.
- [7] E. V. Johanningmeier, *Am. Educ. Hist. J.* **2010**, 37(2), 347-365.
- [8] M. Sanders, *Technology Teacher*, **2009**, 68(4), 20-26.
- [9] S. Erduran, *Sci. & Educ.* **2020**, 29, 781-784.
- [10] J. Williams, *DATE* **2011**, 16(1), 26-35.
- [11] W. F. McComas, S. R. Burgin, *Sci. & Educ.* **2020**, 29, 805-829.
- [12] M. Zouda, *JASTE* **2016**, 7(1), 70 - 83.
- [13] N. Klein. *The shock doctrine. The rise of disaster capitalism*. Penguin. London. 2007.
- [14] K. Bencze, L. Reiss, M.J. Sharma, A. Weinstein, En: L. Bryan, K. Tobin (eds.) *13 Questions: Reframing Education's Conversation: Science*. (pp. 69-87). Peter Lang: New York. 2018.
- [15] H.J. Stevenson, *Issues in Teacher Education* **2014**, 23(1), 133-146.
- [16] D. L. Zeidler, B. C. Herman, M. P. Clough, J. K., Olson, S. Kahn, M. Newton, *J. Sci. Teacher Educ.* **2016**, 27, 465-476.
- [17] A. Sharma, *JASTE*, **2016**, 7 (1), 42-51.
- [18] M. Weinstein, *JASTE* **2016** 7(1), 63-72.
- [19] T. C. Hytten & K. Stenmagen, *Educ. Stud.* **2020**, 568(1), 18-36.
- [20] M. A. Takeuchi, P. Sengupta, M.C. Shanahan, J. D. Adams, M. Hachem, *Stud. Sci. Educ.* **2020**, 56(2), 213-253.
- [21] L. Parker, *Can. J. Educ. Adm. Policy* **2017**, 183, 44-60.
- [22] L. Carter, *Can. J. Sci. Math. Tech. Educ.* **2017**, 17, 247-257.
- [23] M. Henrekson y J. Wennström, *J. Institutional Econ.* **2019**, 15, 897-914;
- [24] M. Weinstein, D. Blades, S. C. Gleason, *Can. J. Sci. Math. Tech. Educ.* **2016**, 16(2), 201-212.
- [25] S. Blackley, J. Howell, *Aust. J. Teach. Educ.* **2015**, 40(7), 102-112.
- [26] D.L. Zeidler, *Cult. Stud. Sci. Educ.* **2016**, 11, 11-26.
- [27] A. P. Carnevale, N. Smith, M. Melton, *STEM: Science, technology, engineering & mathematics*. Washington: Center on Education and the Workforce. 2011.
- [28] L. Zhang, *Sci. & Educ.* **2016**, 25, 897-915.
- [29] a) J. Dewey, *How we think*. Boston: Heath. 1910; b) J. Dewey, *Science* **1910**, 31(787), 121-127; c) J. Dewey, *Sci. Educ.* **1916**, 1, 3-9; d) J. Dewey, *Experience and education*. New York: Simon and Schuster. 1938.
- [30] W. H. Kilpatrick, *Teachers College Record* **1918**, 19(4), 319-335.
- [31] a) J. Torres, *Revista de Educación* **1987**, 282, 103-130; b) J. Torres, *Cuadernos de Pedagogía* **1989**, 172, 10-13.
- [32] a) Hurd, P. D. *Educ. Leadersh.* **1991** 49(2), 33-35;. b) M. Roth, *Sch. Sci. Math.* **1993**, 93(3), 113-122; c) M. Gibbons, et al., *The new production of knowledge: The dynamics of science and research in contemporary societies*. Thousand Oaks, CA: Sage. 1994.
- [33] F. Waldow, *Prospects* **2015**, 45, 49-62
- [34] E. D. Hirsch, *Why Knowledge Matters: Rescuing Our Children from Failed Educational Theories*, Cambridge: Harvard Education Press. 2016.
- [35] J.M. Breiner, S.S. Harkness, C.C. Johnson, C.M. Koehler, *Sch. Sci. Math.* **2012**, 112(1), 3-11.
- [36] V. L. Akerson, A. Burgess, A. Gerber, M. Guo, T. A. Khan, S. Newman, *J. Sci. Teacher Educ.* **2018**, 29(1), 1-8.
- [37] N. Diana et al., *J. Phys. Conf. Ser.* **2021**, 1806 012219.
- [38] T. Martín-Páez, D. Aguilera, F.J. Perales-Palacios, J.M. Vilchez-González, *Sci. Educ.* **2019**, 103(4), 799-822.
- [39] A. García-Carmona, *Ápice. Revista de Educación Científica* **2020**, 4(2), 35-50.
- [40] a) R. B. Toma, A. García-Carmona, *Ens. Cien.* **2021**, 39(1), 65-80; b) Y. Li, K. Wang, Y. Xiao, J. E. Froyd, *Int. J. STEM Educ.* **2020**, 7, 11.
- [41] L. English, *Int. J. STEM Educ.* **2016**, 3(3), 1-8.
- [42] L. Thibaut, S. Ceuppens, H. De Loof, J. De Meester et al., *Eur. J. STEM Educ.* **2018**, 3(1), 1-12.
- [43] V. Wong, J. Dillon, H. King, *Int. J. Sci. Educ.* **2016**, 38(15), 2346-2366,
- [44] E.A. Dare, E.A. Ring y G.H. Roehrig, *Int. J. Sci. Educ.* **2019**, 41(12), 1701-1720.
- [45] S. Mejias, et al., *Sci. Educ.* **2021**, 105(2), 209-231.
- [46] D. White y S. Delaney, *LUMAT Int. J. Math. Sci. Technol. Educ.* **2021**, 9(2), 9-32.
- [47] N. G. Lederman, J. S. Lederman, *J. Sci. Teacher Educ.* **2013**, 24(8), 1237-1240.
- [48] a) J. L. Martin. *Secondary mathematics education in the age of STEM: Tensions and possibilities for policy and practice in NSW*. PhD Thesis. University of Technology Sydney Faculty of Arts and Social Science. 2021; b) J. Woodard, *American Affairs* **2019** III (3).
- [49] J. Pleasants, *Sci. & Educ.* **2020**, 29(4), 831-855.
- [50] J. Pleasants, J. K. Olson, *Sci. Educ.* **2019**, 103, 145-166.
- [51] N. G. Lederman, M. L. Niess, *Sch. Sci. Math.* **1997**, 97(2), 57-58.
- [52] G. Pearson, *J. Educ. Res.* **2017**, 110(3), 224-226.
- [53] K. Stinson, S. Harkness, H. Meyer, J. Stallworth, *Sch. Sci. Math.* **2009**, 109(3), 153-161.

