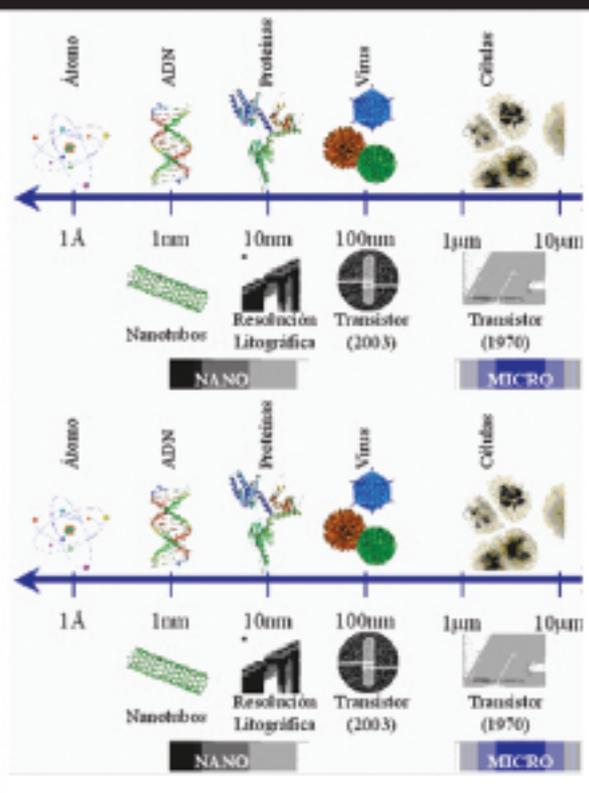


Ciencia e Investigación CeI

ASOCIACION ARGENTINA PARA EL PROGRESO DE LAS CIENCIAS

Primera revista argentina de información científica. Fundada en enero de 1945.



pág. **3**

**El año Internacional
de la Química**

pág. **7**

**Comportamiento
de los Metales
en agua**

pág. **29**

**La Química
del Futuro**

pág. **77**

**Los desafíos
de la Química
Analítica**

pág. **81**

**De Aristóteles
a Noether**

pág. **93**

**Anuncios
y Notas de
Interés**

EDITOR RESPONSABLE

Asociación Argentina para el Progreso de las Ciencias (AAPC)

COMITÉ EDITORIAL

Directores

Dr. Alberto Baldi

Dr. Miguel A. Blesa

Dr. Marcelo Vemengo

Editores Asociados

Dr. Guillermo Juvenal

Dr. Claudio Párica

Dra. Alicia L. Sarce

Dra. María X. Senatore

Dr. Ángel M. Stoka

Dra. Marta Toscano

Dr. Norberto Zwirner

Dr. Juan R. de Xammar Oro

CIENCIA E INVESTIGACIÓN

Primera Revista Argentina de información científica.

Fundada en enero de 1945

Es el órgano oficial de difusión de la Asociación Argentina para el Progreso de las Ciencias.

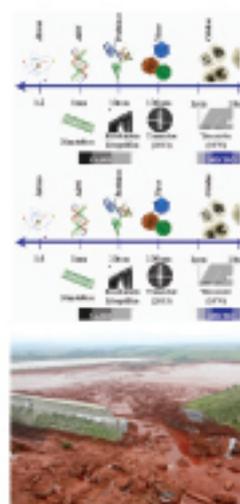
Av. Alvear 1711, 4° piso,
(C1014AAE) Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina.
Teléfono: (+54) (11) 4811-2998
Registro Nacional de la Propiedad Intelectual

N° 82.657.ISSN-0009-6733

Lo expresado por los autores o anunciantes, en los artículos o en los avisos publicados, es de exclusiva responsabilidad de los mismos.

Ciencia e Investigación se edita on line en la página web de la Asociación Argentina para el Progreso de las Ciencias (AAPC)
www.aargentinapciencias.org

Nuestra Portada: Dos caras de la Química actual: la nanoquímica, y los accidentes ambientales (derrame de lodo alcalino de una planta Bayer en Ajka, Hungría)



En esta edición

EDITORIAL

El año internacional de la Química

Vicente A. Macagno

3

ARTÍCULOS

Comportamiento químico de los metales en aguas naturales

Daniel Cicerone

7

La química del futuro

Miguel A. Blesa y José A. Olabe

29

Los desafíos de la Química Analítica

Alejandro Olivieri

77

De Aristóteles a Noether: Una historia sobre a construcción de los conceptos de la Mecánica

Jorge N. Cornejo

81

Anuncios y Notas de Interés

93

... La revista aspira a ser un vínculo de unión entre los trabajadores científicos que cultivan disciplinas diversas y órgano de expresión de todos aquellos que sientan la inquietud del progreso científico y de su aplicación para el bien.

Bernardo A. Houssay

Editorial

La Química Argentina en el Año Internacional de la Química

Vicente A. Macagno

macagno@fcq.unc.edu.ar

Por iniciativa de IUPAC y de UNESCO, la Asamblea General de las Naciones Unidas designó al año 2011 como Año Internacional de la Química (IYC) bajo el lema "Química; nuestra vida, nuestro futuro". IYC 2011 celebra mundialmente los logros de la Química y sus contribuciones al bienestar del género humano. Los propósitos son incrementar el aprecio público por la química, estimular el interés entre los jóvenes y generar entusiasmo para un futuro más creativo. Los doce meses de celebración se dividen en cuartos temáticos con un tema central: "Agua y ambiente"; "Energías Alternativas"; "Materiales, focalizado en nanomateriales y reciclados" y "Salud".

IYC 2011 coincide con el 100º aniversario de la fundación de la "International Association of Chemical Societies" y, también, con el 100º aniversario del Premio Nobel otorgado a Marie Curie, una oportunidad para celebrar las contribuciones de la mujer a la ciencia. Cabe recordar que Mme. Curie obtuvo el Premio Nobel en dos oportunidades. En 1903 junto a H. Becquerel y P. Curie - su esposo -, el premio en Física y en 1911, esta vez en Química, en reconocimiento a su trabajo sobre radiactividad.

Los actos del IYC 2011 hacen énfasis en la Química como una disciplina creativa esencial para la sustentabilidad y el mejoramiento del modo de vida. La Química comprende desafíos globales sobre aire limpio, agua segura, productos eco-amigables, comida sana, medicina responsable, materiales avanzados, energía sustentable, entre otros.

La ocasión es propicia para presentar la situación de la Química en nuestro país. En el artículo "La Química del Futuro", por J. A. Olabe y M. A. Blesa, los autores ubican a la Química en el contexto actual de las Ciencias Exactas y Naturales. Un conocido texto básico de enseñanza universitaria "Química, la ciencia central" indica que la Química es fundamental para comprender muchísimos aspectos

de lo que sucede diariamente en nuestro mundo y que es una ciencia vital en constante desarrollo. Esas características de la Química de validez universal también se presentan, nitidamente, en nuestro medio. Aunque la tarea no es sencilla, dada la enorme complejidad de los ítems que abarca, se tratará aquí de brindar un panorama cuali-cuantitativo de lo que representa actualmente la Química en el contexto nacional argentino. Para este propósito, se toma el criterio, en primer lugar, de referenciar solo a la Química no-biológica (La Química Biológica constituye, de por sí, una subdisciplina suficientemente importante como para merecer un capítulo separado), considerando las subdisciplinas Química Inorgánica; Química Orgánica; Química Analítica y Físicoquímica. En segundo lugar, se toma la perspectiva, probablemente algo sesgada, desde el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, CONICET. Este organismo, creado en 1958 por impulso del Dr. Bernardo Houssay, tiene por misión promover, coordinar y ejecutar investigaciones en el campo de las ciencias puras y aplicadas. Funciona como ente autárquico del Estado nacional y sus funciones se rigen por el Decreto 1661/96. Como organización académica, el CONICET se divide en cuatro Grandes Áreas, una de las cuales, Ciencias Exactas y Naturales (no Biológicas) comprende cinco disciplinas, una de ellas, Química. Esta disciplina es una de las de mayor desarrollo y nivel internacional de CONICET. Sobre un total de 14.156 agentes a julio de 2011, entre becarios (doctorales y pos-doctorales) e investigadores (en las cinco clases), a la disciplina Química le corresponden 845 miembros, esto es, aproximadamente, el 6% del total. Referidos a las Ciencias Exactas y Naturales, sobre un total de 1708 investigadores, hay químicos (ver detalles en los gráficos del trabajo de Olabe y Blesa).

Del total registrado, 405 son investigadores que se distribuyen entre Asistentes, Adjuntos, Independientes, Principales y Superiores, en una pirámide razonablemente bien estructurada, salvo por la situación derivada de la falta de ingresos a la Carrera en la década de los '90. Esta distorsión está en vías de solución por la política actual de CONICET. Los investigadores desarrollan su actividad, en su mayoría, en Unidades Ejecutoras (unas diez en la disciplina) y en Universidades Nacionales, distribuidos en el país.

El resto de la población lo constituyen los becarios, a saber, 440 (338 doctorales; 102 posdoctorales). En este ítem la Química como disciplina exhibe, por parte de Comisión Asesora correspondiente, un alto grado de recomendación positiva y la limitante numérica está regida más por el escaso número de egresados universitarios, hecho común con las otras disciplinas de Ciencias Exactas y Naturales. Realmente estas disciplinas de la Gran Área de Ciencias Exactas y Naturales están en una situación de sustentabilidad restringida por el escaso número de personas (becarios, investigadores asistentes) que forman la base de la pirámide poblacional.

Una vez finalizado el ciclo como becario, muchos hacen su presentación para el ingreso a la Carrera del Investigador (CIC). En esta evaluación Química es una de las disciplinas más exigentes en cuanto a los requerimientos para la recomendación al ingreso; en los últimos años el porcentaje de candidatos recomendados es de un 60 %, en promedio, del total de presentados. Esta política redundante en un nivel de excelencia de los miembros de la CIC medido en base a parámetros tales como calidad y cantidad de publicaciones, formación de recursos humanos, transferencia al medio, etc. que los ubica en niveles cercanos al de los países desarrollados. El Programa de becas de CONICET es uno de los más exitosos de la institución y constituye una fortaleza del sistema de C y T del país. Permite que se doctoren entre 900 y 1000 becarios cada año; este resultado produce un efecto derrame que beneficia a la ciencia del país en, prácticamente, todas las disciplinas, no solo en Química. Se facilita así la generación de una pléyade de jóvenes doctores capacitados para su integración en los más diversos sectores como universidades, organismos del estado, empresas y el mismo CONICET.

Como fuente de financiación, CONICET, otorga subsidios para gastos de funcionamiento y para proyectos de grupos de trabajo (PIPs). Actualmente, se financian 137 proyectos trianuales en la disciplina Química de un total de 2100.

Con todo, es deseable mejorar en diversos aspectos para lo que se requiere de acciones orientadas y sostenidas a largo plazo. La política actual de CONICET sobre ingresos y promociones en la CIC está impulsando con firmeza este tipo de acciones. Es necesario en un futuro cercano, entre otras disposi-

ciones, una mejor distribución geográfica de Unidades Ejecutoras para no seguir poblando las ya densas distribuciones en los Centros de las grandes ciudades. Se debe optimizar, también, la creación de Unidades Ejecutoras en cuanto a las temáticas, considerando que cada vez más la frontera entre disciplinas se torna más difusa lo que conducirá a la necesaria existencia de áreas interdisciplinarias.

Datos actualizados a Julio de 2010

Asociación Argentina para el Progreso de las Ciencias

Colegiado Directivo

Presidente

Dr. Miguel Ángel Blesa

Vicepresidente

Ing. Arturo J. Martínez

Secretaría

Dra. Alicia Sarce

Tesorero

Dr. Horacio H. Camacho

Protesorero

Dr. Carlos Alberto Rinaldi

Presidente Anterior

Dra. Nidia Basso

Presidente Honorario

Dr. Horacio H. Camacho

Miembros Titulares

Ing. Juan Carlos Almagro

Dr. Alberto Baldi

Dr. Máximo Barón

Dr. Eduardo H. Charreau

Dra. Dora Alicia Gutiérrez

Ing. Oscar Mazzantini

Dr. Raúl Racana

Dr. Marcelo Vemengo

Dr. Juan R. de Xammar Oro

Miembros Institucionales

Sociedad Argentina de Cardiología

Sociedad Argentina de Farmacología Experimental

Sociedad Argentina de Investigación Bioquímica

Sociedad Argentina de Investigación Clínica

Unión Matemática Argentina

Sociedad Argentina de Hipertensión Arterial

Miembros Fundadores

Dr. Bernardo A. Houssay

Dr. Juan Bacigalupo

Ing. Enrique Butty

Dr. Horacio Damianovich

Dr. Venancio Deulofeu

Dr. Pedro L. Elizalde

Ing. Lorenzo R. Parodi

Sr. Carlos A. Silva

Dr. Alfredo Sordelli

Dr. Juan C. Vignaux

Dr. Adolfo T. Williams

Dr. Enrique V. Zappi

AAPC

Avenida Alvear 1711-4º Piso

(C1014AAE) Ciudad Autónoma de Buenos Aires-
Argentina

www.aargentinapciencias.org

Comportamiento Químico de los metales en aguas naturales

Daniel S. Cicerone
Gerencia Química, Comisión Nacional de Energía Atómica,
Instituto de Investigación e Ingeniería Ambiental, UNSAM
cicerone@cnea.gov.ar

La Química Ambiental se está transformando en una herramienta imprescindible para enfrentar los problemas que plantea la agresión del hombre a nuestro ambiente. En ese contexto, este artículo describe el comportamiento de los metales presentes en cuerpos de agua, centrandose su atención en las transformaciones químicas que pueden sufrir los mismos, y de qué forma esas transformaciones afectan su movilidad y los efectos ecotoxicológicos debidos a la contaminación metálica (ver ilustración contigua)



El río Oki Tedi, que arrastra sedimentos contaminados por metales provenientes de una explotación minera, en Papúa Nueva Guinea

1. Naturaleza química de los metales

La calidad de aguas superficiales se ve afectada, entre otros factores, por la presencia de contaminantes metálicos. Este grupo tiene características fisicoquímicas particulares, diferentes a las de los nutrientes y contaminantes orgánicos, de las cuales depende su movilidad y toxicidad en el ambiente. Se presentan a continuación las principales características de los mismos, poniéndose especial énfasis en los metales Pb, Hg, Cr, Cd, Cu y el metaloide As. Estos elementos son relevantes para determinar la calidad de aguas superficiales, y por ese motivo están incluidos en la determinación del Índice de Calidad de Agua recientemente consensuado para la región de Latinoamérica y del Caribe, en el marco de un Proyecto ARCAL.1 Los metales forman parte de los compuestos inorgánicos presentes en agua. Según su concentración, son elementos mayoritarios, o bien caen dentro de la categoría de elementos traza. Sus sales disueltas en agua pueden formar cationes o dar origen a óxidos básicos. Los más conocidos, por el potencial impacto a la salud y la biota, son los metales pesados. En los cuerpos de agua, los metales pueden moverse y transformarse, pero, a diferencia de los contaminantes orgánicos, no pueden ser destruidos.2

La definición de los metales que componen este grupo es arbitraria e imprecisa.2 Suele utilizarse la expresión "metales pesados" para hacer refe-

rencia al grupo de elementos entre cobre (Cu) y plomo (Pb), con masas atómicas entre 63 y 207 y densidad mayor que 4,0; se suele incluir también a metales de menor número atómico, como Ni, Co y hasta Cr, Fe y Mn. La expresión "metales pesados" también puede hacer referencia a ciertas propiedades químicas y a la toxicidad de los mismos.2 Es común suponer que los metales y compuestos que los contienen son tóxicos o ecotóxicos, hecho que no tiene sustento químico ni toxicológico. Muy por el contrario, distintos organismos, incluidos los seres humanos, requieren de metales (Co, Cu, Mn, Mo, V, Sr y Zn) en cantidades pequeñas (a nivel de trazas).