- [54] A. Hasni, Y. Lenoir, F. Alessandra, *Issues in Interdisciplinary Studies* **2015**, 33, 144–180.
- [55] T. C. Mason, *J. Teach. Educ.* **1996**, 47(4), 263–270.
- [56] B. M. Reynante, M. E. Selbach-Allen, D. R. Pimentel, *Sci. & Educ.* **2020**, 29(4), 785–803.
- [57] K. J. Roth, *Am. Educator* **1994**, 18(1), 44–48.
- [58] J. Quílez, *Stud. Sci. Educ.* **2019**, 55(2), 121–167.
- [59] C. M. Czerniak, C. C. Johnson. En N. G. Lederman, S. K. Abell (Eds.), *Handbook of research on science education* (2nd ed., pp. 395–412). Mahwah, NJ: Lawrence Erlbaum Associates. 2014.
- [60] P. Shekhar, M. Borrego, M. DeMonbrun, C. Finelli, C. Crockett, K. Nguyen, *J. Coll. Sci. Teach.* **2020**, 49(6), 45–54.
- [61] J. Brown, *J. STEM Educ.* **2012**, 13(5), 7–11.
- [62] a) C. M. Czerniak, W. B. Weber, A. Sandmann, J. Ahern, *Sch. Sci. Math.* **1999**, 99(8), 421–430; b) C. M. Czerniak, En K. S. Abell, N. G. Lederman & (Eds.), *Handbook of research on science education* (pp. 537–560). Routledge: New York. 2007.
- [63] N. H. D. Huri, M. Karpudewan, *Chem. Educ. Res. Pract.* **2019**, 20(3), 495–508.
- [64] A. A. Yaki, R. M. Saat, R. V. Sathasivam, H. Zulnaidi, *Malay. J. Learn. Instr.* **2019**, 16(1), 181–205.
- [65] a) K. C. Margot, T. Kettler, *I. J. STEM Educ.* **2019**, 6(2), 1–16; b) J.M. Diego-Mantecon, T. Prodromou, Z.Laviczka, et al., *ZDM Math. Educ.* **2021**, 53, 1137–1148.
- [66] a) L. Darling-Hammond, *Educ. Policy Anal. Arch.* **2000** 8(1); b) J. A. C. Hattie, *Visible learning: A synthesis of 800+ meta-analyses on achievement*. Routledge. 2009.
- [67] a) L. Hobbs, G. Törner *Examining the Phenomenon of “Teaching Out-of-field”*. Springer: Singapore. 2019; b) L. Shah, C. Jannuzzo, T. Hassan, B. Gadidov, H.E. Ray, G.T. Rushton, *PLoS ONE* **2019**, 14(9), e0223186; c) J. A. Luft, D. Hanuscin, L. Hobbs, G. Törner, *J. Sci. Teacher Educ.* **2020**, 31(7), 719–724.
- [68] a) M. Ratcliffe, R. Millar, *J. Res. Sci. Teach.* **2009**, 46, 946–959; b) R.B. Toma, I. M. Greca, *Eur. J. Math. Sci. Tech. Educ.* **2018**, 14(4), 1383–1395.
- [69] a) K. J. Schoon, W. J. Boone, *Sci. Educ.* **1998**, 82, 553–568; b) A. Antink-Meyer, D. Z. Meyer, *J. Sci. Teacher Educ.* **2016**, 27(6), 625–647.
- [70] a) L. S. Shulman, *Educ. Res.* **1986**, 15(2), 4–14; b) L. S. Shulman, *Harv. Educ. Rev.* **1987**, 57(1), 1–23; c) J.H. van Driel, N. Verlop, W. De Vos, *J. Res. Sci. Teach.* **1998**, 35(6), 673–695.
- [71] a) S. S. Guzey, M. Harwell y T. Moore, *Sch. Sci. Math.* **2014** 114(6), 271–279; b) A. E. Du Plessis, *Res. Sci. Educ.* **2020**, 50(4), 1465–1499.
- [72] H. El-Deghaidy, N. Mansour, M. Alzaghibi, K. Alhammad, *Eurasia J. Math. Sci.* **2017**, 13(6), 2459–2484.
- [73] a) J. Wallace, W. Louden, *Dilemmas of science teaching: Perspectives on problems of practice*. London: Routledge Falmer. 2002; b) J. P. Van Overschelde, A. Piatt, *REPAM*, **2020**, 2(1), 1–22.
- [74] a) R. E. Mayer, *Am. Psychol.* **2004**, 59(1), 14–19; b) P. A. Kirschner, J.J.G. van Merriënboer, *Educ. Psychol.* **2013**, 48(3), 169–183.
- [75] P. A. Kirschner, J. Sweller, R. E. Clark, *Educ. Psychol.* **2006**, 41(2), 75–86.
- [76] J. Sweller, P. Ayres, S. Kalyug, *Cognitive Load Theory*. Springer: New York. 2011.
- [77] J. Sweller, *Cognitive Sci.* **1988**, 12, 257–285.
- [78] J. Sweller, R. Mawer, W. Howe, *Am. J. Psychol.* **1982**, 95, 455–484.
- [79] M. M. Cooper, R. L. Stowe, *Chem. Rev.* **2018**, 118, 6053–6087.
- [80] a) J. Sweller, J. J. G. van Merriënboer, F. Paas, *Educ. Psychol. Rev.* **1998**, 10, 251–296; b) J. Sweller, J.J.G. van Merriënboer, F. Paas, *Educ. Psychol. Rev.* **2019**, 31, 261–292.
- [81] A. Tricot, J. Sweller, *Educ. Psychol. Rev.* **2014**, 26, 265–283.
- [82] L. Zhang, J. Van Reet, *Res. Sci. Educ.* **2021**.
- [83] a) J. Muller, M. Young, *High Educ.* **2014**, 67, 127–140; b) Z. Deng, *J. Curric. Stud.* **2015**, 47(6), 773–786; c) V. Millar, *Sci. & Educ.*, **2020**, 29, 929–948.
- [84] L. Wheelahan, *Br. J. Sociol. Educ.* **2007**, 28(5), 637–651.
- [85] a) I. Willbergh, *J. Curric. Stud.* **2015**, 47(3), 334–354; b) I. Willbergh, *Nordic Journal of Pedagogy & Critique* **2016**, 2, 111–124.
- [86] B. Barrett, J. Hordern, *J. Curric. Stud.* **2021**, 53(2), 153–165.
- [87] a) L. Wheelahan, *Why Knowledge Matters in Curriculum: A Social Realist Argument*, London: Routledge. 2010; b) J. Beck, *Camb. J. Educ.* **2013**, 43(2), 177–193.
- [88] G. McPhail, *J. Curric. Stud.* **2021**, 53(4), 420–434.
- [89] M. Young, *J. Curric. Stud.* **2013**, 45(2), 101–118.
- [90] a) C. Winch, A. Oancea, J. Orchard, *Oxf. Rev. Educ.* **2015**, 41(2), 202–216; b) J. Hordern, M. T. Totto, *Oxf. Rev. Educ.* **2018**, 44(6), 686–701.
- [91] M. Young, *J. Educ. Work* **2009**, 22, 193–204.
- [92] M. Young, J. Muller, *Rev. Educ.* **2013**, 1(3), 229–250.
- [93] a) M. Young, J. Muller, *Eur. J. Educ.* **2010**, 45(1), 11–27; b) L. Wheelahan, G. Moodie, J. Doughney, *Br. J. Soc. Educ.* **2022**, 42(3), 475–494.
- [94] J. Muller, M. Young, *Curric.* **2019**, 30(2), 196–214.
- [95] a) M. Young, *Rev. Res. Educ.* **2008**, 32, 1–28; b) N. Gericke, B. Hudson, C. Olin-Scheller, M. Stolare, *Lond. Rev. Educ.* **2018**, 16(3), 428–444; c) Z. Deng, *Br. Educ. Res. J.* **2021**, 47, 1652–1674.

# XXXVIII Reunión Bienal de la RSEQ



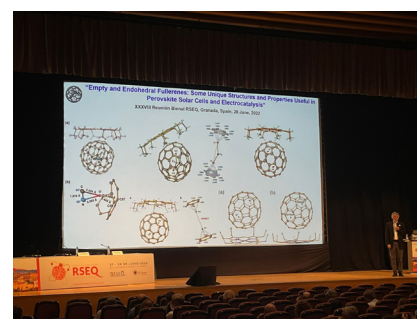
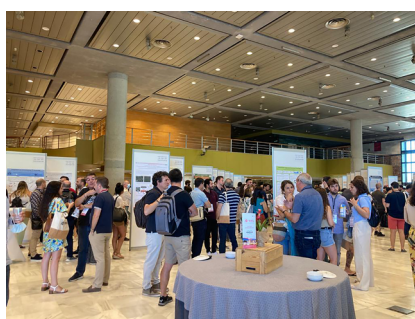
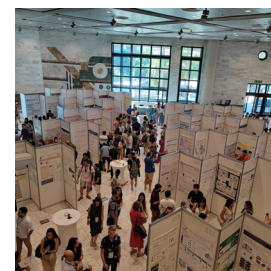
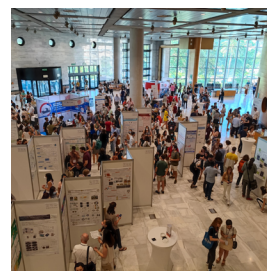
La XXXVIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) se ha podido realizar de forma presencial. Se celebró del 27 al 30 de junio en el Palacio de Congresos de Granada y ha concluido con un gran éxito de participación y una gran calidad en todas las modalidades de participación.