También es cierto que altas concentraciones de los mismos pueden perjudicar a los organismos. Por el contrario, otros metales como Hg, Pb y Cd no parecen tener un efecto benéfico sobre la biota, generando su bioacumulación un riesgo para la salud.3

Según su comportamiento en medios acuosos se puede definir una clasificación más adecuada de los metales, relacionada con los procesos abióticos y biológicos relevantes. Esta clasificación debe describir su forma química en el ambiente (especiación química), biodisponibilidad, rol funcional y toxicidad. La Figura 1 presenta una clasificación de los metales basada en la naturaleza de la última subcapa electrónica (parcialmente ocupada) del átomo.

1											18									
H											He									
2											19	20	21	22	23	24	25	26	27	28
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne			
3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18					
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar			
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36			
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr			
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54			
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe			
55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72			
Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn			
87	88	#	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	110	bloque f										
* lantánidos		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu				
# actínidos		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr				

Figura 1. Tabla Periódica de los elementos químicos basada en la clasificación de los mismos según la última subcapa de electrones del átomo a ser ocupada

La estructura electrónica tiene consecuencias en cuanto a su comportamiento ambiental:

Bloque s. Comprende a los iones de los metales alcalinos y alcalino-térreos. Son muy móviles; forman complejos débiles, actuando como electrolitos del seno de una solución (por ejemplo, Na y K). Los alcalino-térreos forman complejos más estables y carbonatos insolubles.

A nivel biológico tienen funciones más especializadas; actúan como promotores estructurales y activadores de enzimas. Ninguno tiene una química redox significativa para los sistemas vivos.

Bloque p. Pertenecen al grupo de los metales algunos de los elementos más pesados de este bloque. Presentan una química redox limitada. Forman complejos más estables que los del bloque s. Los metales de números atómicos más elevados del grupo se enlazan fuertemente con el sulfuro, siendo esa su principal causa de toxicidad.

Bloque d. Los metales de este grupo presentan un comportamiento redox y de formación de complejos dispar. Tienen rol catalítico en la acción enzimática.

Bloque f. Sus propiedades son similares a las del bloque d. Normalmente no son importantes para la actividad biológica, pero sí pueden constituir un riesgo para la salud y la biota.

Otra clasificación posible de los metales se basa en la acidez de Lewis de sus iones, que determina las interacciones de los mismos en los fluidos biológicos. Los metales se clasifican en Clase A, B e Intermedios (borderline) acorde con su afinidad

por distintos ligandos.

La Figura 2 muestra esta clasificación de los metales en la tabla periódica; mientras que la Tabla 1 muestra las principales características de los mismos.

Figura 2 muestra una tabla periódica de los elementos químicos. Los metales están clasificados en tres categorías basadas en su color de fondo: Clase A (gris oscuro), Clase B (gris claro) y Borderline (gris intermedio). Las flechas indican la transición de Clase A a Clase B y de Clase B a Borderline. Los elementos de la tabla periódica son: H, He, Li, Be, Na, Mg, K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe, Cs, Ba, La, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Ra, Fr, Ra, Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr. Los elementos de la tabla de abajo son: * lantánidos (La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu) y # actínidos (Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr).

Figura 2. Tabla periódica de los elementos químicos mostrando la clasificación de los mismos según: Clase A, metales duros (gris oscuro); Clase B, metales blandos (gris claro); Borderline, metales intermedios (gris intermedio). El Cu puede ser Clase B o Borderline según sea Cu(I) o Cu(II); el Pb puede ser Clase B o Borderline según sea Pb(II) o Pb(IV); el Fe puede ser Clase A o Borderline según sea Fe(III) o Fe(II) respectivamente

Metales Clase A (Duros)	Ácidos de Lewis (aceptores de electrones) de pequeño tamaño y baja polarizabilidad (dureza). Uniones iónicas	Li, Be, Na, Mg, Al, K, Ca, Sc, Ti, Fe(III), Rb, Sr, Y, Zr, Cs, Ba, La, Hf, Fr, Ra, Ac, Th.
Metales Clase B (Suave)	Ácidos de Lewis (aceptores de electrones) de gran tamaño y alta polarizabilidad (suave). Uniones más covalentes	Cu(I), Pd, Ag, Cd, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb(II).
Metales "Borderline" (intermedios)		V, Cr, Mn, Fe(II), Co, Ni, Cu(II), Zn, Rh, Pb(IV), Sn.

Tabla 1. Clasificación de los metales según el comportamiento ácido de Lewis de sus iones

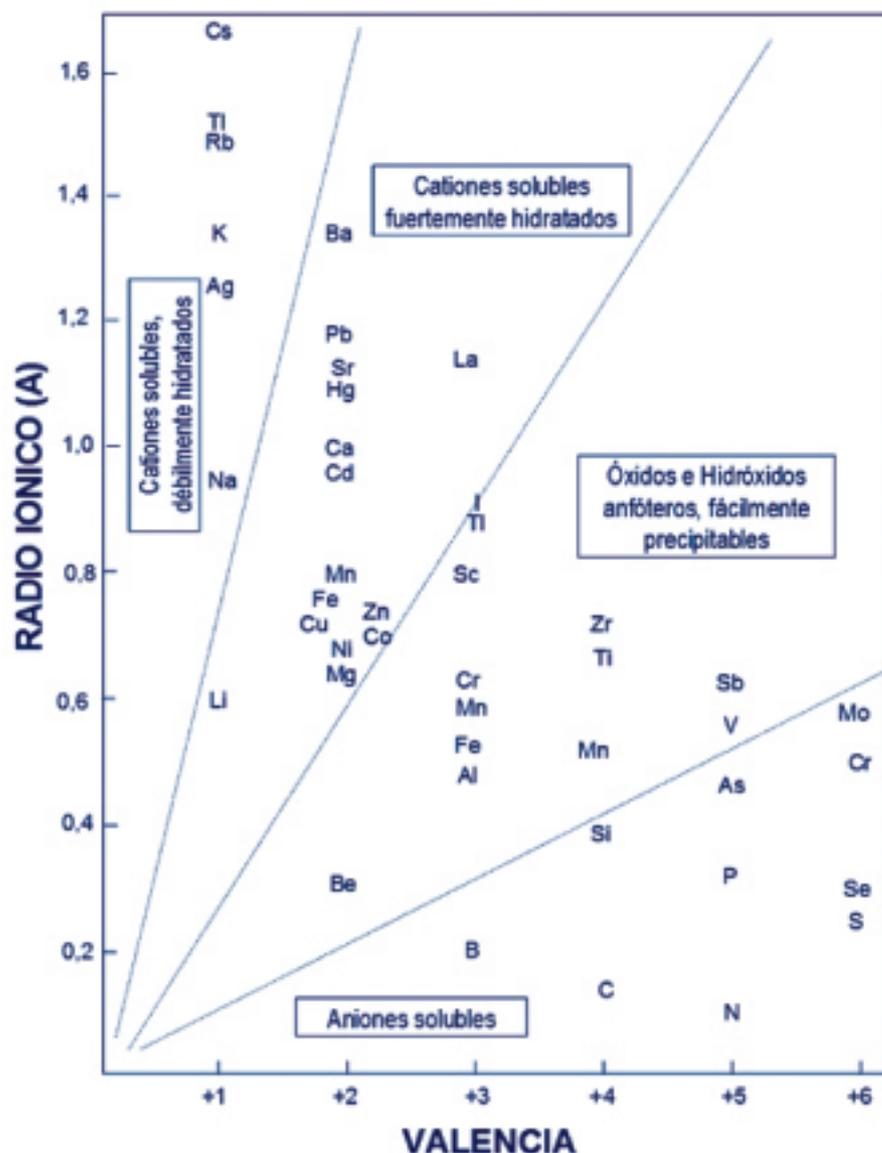


Figura 3. Clasificación de los metales según su relación carga/radio. Aparecen aquí algunos halógenos, metaloides y no metales como I, B, As, Sb y S, C, P y N por su relevancia en sistemas ambientales

Por último, los iones metales pueden también clasificarse teniendo en cuenta su relación carga/radio (Figura 3). Según esta clasificación, encontramos cuatro grupos de metales: cationes solubles y débilmente hidratados, cationes solubles y fuertemente hidratados, fácilmente precipitables y aniones solubles.

2. Especiación Química de los metales en sistemas acuosos naturales

A. Hidrólisis

Como ya se ha visto en la sección anterior, dependiendo de su relación carga/radio, los metales se hidrolizan en diverso grado. Se pueden originar así cationes solubles y aniones solubles, como se

presenta en las ecuaciones 1 y 2.



Baes y Mesmer² han compilado y reseñado la información disponible sobre las especies presentes en soluciones acuosas y su estabilidad (constantes de formación).

Hoy en día, esta información forma parte de las bases de datos termodinámicos utilizados por los programas de especiación química del tipo del MINTQA2,⁴ MINEQL^{4,6,5} y otros, recomendados por distintas agencias ambientales.

$Pb^{2+} + H_2O = Pb(OH)^+ + H^+$	-7,597
$3Pb^{2+} + 4H_2O = Pb_3(OH)_4^{2+} + 4H^+$	-23,888
$4Pb^{2+} + 4H_2O = Pb_4(OH)_4^{4+} + 4H^+$	-19,988
$Pb^{2+} + 2H_2O = Pb(OH)_2 + 2H^+$	-17,094
$Pb^{2+} + 3H_2O = Pb(OH)_3^+ + 3H^+$	-28,091
$Pb^{2+} + 4H_2O = Pb(OH)_4^{2-} + 4H^+$	-39,699
$Hg^{2+} + H_2O = Hg(OH)^+ + H^+$	-3,397
$Hg^{2+} + 2H_2O = Hg(OH)_2 + 2H^+$	-6,194
$Hg^{2+} + 3H_2O = Hg(OH)_3^+ + 3H^+$	-21,091
$Cd^{2+} + H_2O = Cd(OH)^+ + H^+$	-10,097
$Cd^{2+} + 2H_2O = Cd(OH)_2 + 2H^+$	-20,294
$Cd^{2+} + 3H_2O = Cd(OH)_3^+ + 3H^+$	-32,505
$Cd^{2+} + 4H_2O = Cd(OH)_4^{2-} + 4H^+$	-47,288
$2Cd^{2+} + H_2O = Cd_2(OH)^{3+} + 3H^+$	-9,397
$Cr_2O_7^{2-} + H_2O = CrO_4^{2-} + 2H^+$	-14,560
$CrO_4^{2-} + H^+ = HCrO_4^-$	6,510
$HCrO_4^- + H^+ = H_2CrO_4$	6,419
$Cu^{2+} + H_2O = Cu(OH)^+ + H^+$	-7,497
$Cu^{2+} + 2H_2O = Cu(OH)_2 + 2H^+$	-16,194
$Cu^{2+} + 3H_2O = Cu(OH)_3^+ + 3H^+$	-26,879
$Cu^{2+} + 4H_2O = Cu(OH)_4^{2-} + 4H^+$	-39,980
$AsO_4^{3-} + H_2O = HAsO_4^{2-} + OH^-$	-2,500
$AsO_4^{3-} + 2H_2O = H_2AsO_4^- + 2OH^-$	-9,540
$AsO_4^{3-} + 3H_2O = H_3AsO_4 + 3OH^-$	-21,300

Tabla 2. Constantes de hidrólisis de los metales considerados en este trabajo

La Tabla 2 presenta las constantes de formación correspondientes a las hidrólisis de los metales Pb(II), Hg(II), Cd(II), Cr(VI), Cu(II) y el metaloide As(V).

A partir de las constantes de hidrólisis aquí pre-

sentadas se puede evaluar la especiación química de los metales disueltos en agua, a distintos valores de pH, tal cual se presenta en las Figuras 4a-d. Las mismas han sido confeccionadas a partir de cálculos efectuados con el programa de cálculo

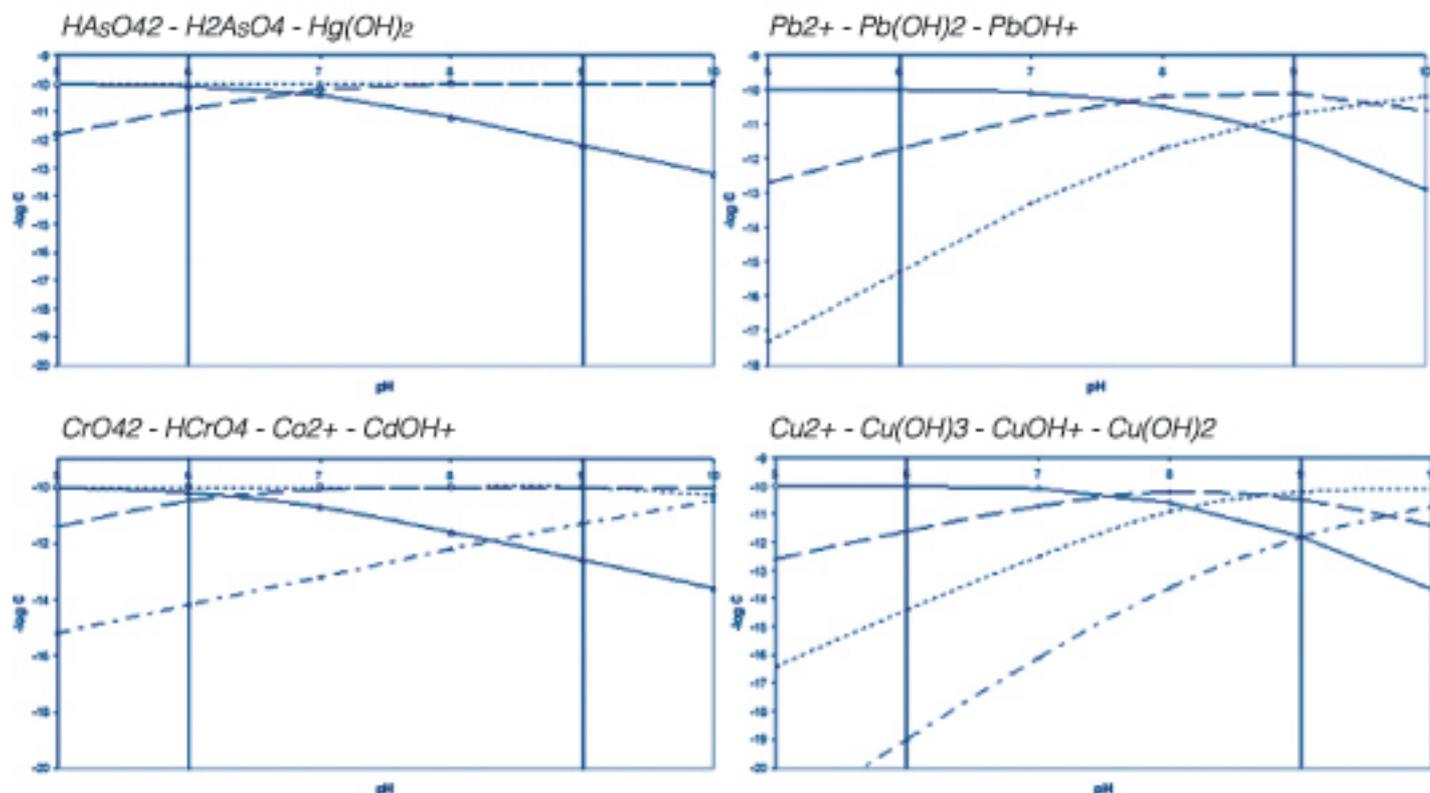


Figura 4. Hidrólisis de metales en función del pH de la solución acuosa: a) As(V) y Hg(II); b) Pb(II); c) Cr(VI) y Cd(II); d) Cu(II). Fuerza iónica igual a $0,01 \text{ mol dm}^{-3}$ y 25°C de temperatura. Se ha marcado el ámbito de pH de aguas naturales ($6 < \text{pH} < 9$). Concentración Inicial del Metal o Metaloide 10^{-10} M

MINEQL 4.6 de soluciones muy diluidas a fin de evitar la formación de precipitados.