El año que viene la Bienal se celebrará en Zaragoza.

La Bienal en números:

- Más de **1.600** asistentes, entre ellos 917 estudiantes y 19 empresas.
- **7** conferencias plenarias.
- **16** simposios temáticos.
- **6** sesiones de póster.
- **75** conferenciantes invitados.
- **462** comunicaciones orales.
- **894** pósteres.

© 2022 Real Sociedad Española de Química



Fotos de distintos momentos de la XXXVIII Reunión Bienal

## Noticias grupos especializados

### XXVIII Reunión Bienal del Grupo Especializado de Química Orgánica

El día 1 de julio de este año se ha desarrollado en Granada la XXVIII Reunión Bienal del Grupo Especializado de Química Orgánica de la RSEQ (GEQOR).

La periodicidad de este encuentro, interrumpida desde su celebración en Santiago de Compostela en 2018, se ha retomado con una jornada que tuvo lugar en el marco del Palacio de Congresos de Granada, y ha contado con el apoyo económico del GEQOR y Chemistry Europe. El programa científico de la Bienal dio cabida al reconocimiento y entrega de Medallas a los Premiados: Luis Sánchez (Ignacio Ribas 2020, Universidad Complutense de Madrid), José Manuel González (Fèlix Serratos 2020, Universidad de Oviedo), Concepción González Bello (Ignacio Ribas 2021, CIQUS-Universidad de Santiago) y Carmen Carreño (Fèlix Serratos 2021, Universidad Autónoma de Madrid), que impartieron sendas conferencias plenarias. El programa se completó con las contribuciones tipo póster de más de 150 estudiantes de doctorado, de los cuales cinco fueron premiados por el GEQOR y Chemistry Europe.

Se celebró la Junta General Ordinaria en la que, entre otras cosas, se proclamó la nueva composición de la Junta de Gobierno y se anunció la celebración de la XXIX Reunión



Asistentes a la XXVIII Reunión Bienal del GEQOR

Bienal del Grupo Especializado de Química Orgánica en Santa Cruz de Tenerife en junio de 2024.

La Junta de Gobierno del GEQOR quiere agradecer a los más de 275 participantes su contribución al éxito de esta Bienal. A pesar de tratarse de una edición con formato reducido, hemos disfrutado del excepcional nivel de la Química Orgánica en nuestro país.

### XLII Reunión del Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ

La XLII Reunión del Grupo Especializado de Electroquímica (GEE) de la RSEQ tuvo lugar en formato presencial en Santander del 6 al 8 de julio de 2022, y fue organizada por miembros del Departamento de Ingenierías Química y Biomolecular de la Universidad de Cantabria.

El evento congregó a más de 150 expertos nacionales e internacionales en diferentes ámbitos de la Electroquímica. Durante los 3 días que duró la reunión, se presentaron 3 conferencias plenarias (Prof. Ángel Irabien, Universidad de Cantabria; Prof. María Escudero-Escribano, Universidad de Copenhague; y Prof. Adélio Mendes, Universidad de Oporto), 61 comunicaciones orales y 50 posters. Además, como es ya habitual en las reuniones del GEE, durante la reunión tuvieron lugar las defensas de los trabajos de fin de Máster y de los proyectos de Tesis de los estudiantes de los programas interuniversitarios de máster y doctorado en 'Electroquímica. Ciencia y Tecnología'.



Foto oficial de la XLII Reunión del Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ

# Entrega de los Premios del Grupo de Electroquímica

En el seno de la XLII Reunión del Grupo Especializado de Electroquímica (GEE) tuvo lugar la entrega de los Premios Grupo de Electroquímica correspondientes a los años 2020, 2021 y 2022.

En esta ocasión, se han entregado los Premios del Grupo de Electroquímica-CIC EnergiGUNE. El patrocinador CIC EnergiGUNE, centro de investigación vasco referente en [almacenamiento de energía](#), en [baterías](#), soluciones de [energía térmica](#) e hidrógeno estuvo representado por D. Asier Urzelai, Director del área de Personas y por el Prof. Paramaconi Rodríguez, Líder del Grupo de Tecnologías Electroquímicas del Hidrógeno), el GEE estuvo representado por su vicepresidenta, la Prof. María Aránzazu Heras de la Universidad de Burgos.

Los premiados han sido:

- **Dra. Julia Álvarez Malmagro** (Universidad de Limerick, Irlanda) Premio 2022 de 'Jóvenes Talentos' del Grupo de Electroquímica-CIC EnergiGUNE.



De izquierda a derecha: Julia Álvarez Malmagro, Paramaconi Rodríguez, Asier Urzelai y María Aránzazu Heras

- **Dr. Albert Serrà Ramos** (Universidad de Barcelona) Premio 2021 de 'Jóvenes Talentos' del Grupo de Electroquímica-CIC EnergiGUNE.
- **Prof. Ángela Molina Gómez** (Universidad de Murcia). Premio 2020 de 'Investigación Científica' del Grupo de Electroquímica-CIC EnergiGUNE, destinado a la mejor investigación en Electroquímica. El premio fue concedido a la candidatura "*Estudio electroquímico y electroquímico de procesos de transferencia electrónica y transferencia iónica en interfaces de tamaño micrométrico y nanométrico*"

El equipo de investigación de la Dra. Ángela Molina Gómez está compuesto por la Dra. Carmen Serna Ballester, el Dr. Francisco de Asís Martínez Ortiz, la Dra. Manuela López Tenés, el Dr. Joaquín González Sánchez, el Dr. Eduardo Laborda Ochando y la Dra. Encarnación Torralba Peñalver, todos ellos de la Universidad de Murcia.

Recogieron el premio los profesores Joaquín González Sánchez y Eduardo Laborda Ochando.



De izquierda a derecha: Albert Serrà Ramos, Paramaconi Rodríguez, Asier Urzelai y María Aránzazu Heras



De izquierda a derecha: Joaquín González Sánchez, Paramaconi Rodríguez, Asier Urzelai, Eduardo Laborda Ochando y María Aránzazu Heras

Por otra parte, se resolvió el VII Premio 'Antonio Aldaz' a la mejor Tesis Doctoral en el ámbito de la Electroquímica defendida durante el año 2020. El premio fue concedido al **Dr. Javier Quílez Bermejo** (Universidad de Alicante) por su tesis titulada "*Design of N-doped carbon materials for ORR electrocatalysts through the combination of computational modelling and chemical synthesis*", dirigida por los profesores Emilia Morallón Nuñez y Diego Cazorla Amorós.



Javier Quílez Bermejo y María Aránzazu Heras

© 2022 Real Sociedad Española de Química

# Entrega de Premios 2022 del Grupo Especializado de Cristalografía y Crecimiento Cristalino (GE3C)

El día 1 de Julio, en el marco de la Asamblea General del GE3C que se celebró en Granada asociada a la Bienal de la RSEQ, tuvo lugar la entrega de premios del GE3C. El acto contó con representación de las empresas patrocinadoras y los premios fueron entregados por la presidenta del GE3C.