El $Hg(OH)_2$ es la especie en solución más estable del Hg(II) en el ámbito de pH de aguas naturales (Figura 4a). Tanto el As(V) como el Cr(VI) se estabilizan como oxoaniones: el primero a partir de los arseniatos monoácido y diácido, predominando el primero a pH mayores que 6,8; el segundo a partir del cromato y cromato monoácido, con predominio del primero a partir de pH 6,3 (Figuras 4a y c).

Las especies predominantes de Pb(II), Cd(II) y Cu(II) son cationes (Figura 4b, c y d). A medida que aumenta el pH se hacen más representativas las especies hidroxiladas, siendo este aspecto más notable para el plomo y para el cobre, en el ámbito de pH de aguas naturales.

Es así que el Cd^{2+} es la principal especie del Cd(II); Pb^{2+} predomina hasta pH 7,8 para luego

transformarse en $Pb(OH)^+$; por último el Cu(II) tiene como principal especie al Cu^{2+} hasta pH 7,5, $CuOH^+$ predomina entre pH 7,5 y 8,8, y $Cu(OH)_2$ predomina a pH más altos.

B. Sorción. Interacción de aniones y cationes con material particulado suspendido en agua y sedimentos.

i. Capacidad de intercambio catiónico (CIC)

Se define a CIC como la cantidad de cationes (expresados en moles de carga positiva) que puede adsorber reversiblemente un mineral constitutivo del material particulado suspendido y/o sedimento por unidad de masa. Por ejemplo para la reacción de intercambio.



$$K_i = \frac{\{a(Mg^{2+}) M_{Ca}\}}{\{a(Ca^{2+}) M_{Mg}\}} \quad (4)$$

En estas ecuaciones K_i es la constante de intercambio; $>Mg^{2+}$ y $>Ca^{2+}$ representan a los iones Mg y Ca sobre la superficie del sólido; y M es la fracción molar de los mismos adsorbidos en el intercambiador. La interacción es de tipo electrostática y depende de la carga de la superficie del mineral y de la carga y tamaño del ión intercambiador.^{6,7} La carga de la superficie del mineral puede originarse en desbalances de carga en el seno del sólido (como en el caso de las arcillas), adsorción disociativa de agua (como en el caso de los óxidos) y disolución diferencial de los iones constitutivos de la red cristalina

(para sales poco solubles).⁸ A su vez, tanto la carga superficial como la del ion intercambiador dependen del pH. En sedimentos y material particulado suspendido, las arcillas con carga permanente (estructural) presentan, en general, cargas superficiales negativas, favoreciendo el intercambio de metales catiónicos. Las arcillas sin carga estructural, óxidos y sales poco solubles pueden dar lugar al intercambio tanto catiónico como aniónico ya que sus superficies pueden tener tanto carga neta negativa como positiva, dependiendo de su valor de punto de carga cero (pH_{pzc}).⁹ Cuando pH

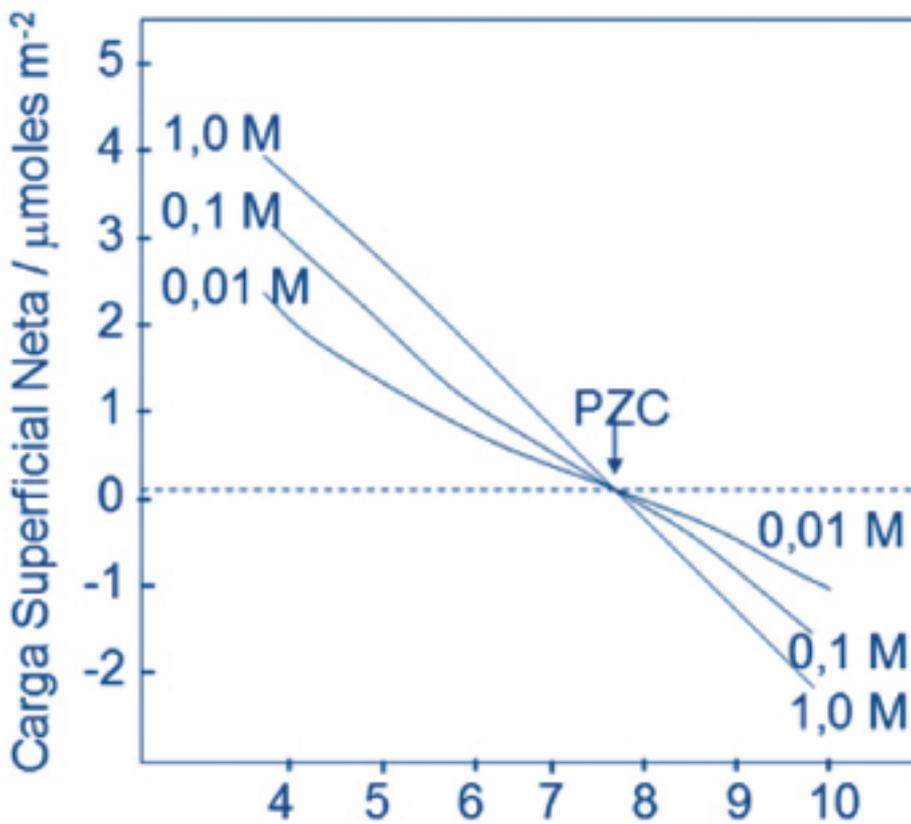


Figura 5. Carga superficial de goethita ($FeOOH$) en soluciones 1,0, 0,1 y 0,01 M NaCl, estimada a partir de la diferencia del consumo de H^+ y OH^- por el óxido durante una titulación ácido-base. PZC, punto de carga cero, es el pH al cual la carga superficial negativa iguala a la positiva. Adaptado referencia 6



$> pH_{pzc}$ se favorece el intercambio catiónico de los metales y a $pH < pH_{pzc}$ se favorece el de los aniones (Figura 5).

ii. Quimisorción

La interacción química entre un adsorbato metálico (con orbitales d disponibles) y el adsorbente implica la formación de complejos superficiales con grupos aniónicos superficiales. Se distingue del intercambio iónico por la naturaleza del enlace que es química, covalente, siendo por ello más selectivo y menos re-

versible que el primero. Los aluminosilicatos no-cristalinos, óxidos e hidróxidos de Fe, Al y Mn, tienen sitios superficiales similares de quimisorción de metales pesados y de transición: cationes metálicos (normalmente Fe^{3+} , Al^{3+} o Mn^{3+} , Mn^{4+}) que completan su esfera de coordinación coordinando grupos OH o moléculas H_2O . Los iones metálicos disueltos se unen formando uniones por puentes oxo: K_c es la constante de complejación y $>Fe$ representa un ión metálico hierro superficial.

La complejación superficial de cationes metálicos se caracteriza por:

- La liberación de aproximadamente nH^+ por cada Me^{n+} adsorbido (disminuye el pH del sistema).
- El alto grado de especificidad hacia ciertos metales.
- La formación en muchos casos de complejos superficiales altamente estable (altos valores de K_c).
- No hay una exacta igualdad entre la carga protónica liberada y la carga catiónica adsorbida, y frecuentemente se observa un cambio en la den-

sidad de carga superficial del adsorbente hacia valores más positivos.

La Figura 6 muestra la concentración de los metales Cu(II) y Zn(II) removida por adsorción (formación de complejos superficiales) sobre un óxido de Fe(III) como la goethita en función del pH de la solución. Puede observarse claramente que aumenta la concentración de metal sorbido a medida que aumenta el pH de la solución, tal como predice la ecuación 5. La mayor afinidad del Cu por la superficie que el Zn se manifiesta en su mayor

Adsorción de Cu y Zn sobre Oxido de Fe (III)

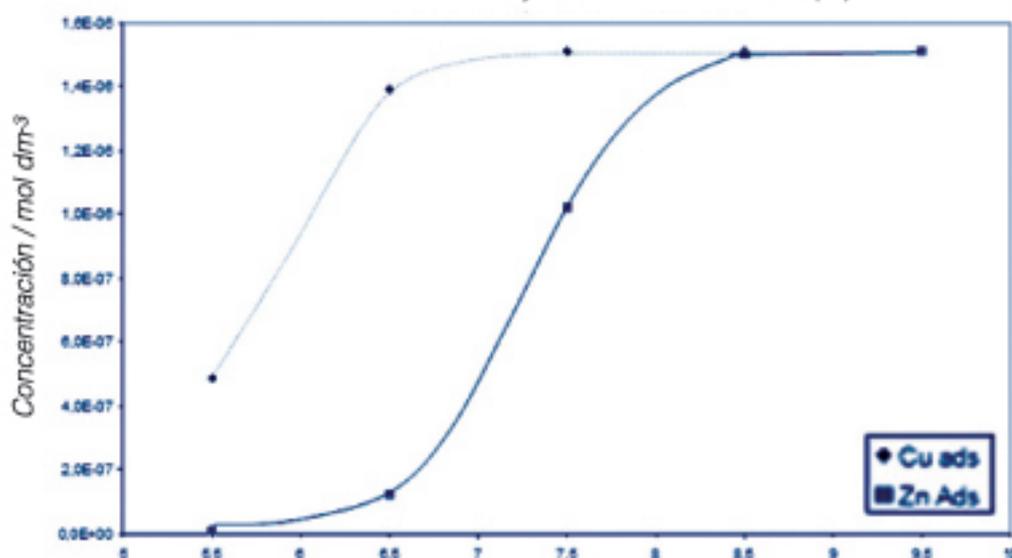


Figura 6. Complejación superficial de los metales Cu(II) y Zn(II) sobre goethita a distintos valores de pH. Valores simulados con el código de cálculo MINEQL4.6. Zn Total: $1,51 \cdot 10^{-6}$ M, Cu Total: $1,51 \cdot 10^{-6}$ M, Fuerza iónica (I) = 0,03 M $NaNO_3$ (corregida), $T = 15^\circ C$

porcentaje de adsorción a pH por debajo de pH 8,5. Se ha utilizado un modelo de doble capa para simular la adsorción del Cu y Zn sobre el óxido de hierro. En libros de texto 8 se puede encontrar más información sobre este modelo y otros disponibles para describir matemáticamente la interacción de iones metálicos disueltos en aguas naturales con la superficie de sedimentos o material particulado en suspensión. Su descripción se encuentra fuera de los objetivos de este trabajo.

Los aniones (A^{n-}) se complejan reemplazando grupos OH superficiales acorde a la siguiente reacción:



La ecuación (6) representa una típica reacción de intercambio de ligando (OH por A) que se caracteriza por:

- La liberación de OH^- a la solución (aumento del

pH del sistema).

- El alto grado de especificidad hacia ciertos aniones (incluso pueden ser moléculas neutras complejantes).
- La formación en muchos casos de complejos superficiales altamente estable (altos valores de K_c).
- No hay una exacta igualdad entre la carga liberada y la carga aniónica adsorbida, y frecuentemente se observa un cambio en la densidad de carga superficial del adsorbente hacia valores más negativos. El acomplejamiento de metales catiónicos sobre materia orgánica puede verse como una reacción de intercambio iónico con los H^+ ligados y el grupo funcional L (representativo de la materia orgánica).



La Figura 7 presenta el acomplejamiento de los

cationes Pb(II), Hg(II) y Cd(II) con el ácido etilendiaminotetracético (EDTA) cuando éste se encuentra en cantidad insuficiente para acomplejar todos los cationes.

El EDTA es un compuesto orgánico utilizado como

agente quelato que forma complejos con metales de estructura de coordinación octaédrica, usando sus cuatro grupos acetato y dos amino; puede por lo tanto actuar como ligando hexadentado.

La Figura 7 muestra que cuando aumenta el pH el

Complejación de Pb(II), Hg(II) y Cd(II) con EDTA

Pbads - Hgads - * - Cdads

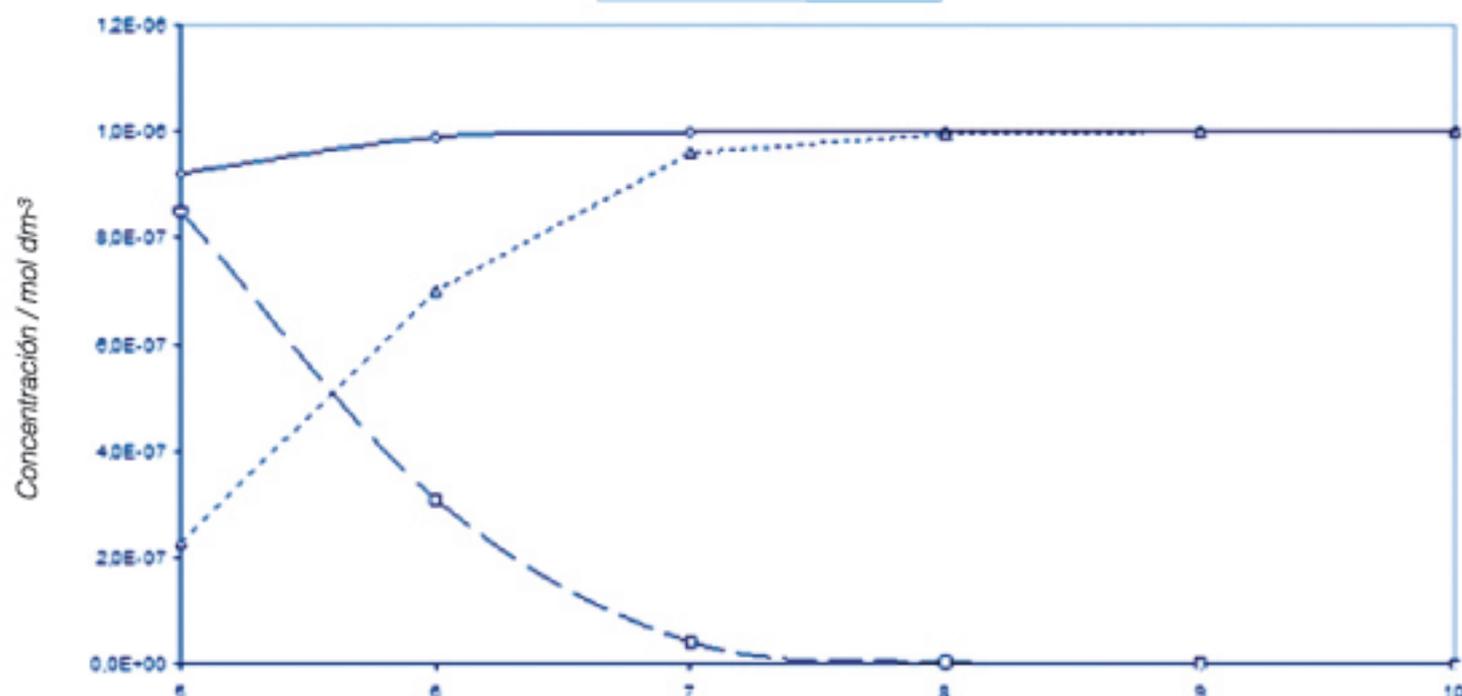


Figura 7. Complejación de Pb(II), Hg(II) y Cd(II) con EDTA a distintos pH del sistema. Valores simulados con el código de cálculo MINEQL4.6. Cd Total: 10^{-6} M, Hg Total: 10^{-6} M, Pb Total: 10^{-6} M y EDTA Total: 2×10^{-6} M. Fuerza Iónica (I) = 0,01 M NaCl (corregida), T = 25°C

Cd(II) comienza a competir muy efectivamente con el Hg por el EDTA. Este efecto se debe a la hidrólisis del Hg. También aumenta levemente la formación del complejo con Pb.

C. Disolución-Precipitación

Todos los metales aquí considerados pueden formar sales, óxidos e hidróxidos, separándose de esta forma como fase sólida (tanto en material particulado suspendido, como en sedimentos).