El máximo galardón del Grupo, la Insignia de Oro se entregó al Prof. Juan Manuel Pérez Mato. Este galardón pretende reconocer no solo una trayectoria de excelencia científica, sino también una dedicación excepcional al impulso de la Cristalografía y, en particular, a la promoción de nuestro Grupo especializado. En este caso merece especial reconocimiento el haber fundado y desarrollado el "Bilbao Crystallographic Server", sitio web con bases de datos y programas cristalográficos de acceso libre en internet, ampliamente utilizada por la comunidad cristalográfica internacional.

Juan Manuel Pérez Mato es actualmente Catedrático retirado de Física de la Materia Condensada de la Universidad del País Vasco, tras más de 30 años de dedicación. Sus intereses en investigación incluyen la caracterización de transiciones de fase y materiales ferroicos y el desarrollo de métodos en cristalografía computacional. Su trabajo ha sido especialmente intenso en la aplicación del formalismo de superespacios en la investigación de estructuras moduladas y modulares. Recientemente, sus esfuerzos se han dirigido al diseño de herramientas computacionales basadas en la simetría para el análisis de estructuras magnéticas. Muy importante ha sido también su actividad en organismos internacionales, habiendo sido miembro del Comité Ejecutivo de la Unión Internacional de Cristalografía (IUCr) y miembro de los comités editoriales de varias importantes revistas.

El Premio Sagrario Martínez Carrera-Rigaku, en su primera edición, se entregó al Dr. Fermín Otálora Muñoz, del Laboratorio de Estudios Cristalográficos (IACT, CSIC, Granada). Este premio reconoce la carrera de cristalógrafos relevantes en España, en etapas intermedias de su carrera.

Fermín Otálora posee un gran currículum científico. Sus trabajos en crecimiento cristalino, tanto de sistemas biológicos como inorgánicos y minerales, suponen aportaciones



En la foto, de izquierda a derecha, Vicente Esteve Cano (Secretario del GE3C), Prof. Juan Manuel Pérez Mato, Pilar Gómez Sal (Presidenta GE3C), Dr. Fermín Otálora, Dra. Palmerina Rodríguez, Sol López Andrés y Armando Albert (Vicepresidentes GE3C).

muy importantes a estos campos. Es de destacar también su actividad como coorganizador del Máster de Cristalografía y Cristalización de la UIMP, y sus cargos de representación internacionales.

El premio Xavier Solans -Bruker se concedió a la Dra. Palmerina González Izquierdo por su artículo "((R)-[L]-3-Hydroxyquinuclidium)[FeCl<sub>4</sub>]; a plastic hybrid compound with chirality, ferroelectricity and long range magnetic ordering". Esta distinción premia un trabajo científico relevante en el área de la Cristalografía o el Crecimiento Cristalino publicado por un joven científico en el año anterior al de su concesión.

PILAR GÓMEZ SAL, UNIVERSIDAD DE ALCALÁ  
(Presidenta GE3C)

VICENTE ESTEVE UNIVERSIDAD JAUME I  
(Secretario GE3C)

# Premios Internacionales

## Entrega del premio Ciamician-González 2019

El pasado 7 de junio el Profesor Nazario Martín, Catedrático en la Universidad Complutense de Madrid y subdirector del IMDEA-Nanociencias, recibió el galardón Ciamician-González 2019, en la Universidad de Roma «Tor Vergata» concedido conjuntamente por la Sociedad Química Italiana y por la Real Sociedad Española de Química. El Presidente electo Gianluca Maria Farinola, en representación del Presidente Guerra, ha hecho entrega de la beca y el diploma.

El Prof. Martín ha impartido el seminario “Unveiling the Properties of Chiral Synthetic Molecular Nanographenes”,



Gianluca Maria Farinola y Nazario Martín

Con este galardón se reconoce sus destacadas contribuciones en el campo de la química orgánica de materiales innovadores. Las investigaciones del Prof. Martín han demostrado que la combinación racional y creativa de diferentes tipos de estructuras funcionales en nuevas arquitecturas híbridas pueden dar lugar al descubrimiento de nuevos materiales con tremendo impacto en diversos campos tecnológicos.

## Rosa Palacín, premio Miguel Catalán – Paul Sabatier 2022

La Prof. M. Rosa Palacín, Profesora de Investigación y Vice-directora del Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB), ha sido galardonada por la Sociedad de Química Francesa junto con la Real Sociedad Española de Química con el premio **Miguel Catalán – Paul Sabatier** en reconocimiento de su trabajo en el campo de las baterías Li-ion y Na-ion. La ceremonia de entrega tendrá lugar durante la reunión de la Sociedad Química Francesa (SCF) en junio de 2023 en Nantes (Francia).

M. Rosa Palacín es licenciada en Química (1991) y doctora en Química (1995) por la Universidad Autónoma de Barcelona. Realizó una estancia postdoctoral en el Laboratoire de Réactivité et Chimie des Solides de Amiens (Francia) (1996-1997). Desde 1998 es científica en el ICMAB, primero como investigadora postdoctoral (1998), Científica Titular

(1999), Científica Investigadora (2009) y desde 2018 es Profesora de Investigación.

Es investigadora del Grupo de Química del Estado Sólido, Directora Científica del Proyecto del Centro de Excelencia Severo Ochoa “FUNFUTURE” del ICMAB (2020-2023) y Subdirectora del Instituto.



M. Rosa Palacín

Ha publicado más de 130 artículos en revistas especializadas y de alto impacto, es coautora de 7 capítulos de libros, y coinventora de 9 patentes. Se trata de una de las científicas más citadas a nivel mundial en su campo. Ha sido editora asociada de varias revistas hasta que en 2016 se incorporó al Consejo Editorial de la revista *Chemistry of Materials*.

Ha participado en numerosos proyectos de divulgación científica. También ha participado en numerosos eventos relacionados con la mujer y la ciencia.

M. Rosa Palacín es experta en Química del estado sólido y electroquímica aplicada a las baterías, desde conceptos comerciales basados en el níquel o el litio, hasta nuevas tecnologías alternativas y emergentes basadas en elementos abundantes como el sodio, el magnesio o el calcio. Es especialista en crear sinergias entre la investigación básica, la investigación aplicada y la industria. Ha dirigido y participado en múltiples proyectos europeos y forma parte de asociaciones y consorcios internacionales en el campo de las baterías. Su investigación ha sido reconocida con el Premio de Investigación 2021 de la Asociación Internacional de Baterías (IBA) y ha sido nombrada Fellow de la Sociedad Electroquímica.

*“Agradezco a la Sociedad Química de Francia (SCF) este premio, que es también para todos los miembros del equipo y colaboradores, muchos de los cuales son de Francia. Me siento en deuda con la comunidad científica francesa, ya que mi carrera no habría sido la misma sin mi actividad postdoctoral en baterías, que comenzó en el Laboratoire de Réactivité et Chimie des Solides (LRCS) de Amiens: ¡un grand merci à tous!”* Rosa Palacín.



## XIV edición de los Premios SusChem-España

La Plataforma Tecnológica y de Innovación de Química Sostenible SusChem-España ha resuelto sus Premios SusChem-Jóvenes Investigadores Químicos, cuyo objetivo es reconocer, apoyar y promover la actividad científico-divulgativa de los jóvenes talentos de la química española.

Los galardones, otorgados por un jurado multidisciplinar, están promovidos en sus tres categorías por la Federación Empresarial de la Industria Química Española ([FEIQUE](#)), la Asociación Nacional de Químicos e Ingenieros Químicos de España ([ANQUE](#)), la Conferencia Española de Decanos de Químicas ([CEDQ](#)), Expoquímica, el [Foro Química y Sociedad y Tecnalia Ventures](#).

**Futura:** Premio al mejor expediente académico de grado de química o cualquier otro relacionado con la ciencia y las tecnologías químicas y cuyo título se hubiera obtenido en 2021.

**Investiga:** Premio al autor de la mejor publicación científica, con número de página de 2021, en cualquier área de la química, y que estuviera en posesión del título de doctor a 31 de diciembre de 2021.

**Innova:** Premio al mejor trabajo desarrollado a partir de una colaboración público-privada.

### Premio SusChem 2022– Categoría Futura



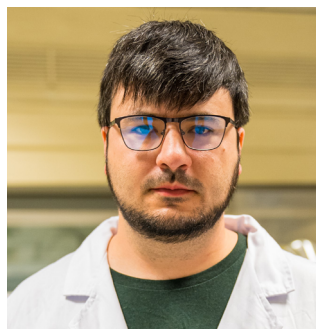
Alejandra Pita Milleiro

Por su brillante trayectoria académica y méritos extracurriculares.

Alejandra Pita (Pontevedra, 1998) obtuvo el Grado en Química y el Grado en Ingeniería de Materiales por la Universidad de Sevilla en 2021, obteniendo el Premio Extraordinario de Fin de Estudios, el Premio San Alberto Magno, y el Premio Real Maestría de Caballería de Sevilla. En 2022 recibe el título de Máster en Estudios Avanzados en Química por la Universidad de Sevilla tras haber realizado el TFM en el grupo del Dr. Jesús Campos en el Instituto de Investigaciones Químicas (IIQ, CSIC-US) gracias a una beca JAE intro. En la actualidad es Personal Investigador de la Universidad de Sevilla y comenzará sus estudios de doctorado en el grupo


del Dr. Campos para especializarse en síntesis organometálica, química computacional y electrocatálisis gracias a una beca La Caixa Doctoral INPhINIT Fellowship Retaining.

### Premio SusChem 2022– Categoría Investiga



Dr. Ignacio Funes-Ardoiz

Por su trabajo [Accelerated dinuclear palladium catalyst identification through unsupervised machine learning](#), desarrollado en la RWTH Aachen University.

El Dr. Ignacio Funes-Ardoiz (Tudela, Navarra) se licenció en Química en el año 2012 en la Universidad de La Rioja y posteriormente realizó el Máster y el doctorado en el grupo del profesor Feliu Maseras en el Instituto Catalán de Investigación Química (ICIQ), con el contrato Severo Ochoa, siendo reconocido con el Premio extraordinario y el Premio Josep Castells de la sección catalana de la RSEQ. Tras obtener su doctorado en 2017, obtuvo una beca de la fundación Alexander von Humboldt para realizar su estancia postdoctoral de dos años en la universidad RWTH Aachen, bajo la dirección de la profesora Franziska Schoenebeck. En 2020, regresó a la Universidad de La Rioja como investigador postdoctoral y en 2022 obtuvo el contrato Juan de la Cierva-Incorporación para continuar con su investigación en la Rioja. Su investigación se centra en el uso de la química computacional para comprender y mejorar diferentes procesos (foto)catalíticos, así como la aplicación del aprendizaje automático (*machine learning*) a los procesos químicos. Además, siempre ha tenido una gran implicación en la divulgación científica, habiendo obtenido diferentes reconocimientos. Entre sus pasiones, destaca la cocina y la música.  [0000-0002-5843-9660](https://orcid.org/0000-0002-5843-9660)


### Premio SusChem 2022– Categoría Innova

Por sus resultados en el proyecto [Desarrollo de una nueva clase de reactivos de P\(V\) sostenibles que conduzcan a una mayor eficiencia y a procesos más ecológicos](#), desarrollado en el Scripps Research Institute, en colaboración con el Bristol Myers Squibb.



Dra. Natalia Muñoz Padial

Natalia Muñoz Padial completó su doctorado en Química en 2016 por la Universidad de Granada bajo la supervisión del Prof. J. A. R. Navarro y E. Oltra (Premio Extraordinario

de la Universidad de Granada y Premio de Tesis Doctoral de la RSEQ). Tras una estancia postdoctoral como investigadora postdoctoral de la Junta de Andalucía (2017) en FuniMat y como contratada Marie Skłodowska-Curie Global (2018-2020) en el grupo del Prof. P. Baran en Scripps Research (San Diego, EEUU), ha regresado a FuniMat con una beca Junior Leader La Caixa. Combina una formación multidisciplinar en Química Orgánica, Química Inorgánica y Ciencias de los Materiales. Por otro lado, posee experiencia con socios industriales a partir de colaboraciones con varias empresas como las farmacéuticas Pfizer y Bristol-Myers Squibb y la multinacional Sensients Fragrances S.A. Su trabajo para lograr una nueva clase de reactivos de P(V) sostenibles que sean más eficientes y ecológicos en colaboración con Bristol-Myers Squibb ha recibido el premio "Green Chemistry Challenge Award (2021)" de la Agencia de Protección Ambiental de EE. UU. (EPA), el "Robert Robinson" de la división Orgánica de la Royal Society of Chemistry del Reino Unido (2022). Además, es cofundadora de la start-up "Porous Materials in Action (PMA)".  [0000-0001-6067-3360](https://orcid.org/0000-0001-6067-3360)

XXXIX REUNIÓN  
**BIENAL DE QUÍMICA**  
RSEQ   
25 - 29 de junio  
Auditorio de Zaragoza

Zaragoza 2023  
[www.bqz2023.com](http://www.bqz2023.com)

## Artículos reseñables

# Selectivity in single-molecule reactions by tip-induced redox chemistry

*Science*, **2022**, 377, 298-301

## Selectividad en reacciones de moléculas individuales mediante química redox inducida por la punta

F. Albrecht, S. Fatayer, I. Pozo, I. Tavernelli, J. Reep, D. Peña, L. Gross.

En 1959, Richard P. Feynman predijo, en su famosa charla *Plenty of Room at the Bottom*, que algún día sería posible crear moléculas individuales *a la carta* ensamblando los átomos a voluntad. Recientemente, este grado de control sobre el mundo molecular se ha demostrado en parte posible, después de que un grupo de investigadores liderados por Diego Peña, del Centro Singular de Investigación en Química Biológica y Materiales Moleculares (CiQUS) de la Universidad de Santiago de Compostela y Leo Gross, de IBM Research Zurich, hayan descrito la formación y ruptura selectiva de enlaces covalentes en moléculas individuales depositadas sobre superficie. Estas transformaciones químicas fueron inducidas aplicando diferentes pulsos de voltaje con la punta de un microscopio de sonda de barrido, que se empleó además para visualizar las moléculas obtenidas con resolución sub-molecular. Este trabajo se ha publicado recientemente en la revista *Science* y se ha destacado en su portada.

Los investigadores partieron de moléculas del 5,6,11,12-tetraclorotetraceno, que se depositaron sobre una superficie de cloruro sódico. A continuación, se provocaron diferentes transformaciones en moléculas individuales inducidas mediante pulsos de voltaje en condiciones de ultra alto vacío, que dieron lugar a la formación de un diradical de fórmula  $C_{18}H_8$  y caracterizado por un anillo central de diez miembros. Un pulso de voltaje adicional sobre este diradical indujo la formación de un enlace carbono-carbono transanular, dando lugar, bien a una estructura con un anillo de ocho miembros fusionado a otro de cuatro miembros, o bien a una estructura con dos anillos de seis miembros fusionados en el centro de la molécula. Sorprendente, estos reagrupamientos resultaron ser altamente selectivos, controlando la formación de uno u otro isómero estructural mediante la modulación en la amplitud del pulso del voltaje empleado. Además, invirtiendo la polaridad fue posible recuperar el diradical de partida en un proceso reversible. Cabría esperar que las tres especies

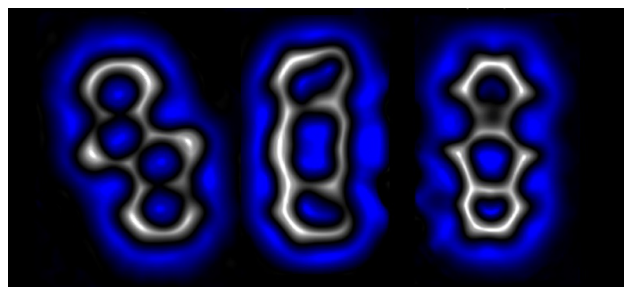


Portada de la revista que publica el trabajo reseñado.

moleculares involucradas en estos reagrupamientos fuesen extremadamente reactivas en condiciones ambientales, pero estos compuestos se pudieron caracterizar y manipular sobre superficie gracias al empleo de condiciones de ultra alto vacío y temperatura criogénica.