El equilibrio de disolución-precipitación determina la concentración de metal en solución y por lo tanto su disponibilidad para la biota. Las ecuacio-

nes (7), (8) y (9) muestran los equilibrios de solubilidad de una sal (Me_yAn_n), un hidróxido ($\text{Me}(\text{OH})_n$) y un óxido (Me_2O_n).



En general, un metal disuelto puede precipitar si forma un compuesto Me_yAn_n cuya solubilidad es tal que $K_{ps} < [\text{Me}]^y[\text{An}]^n$. El término de la derecha es el producto de la actividad de los iones (PI). La relación PI/ K_{ps} puede ser mayor o menor que 1. Si es mayor que 1 se dice que la solución está su-

persaturada respecto del metal disuelto. En solución homogénea el grado de supersaturación puede permanecer muy alto (mayor que 100) durante tiempos largos. En cambio, en sistemas acuosos con material particulado suspendido, la nucleación heterogénea¹² es rápida e impide que se alcancen valores muy grandes de supersaturación. Si $PI/K_{ps} = 1$, el metal disuelto se encuentra en equilibrio con su fase sólida; mientras que si es menor que 1, la fase sólida es inestable y todo el metal permanece disuelto. El producto de solubilidad de algunos sólidos metálicos se presenta en la Tabla 3.

Los valores de K_{ps} definen y permiten calcular la solubilidad S (capacidad de un sólido de di-

solverse en agua, expresado en mol L⁻¹ o mg L⁻¹). Para el caso de todos los metales bivalentes que precipitan como carbonatos, puede afirmarse que la solubilidad en agua aumenta desde el Pb hasta el Ca; la misma puede calcularse como $S = K_{ps}/[CO_3^{2-}]$; debe tenerse en cuenta que la concentración de CO_3^{2-} varía con el pH aun cuando la cantidad total de carbonato sea fija. De la misma forma, para el caso de los sulfuros metálicos, la solubilidad $S = K_{ps}/[S^{2-}]$ aumenta desde el Hg hasta el Mn. Con más cuidado deben de analizarse los óxidos e hidróxidos: el Fe es más insoluble que el Al, entre los metales trivalentes; mientras que crece la solubilidad desde el Hg hasta el Mg para los bivalentes.

Carbonatos ($MeCO_3$): $K_{ps} = (Me^{2+})(CO_3^{2-})$										
	Pb	Cd	Mn	Zn	Fe	Ca				
-log K_{ps}	13,13	12,00	10,58	10,26	10,24	8,48				
Óxidos e hidróxidos: $K_{ps} = (Me^{n+})(OH^-)_n$										
	Fe ³⁺	Al ³⁺	Hg ²⁺	Pb ²⁺	Cu ²⁺	Zn ²⁺	Fe ²⁺	Cd ²⁺	Mn ²⁺	Mg ²⁺
-log K_{ps}	39	31,2	24,5	19,85	19,32	16,46	15,2	14,35	12,8	11,2
Sulfuros: $K_{ps} = (M^{2+})(S^{2-})$										
	Hg	Cu	Cd	Pb	Zn	Fe	Mn			
-log K_{ps}	45,69	39,60	31,66	27,5	25,45	17,6	13,5			

Tabla 3. Producto de solubilidad (K_{ps}) de carbonatos, óxidos e hidróxidos y sulfuros

Figura 8. Logaritmo de la solubilidad (mol dm^{-3}) de calcita (CaCO_3), siderita (FeCO_3), carbonato de cinc hidratado ($\text{ZnCO}_3 \cdot 1\text{H}_2\text{O}$), rodocrosita (MnCO_3), otavita (CdCO_3) y cerusita (PbCO_3) a distintos pH. Sistema cerrado a la atmósfera, con fuerza iónica de NaCl $0,01 \text{ mol dm}^{-3}$ y $T = 25^\circ\text{C}$

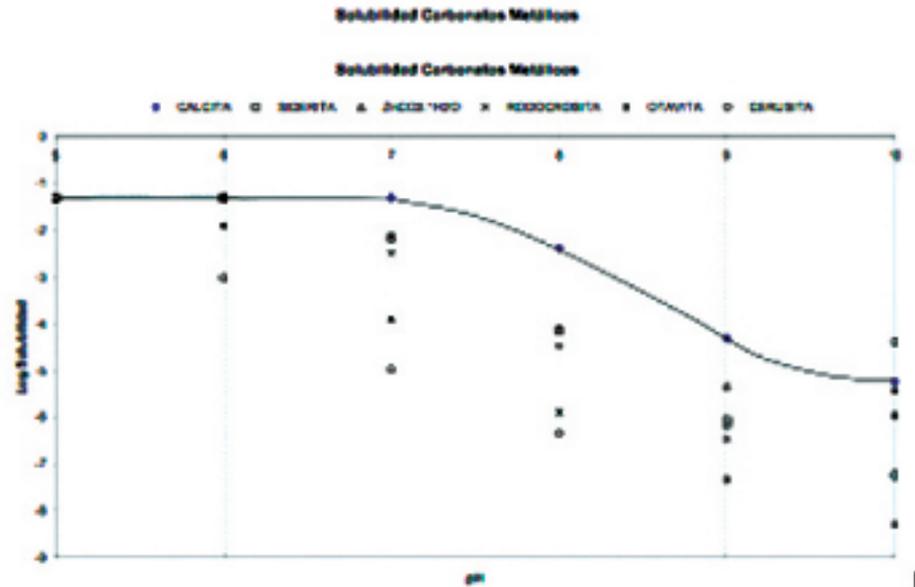


Figura 9. Logaritmo de la solubilidad (mol dm^{-3}) de los hidróxidos de Fe(III), Al(III), Pb(II), Cu(II), Zn(II) y Cd(II) a distintos pH. Sistema cerrado a la atmósfera, con fuerza iónica de NaCl $0,01 \text{ mol dm}^{-3}$ y $T = 25^\circ\text{C}$

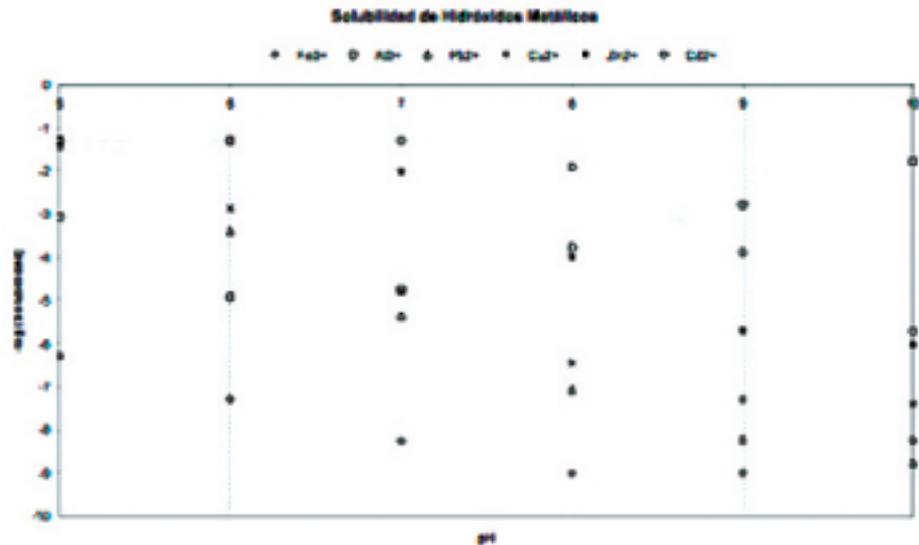
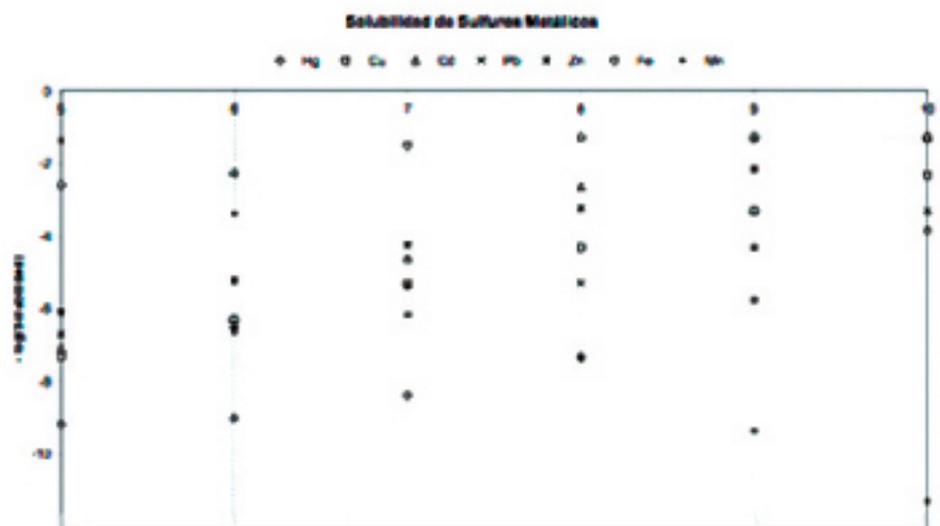