Estos avances demuestran el potencial de los microscopios de sonda de barrido de alta resolución para producir avances relevantes en

química y manipular de forma controlada moléculas individuales. Este es el objetivo del proyecto ERC *Synergy Grant* denominado MolDAM, donde se enmarca este trabajo. Cabe indicar que el trabajo comentado aquí mereció reseñas en *Chemistry World* y *El País*, entre otros medios.



Imágenes obtenidas mediante microscopio de fuerza atómica (AFM) de los isómeros estructurales con fórmula  $C_{18}H_8$  involucrados en este estudio. Credit: IBM Research

## Química en las universidades europeas del siglo XIX

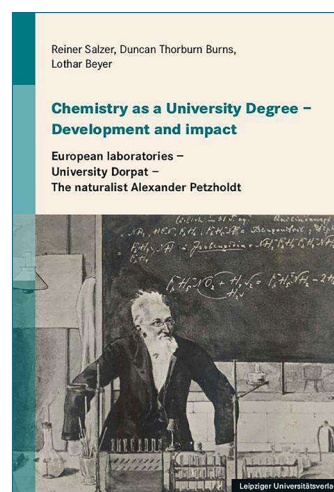
R. Salzer, D. T. Burns y L. Beyer

El título de esta reseña podría ser también una traducción sintética del título del libro que aquí comento y de sus tres secciones: «Laboratorios europeos», «La Universidad de Tartú», y «El naturalista Alexander Petzholdt». Cada sección está a cargo de uno de los autores: Duncan Thorburn Burns, Reiner Salzer y Lothar Beyer, los tres con una amplia trayectoria científica en los campos de la química analítica y la química inorgánica, en la Queen's University de Belfast, la Universidad de Dresden y la Universidad de Leipzig, respectivamente.

En la primera sección, Burns se encarga de una introducción muy atinada y dedica luego un apartado a cada uno de los siguientes países: Francia, Gran Bretaña e Irlanda, el Imperio de los Habsburgo, Italia, los Países Bajos, Portugal, los países nórdicos (Dinamarca, Finlandia, Noruega y Suecia) y Suiza. Beyer, conocido seguramente por muchos lectores de Anales, dadas sus relaciones con químicos españoles (y también latinoamericanos), es el responsable del apartado dedicado a España, y Salzer del de Alemania. Es precisamente en estos dos últimos apartados donde encontramos un mayor detalle y mayor profusión de datos, imágenes y bibliografía.

Centrándonos en el apartado dedicado a la química española, que puede suscitar mayor interés en los lectores de esta revista, baste decir que se reseñan las actividades de un numeroso elenco de químicos españoles de la época con la mira puesta en mostrar las relaciones entre ellos y con la química del resto de Europa que, si bien se nos ofrecen como muestra y no de manera exhaustiva, nos permite esbozar las raíces de un árbol genealógico que nos ofrece una visión panorámica del nivel internacional de nuestros predecesores (Figura 1). Se pone énfasis en el papel jugado por la presencia de Proust en Bergara, Madrid, Segovia y Salamanca sobre la evolución de la química en España, así como la influencia de Pierre-François Chabaneau sobre sus discípulos en Bergara, los hermanos Elhuyar.

El elenco de personajes del mundo académico citados por Beyer es mucho más extenso de lo que aquí se puede



Fecha de Publicación: 15/12/2021  
ISBN: 978-3-96023-416-6  
Páginas: 244  
Editorial: Leipziger Universitätsverlag  
Precio: 25 €

resumir, y tampoco olvida la influencia de otros químicos europeos en las aplicaciones prácticas, representadas a guisa de ejemplo por el irlandés Juan Dowling en la fábrica de vidrio de San Ildefonso, su compatriota William Bowles en la agricultura, y los alemanes Christian Storr y Martin Hoppen sack en Almadén.

La segunda parte de este libro está dedicada a la universidad de Tartú durante el siglo XIX. La segunda ciudad de la actual Estonia, Tartú (Dorpat en sueco, Yuryev en ruso), bajo dominio sueco desde 1625, pasó a dominio ruso en 1704 hasta la independencia de Estonia en 1918. Poco después de pasar a manos suecas, en 1632, el rey Gustavo Adolfo creó allí la Academia Gustaviana, una universidad sueco-latina y la segunda más antigua de Suecia después de la de Upsala.

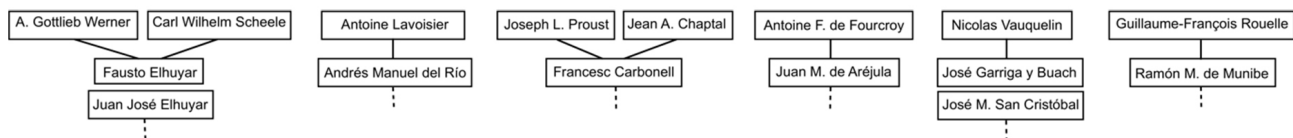


Figura 1. Esbozo de las raíces de un árbol genealógico de la química española del siglo XIX que muestra las relaciones con las primeras espadas europeas del momento, elaborado a partir de los datos ofrecidos en el libro de Salzer, Burns y Beyer.

Bajo dominio ruso, la universidad fue cerrada en 1710, y no fue hasta finales del siglo XVIII cuando el zar Pablo I estableció una nueva universidad en esa ciudad. Éste, para evitar la influencia de las ideas revolucionarias imperantes en Francia, prohibió a los jóvenes del imperio formarse en universidades extranjeras, así como la contratación de profesores extranjeros. Complementariamente, su política desembocó en la creación de la nueva Universidad Protestante de Tartú en 1799, que se puso en marcha poco después, tras el asesinato del zar, al tiempo que su sucesor Alejandro I iniciaba una política de apertura.

Esta universidad fue la única germano-parlante del Imperio Ruso, avatar que los autores reflejan gráficamente con las cubiertas de los catálogos de cursos de 1872 (bilingüe en alemán y ruso), 1918 (sólo en ruso), y 1919 (en estonio). En 1823 se desdobra la Cátedra de «Ciencias Naturales, incluyendo química» en sendas cátedras de química y de farmacia, la primera de las cuales la ocupa Carl Göbel hasta su muerte en 1851, período en el que se produce un fuerte impulso a la química en esa universidad, que la convierte en la primera del Imperio Ruso en otorgar títulos de química, incluso a nivel de doctorado. En 1846 se contrata a un seguidor de Liebig para la cátedra de Economía y Tecnología, Alexander Petzholdt, al que los autores dedican la tercera sección del libro. En 1852 Carl Schmidt, que aparece en la ilustración de portada (Figura 1), continúa la tarea de Göbel, con una impresionante lista de cursos de química (general, inorgánica, orgánica, analítica, forense, agrícola, fisiológica, historia de la química y estequiometría) y adoptando textos franceses (de Regnault y del menorquín Orfila) y alemanes (de Liebig y Gmelin). En el mismo año Tartú nombró miembro honorífico a Justus von Liebig, quien ejerció una gran influencia en la química rusa, en la que destacan Abramovich Voskresensky en San Petersburgo y, a través de él, sus discípulos Dimitri I. Mendeléiev y Nikolai A. Menshutkin. Otros seguidores rusos destacados de Liebig son Nikolai N. Zinin en Kazan con su discípulo Alfred Nobel, o Friedrich K. Beilstein, autor del famosísimo *Handbuch der Organischen Chemie* (1881), formado en Alemania (Múnich, Heidelberg y Göttingen) y París, y que ejerció la docencia en Breslau y Göttingen antes de volver a San Petersburgo como profesor del Instituto Técnico Imperial en 1866.

La tercera sección del libro está dedicada a la figura de Georg Paul Alexander Petzholdt, natural de Dresden, capital del Reino de Sajonia, quien estudió Medicina en Leipzig. Sus primeras actividades académicas se dieron entre 1836 y 1846 en un laboratorio privado en el que ofrecía lecciones de química agrícola que fueron publicadas en forma de libro en 1844. En esa época estudió el efecto de la luz sobre los haluros de plata y publicó sus resultados unos meses antes de que Louis Daguerre presentara la invención del daguerrotipo

en la Academia Francesa, en 1839. Estudió también la electrodeposición de oro, plata y cobre, así como la composición de cenizas de diamantes.

El título de esta sección biográfica, «El naturalista Petzholdt», intenta abarcar con un sólo adjetivo el amplio abanico de actividades de este científico, en paleobotánica, geología, mineralogía, geografía y química. En realidad, el factor común de sus estudios era el conocimiento y aprovechamiento de los recursos naturales, lo que encajaba perfectamente con el proyecto de la nueva universidad de Tartú, cuya invitación aceptó, trasladándose a esa ciudad del Imperio Ruso en 1846. Entre sus trabajos de esa nueva etapa encontramos el análisis de esquistos bituminosos con vistas a su explotación como fuente de energía, estudios de silicificación de fósiles animales, de suelos negros ricos en humus, de turberas, o de la captación de nitrógeno por las plantas. En ese empeño realizó numerosas excursiones por territorio ruso, incluidos el Cáucaso y el Turquestán, pero también a Francia y Argelia, descritas en diversas publicaciones.

En resumen, este libro nos ofrece un zoom sobre la química del siglo XIX, desde una panorámica europea, España incluida, cerrando el plano sobre la encrucijada germano-ruso-escandinava de Tartú, para acabar enfocando en un plano corto a Alexander Petzholdt ferviente seguidor de Liebig y sus excursiones ruso-europeas analizando la naturaleza con una mirada química. La obra es densa en información y datos, permitiendo dos niveles de lectura: uno lineal, siguiendo el desarrollo temporal de la historia, y otro más reticular y entretenido, de comparar fechas, localizaciones geográficas, maestros y discípulos, obra escrita y docencia de pizarra y tiza. Para este segundo propósito resulta muy útil el completo índice onomástico que se incluye al final, así como el cuadro sinóptico al final de la primera sección que presenta a modo de conclusión una cronología comparada de la primera cátedra de química, el primer laboratorio universitario de química, y las fechas de fundación de la sociedad química y de la academia de ciencias de cada uno de los países europeos analizados en el estudio. La bibliografía es muy amplia y con recurso en muchos casos a páginas de Internet, incluso para libros que suelen ser difíciles de encontrar en papel, signo de los tiempos. Además, se agradece la buena edición y la abundancia de material gráfico que aporta información y contexto: retratos de los protagonistas, grabados de obras de la época con alguna ilustración de laboratorios, mapas, y portadas de libros destacados en el texto.

SANTIAGO ÁLVAREZ REVERTER  
Departament de Química Inorgànica i Orgànica,  
e Institut de Química Teòrica i Computacional,  
Universitat de Barcelona

## RADICALES (MUY) LIBRES



J. de Mendoza

Catedrático jubilado de Química Orgánica  
(Universidad Autónoma de Madrid)  
Profesor Emérito, Instituto Catalán  
de Investigación Química  
(ICIQ, Tarragona)  
E-mail: [jmendoza@iciq.es](mailto:jmendoza@iciq.es)

# De entropías y entalpías

Entre los químicos es frecuente oír que los países mediterráneos, y entre ellos obviamente el nuestro, están gobernados por la entropía, mientras que los países anglosajones o del norte de Europa, como Gran Bretaña, Alemania o Suecia lo están por la entalpía. No me gusta generalizar, pues son muy numerosas las excepciones individuales en uno u otro sentido, pero la estadística parece confirmar esa afirmación general. Este artículo va por tanto de termodinámica y, más concretamente, de la aplicación de la ecuación de Gibbs, que relaciona entalpía y entropía con la temperatura y la posibilidad de que una ecuación tenga lugar.

Como esa es una revista dirigida a los químicos, lo dicho debería de ser suficiente sin añadir nada más para comprender las diferencias entre alemanes y españoles o, puestos a generalizar, entre el norte y el sur. Pero con los años he descubierto con sorpresa que muchos colegas no recuerdan casi nada de lo que no pertenezca a su propia área de trabajo. Así, es frecuente que no se acuerden ya de la fórmula de la piridina o de la diferencia entre tautomería y resonancia, del mismo modo que a todos nos pasa con los conceptos de otros campos, que en su día nos parecieron esenciales, hasta que luego descubrimos que se podía hacer incluso buena química sin recordar cosas tan fundamentales. En descargo nuestro debo decir que, en caso de tener que refrescar ideas, sabemos al menos dónde buscar, lo cual no es siempre tan simple como parece. También debo añadir que mi columna la leen también regularmente algunos amigos míos que, aparte de demostrarme así lo buenos amigos que son, nada tienen que ver con la química, pero que aprecian mis frecuentes divagaciones y analogías locas entre nuestro mundo científico y los comportamientos sociales o políticos de nuestros ciudadanos.

Por eso voy a explicar, con la sencillez e inexactitud del profano, la ecuación de Gibbs (más propiamente denominada de Gibbs-Helmholtz) y cómo debe aplicarse. No se les ocurra buscar en su casa, en la Wikipedia o en los libros de sus hijos nada al respecto. Saldrían con la cabeza caliente de fórmulas y términos científicamente tan correctos como farragosos. Sigán mi razonada explicación para principiantes. En su versión más popular, la ecuación es  $\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$ , siendo  $\Delta G$  la llamada energía o entalpía libre, en otras palabras, lo que determina si una reacción puede tener lugar o no, con

independencia de si le va a costar mucho o poco hacerlo, es decir, si necesitará además energía de activación, que no voy a discutir, para no entrar en el terreno también complejo de la cinética. Como  $\Delta$  significa diferencia o diferencial, si  $\Delta G$  es negativo es que la reacción es favorable, puesto que se ha alcanzado un sistema (el producto de esa reacción) con menor contenido energético, o sea, más estable. Todo dependerá de los demás términos de la ecuación.  $\Delta H$  sería la entalpía (a secas, sin la palabra libre) o el calor liberado si resulta una diferencia negativa o absorbido si resultara positiva. Está claro que si la ecuación acabara aquí, la entalpía libre  $\Delta G$  coincidiría con la entalpía  $\Delta H$  y se podría predecir fácilmente que una reacción que liberara calor (exotérmica) sería siempre favorable mientras que una que absorbiera calor (endotérmica) no ocurriría. Pero aquí aparece el segundo término, el que contiene la pérdida o ganancia de entropía  $\Delta S$ . Cuando hablamos de entropía siempre obtenemos la sonrisa cómplice de los alumnos porque les estamos hablando simplemente de libertad, aunque nos refiramos a la libertad que tienen los átomos y las moléculas de salir de las ataduras que les imponen los enlaces químicos. Cuando una reacción implica que una molécula se rompe en dos o más, se gana entropía, mientras que si se juntan dos para formar una más grande, se les restringe su libertad traslacional y rotacional y se pierde entropía. ¿Cómo afecta eso a la entalpía libre final? Para saberlo hemos de decir algo de  $T$ , la temperatura, que viene expresada en Kelvin, no en grados centígrados, para que su valor sea siempre positivo (recordemos que el cero absoluto de la escala Kelvin equivale a  $-273,15^\circ \text{C}$ ). Así pues, el término  $T \cdot \Delta S$  podrá resultar positivo o negativo según lo sea  $\Delta S$ . Si el valor final es muy negativo (si se pierde entropía y además la temperatura es alta), ese término podrá llegar a contrarrestar el valor de  $\Delta H$ , ya que la ecuación es una resta (recordemos que menos por menos es igual a más) y llevarnos a un valor final de  $\Delta G$  positivo, desfavorable a que la reacción se produzca. En otras palabras, una reacción puede ser controlada por la entropía.

Conclusión general, los españoles, propensos a disipar y incrementar nuestra entropía, casi siempre acompañados de un valor de  $T$  muy favorable, dado nuestro envidiable clima, podemos llegar a hacer las cosas bien, pero que muy

bien, tanto como esos nórdicos que nos miran por encima del hombro. Cuando les cuento esas divagaciones sobre la ecuación de Gibbs aplicada a las sociedades a mis colegas del norte, ponen cara de asombro y se quedan pensativos un buen rato. Pero, atención, eso no justifica que seamos siempre tan desordenados y chapuceros, sobre todo en los aspectos preventivos. A veces parece que no nos importe lo que ocurra, mientras no nos afecte directamente a nosotros mismos. De jóvenes en Barcelona lo expresábamos con el nihilista término “manfutismo”, que procede del catalán “se m’ en fot”, versión popular que podríamos traducir como “me importa una higa”. Ahora ya no está de moda. Pero cuando ocurre uno de esos devastadores incendios que nos azotan cada verano con intensidad creciente, es ejemplar el comportamiento de los servicios públicos y de la población civil, volcados sin desmayo en resolver el problema hasta sus últimas fuerzas, incluso arriesgando la vida sin reparar en la precariedad de medios con los que los políticos, teóricos gestores del bien común, les han dotado, tan ocupados ellos en sus disputas partidistas y dedicados intensamente en esos trágicos momentos a pasar la responsabilidad a otros políticos o administraciones, para quitarse de encima la suya propia. Sorprendentemente, a pesar de que la estadística nos dice que la mayoría de incendios son provocados, se detiene a muy pocos pirómanos, no todos enfermos mentales, ni sabemos casi nunca quienes son ni vemos largas tertulias en televisión sobre las razones y los intereses ocultos que hacen que la gente quemé el monte. Y, sobre los descuidos culposos, causas también muy frecuentes de incendios forestales podríamos preguntarnos ¿por qué se permite fumar en los coches? Muchos accidentes de circulación se producen al caer una colilla sobre la ropa de quien conduce y muchos incendios nacen por tirarla por la ventanilla en vez de apagarla en el cenicero del coche, evitando así el mal olor. Y a menudo con los niños detrás, condenados a respirar ese humo tóxico durante largos viajes. Lo digo por experiencia, y me arrepiento aquí y pido disculpas públicamente por haber obrado así de joven, en mis tiempos de gran fumador. Otra medida preventiva necesaria, aparte de la limpieza y vigilancia, sería el prohibir taxativamente entrar en los bosques en situaciones de alarma. Y siempre con una normativa general para todo el país, no con 17 normativas autonómicas, a menudo contradictorias. Pero no se hace nada, sólo promesas vagas y siempre incumplidas cuando pasa el peligro.

En época de incendios deberíamos estar hablando de inundaciones, y viceversa, en invierno discutiendo sobre el estado de nuestros bosques. Ahora mismo, con el Mediterráneo a 30°C, sabemos con certidumbre que vamos a tener un otoño duro lleno de “danas” que inundarán nuestros pueblos y ciudades, arrasando nuestros cultivos, y de temporales que destruirán nuestras costas. Ya dediqué una columna hace tiempo a las inundaciones (*La forma del agua An. Quím.*

2019, 115, 364-365). Ahora quiero denunciar que los mojones que delimitan nuestras lindes costero-marítimas se establecen en función de dónde han llegado los temporales más intensos que se recuerden en el lugar, pero nadie se ocupa de que se actualicen cada vez que un nuevo temporal establece un nuevo record, lo que desgraciadamente ocurre cada año por efecto del cambio climático. Claro, si se cambiaran los mojones con regularidad quedarían fuera de la legalidad miles de viviendas y la casi totalidad de los paseos marítimos, algo que ningún político se atreverá jamás a ordenar, prefiriendo gastar cientos de millones en reconstruir una y otra vez los daños producidos.

Un último comentario sobre medidas de ahorro energético, que parece que por fin empiezan a hacer mella entre nuestros dirigentes y poco a poco van calando en la ciudadanía. Bienvenidas sean, aunque parezcan improvisadas e insuficientes, favoreciendo con ello la crítica de quienes están en contra. Si hay sequía, es obvio que hay que ahorrar agua. ¿A qué vienen entonces esas llamadas “fiestas del agua”, que proliferan por nuestros pueblos, y que consisten en regar con mangueras a la alegre muchedumbre que se acumula en las plazas? No me vale que digan hipócritamente que en algunos sitios han puesto cubos en vez de mangueras. Luego, cuando vengan los inevitables cortes de suministro, que ya van llegando, todos protestarán. Si nuestros dirigentes no dan ejemplo, diciendo la verdad con datos y sin tapujos, pocos responderán arrojando el hombro. Si un conocido y popular alcalde, muy afín además a un gobierno que pretende convencernos de que ahorremos, sigue empeñado en rivalizar con Nueva York en iluminaciones navideñas, y es incapaz de dar ejemplo, alegando como excusa que esas luces atraen turismo y riqueza y que se usan lámparas de bajo consumo (argumentos propios de quienes se oponen al ahorro energético), no podremos avanzar. Cuando oigo a la ministra del ramo decir que debemos pensar un momento antes de abrir la nevera para no tener la puerta abierta demasiado tiempo siento bastante vergüenza. ¿Qué será lo siguiente? ¿Deberemos también apagar la tele cuando vayamos al lavabo o durante los cortes publicitarios? Y todo eso mientras nuestros dirigentes alardean impudicamente de despilfarro en nombramientos y gastos suntuarios de los que se niegan a informar y que ni siquiera justifican. Está muy bien que defendamos nuestra componente entrópica de la vida, la fiesta también es importante, y somos así bastante felices, pero eso no impide que respetemos también la entalpía. Ambas son necesarias y se compensan mutuamente. Lo dicen los libros.

JAVIER DE MENDOZA

Catedrático jubilado de Química Orgánica  
(Universidad Autónoma de Madrid)

Profesor Emérito, Instituto Catalán de Investigación Química  
(ICIQ, Tarragona)

# SYNTHESIS MADE SYNPLE

## Automated Chemical Synthesis Platform

Accelerate your discovery with Synple 2: a fully automated organic chemical synthesizer that uses pre-filled reagent cartridges to generate, isolate, and purify your research products for you – at the press of a button – in minutes. Say goodbye to hours of manual synthesis. See how Synple can keep your work flowing.



Performs a range of optimized reactions **at the press of a button**



**70% savings** through lower personnel and reagent costs



Fully enclosed reagents, thus **no risk of chemical exposure**



Runs completely independently after **5-minute setup**



Pre-filled reagent and solvent cartridges **minimize waste by 90%**



Requires **no special training** or detailed chemistry knowledge



Experience the future of synthesis:

[www.SigmaAldrich.com/Synple](http://www.SigmaAldrich.com/Synple)

© 2021 Merck KGaA, Darmstadt, Germany and/or its affiliates. All Rights Reserved. Merck, the vibrant M and Sigma- Aldrich are trademarks of Merck KGaA, Darmstadt, Germany or its affiliates. All other trademarks are the property of their respective owners. Detailed information on trademarks is available via publicly accessible resources.

Lit. No. MK\_AD8633EN Ver. 1.0 10/2021

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the U.S. and Canada.

**Sigma-Aldrich**<sup>®</sup>  
Lab & Production Materials