Figura 10. Logaritmo de la solubilidad (mol dm^{-3}) de los sulfuros de Hg(II), Cu(II), Cd(II), Pb(II), Zn(II), Fe(II), Mn(II), y a distintos pH. Sistema cerrado a la atmósfera, con fuerza iónica de NaCl $0,01 \text{ mol dm}^{-3}$ y $T = 25^\circ\text{C}$



D. Reacciones de óxido reducción (redox)

La variación de las solubilidades con el pH de los sólidos correspondientes a algunos de estos metales se presenta en las Figuras 8-10.

La variable potencial redox, al igual que el pH, juega un rol destacado en química de aguas y sedimentos. Toda reacción de óxido-reducción del tipo de la representada en la ecuación (10) tiene un potencial eléctrico asociado dado por la ecuación de Nernst (11).



$$E(V) = E^0 - \frac{0,059}{n} \log \frac{(\text{Especie Reducida})}{(\text{Especie Oxidada})(\text{H}^+)^m} \quad (11)$$

En estas ecuaciones m y n indican número de protones y electrones que participan de la reacción; los paréntesis indican actividades.

En la Tabla 4 se presentan los potenciales estándar para reacciones de interés en agua y sedimentos a 25 °C y 1015 HPa (1M), incluidos los metales Pb, Hg, Cr, Cd, Cu y As. Se han resaltado las hemireacciones de descomposición del agua entre cuyos potenciales redox tienen lugar las cuplas redox de aguas naturales.^{6,13}

Reacciones Químicas (hemireacciones)	E(V)
$1/2\text{PbO}_2(\text{s}) + 2\text{H}^+ + 1/2\text{SO}_4^{2-} + 1\text{e}^- = 1/2\text{PbSO}_4(\text{s}) + \text{H}_2\text{O}(\text{l})$	1,700
$1/5\text{MnO}_2 + 8/5\text{H}^+ + \text{e}^- = 1/5\text{Mn}^{2+} + 4/5\text{H}_2\text{O}(\text{l})$	1,510
$\text{MnOOH}(\text{s}) + 3\text{H}^+ + \text{e}^- = \text{Mn}^{2+} + 2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$	1,450
$1/6\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + 7/6\text{H}^+ + \text{e}^- = 1/3\text{Cr}^{3+} + 7/6\text{H}_2\text{O}(\text{l})$	1,330
$1/5\text{NO}_3^- + 8/5\text{H}^+ + \text{e}^- = 1/10\text{N}_2(\text{g}) + 3/5\text{H}_2\text{O}(\text{l})$	1,245
$1/2\text{MnO}_2(\text{s}) + 2\text{H}^+ + \text{e}^- = 1/2\text{Mn}^{2+} + \text{H}_2\text{O}(\text{l})$	1,230
$1/2\text{O}_2(\text{g}) + \text{H}^+ + \text{e}^- = 1/2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$	1,229
$\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{s}) + 3\text{H}^+ + \text{e}^- = \text{Fe}^{2+} + 3\text{H}_2\text{O}(\text{l})$	1,057
$\text{Hg}^{2+} + \text{e}^- = 1/2\text{Hg}_2^{2+}$	0,820
$1/2\text{Hg}_2^{2+} + \text{e}^- = \text{Hg}(\text{l})$	0,850
$1/2\text{NO}_2^- + \text{H}^+ + \text{e}^- = 1/2\text{NO} + 1/2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$	0,834
$\text{Fe}^{3+} + \text{e}^- = \text{Fe}^{2+}$	0,771
$1/2\text{O}_2(\text{g}) + \text{H}^+ + \text{e}^- = 1/2\text{H}_2\text{O}_2$	0,682
$1/3\text{MnO}_2 + 2/3\text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \text{e}^- = 1/3\text{MnO}(\text{s}) + 2/3\text{OH}^-$	0,590
$1/2\text{H}_2\text{AsO}_4 + \text{H}^+ + \text{e}^- = 1/2\text{HAsO}_3 + 1/2\text{H}_2\text{O}$	0,580
$\text{Cu}^{2+} + 2\text{e}^- = \text{Cu}(\text{s})$	0,340
$1/8\text{SO}_4^{2-} + 5/4\text{H}^+ + \text{e}^- = 1/8\text{H}_2\text{S} + 1/4\text{H}_2\text{O}(\text{l})$	0,303
$1/8\text{N}_2(\text{g}) + 4/3\text{H}^+ + \text{e}^- = 1/3\text{NH}_4^+$	0,274
$1/8\text{CO}_2(\text{g}) + \text{H}^+ + \text{e}^- = 1/8\text{CH}_4(\text{g}) + 1/4\text{H}_2\text{O}$	0,169
$\text{Cu}^{2+} + \text{e}^- = \text{Cu}^+$	0,150
$1/2\text{Sn}^{4+} + \text{e}^- = \text{Sn}^{2+}$	0,130
$\text{H}^+ + \text{e}^- = 1/2\text{H}_2(\text{g})$	0,000
$1/2\text{Pb}^{2+} + \text{e}^- = 1/2\text{Pb}(\text{s})$	-0,130
$1/2\text{Sn}^{2+} + \text{e}^- = 1/2\text{Sn}(\text{s})$	-0,140
$1/2\text{Ni}^{2+} + \text{e}^- = 1/2\text{Ni}(\text{s})$	-0,250
$1/2\text{Co}^{2+} + \text{e}^- = 1/2\text{Co}(\text{s})$	-0,280
$1/2\text{PbSO}_4(\text{s}) + \text{e}^- = 1/2\text{Pb}(\text{s}) + 1/2\text{SO}_4^{2-}$	-0,310
$1/2\text{Cd}^{2+} + \text{e}^- = 1/2\text{Cd}(\text{s})$	-0,400
$1/3\text{Cr}^{3+} + \text{e}^- = 1/3\text{Cr}(\text{s})$	-0,740
$1/2\text{Zn}^{2+} + \text{e}^- = 1/2\text{Zn}(\text{s})$	-0,760
$\text{H}_2\text{O} + \text{e}^- = 1/2\text{H}_2(\text{g}) + \text{OH}^-$	-0,830
$1/2\text{Mn}^{2+} + \text{e}^- = 1/2\text{Mn}(\text{s})$	-1,180

Tabla 4.

Potenciales redox estándar a 2 °C y 1015 HPa relativos al potencial estándar del electrodo de hidrógeno. Las actividades de cada una de las especies en solución es 1

El potencial redox de la mayoría de las reacciones depende del pH tal como se muestra en las ecuaciones 12 y 13 para la cupla $\text{MnO}_2/\text{Mn}^{2+}$.



$$E(V) = E^0 - \frac{0,059}{2} \log \frac{(\text{Mn}^{2+})}{(\text{H}^+)^4} \quad (13)$$

$$\text{Si } [\text{Mn}^{2+}] = 10^{-5} \text{ M, } E = 1,378 - 0,118 \times \text{pH}$$

La expresión describe una línea recta en un diagrama E vs pH. En este tipo de diagrama se pueden representar varias reacciones redox, incluidas las que llevan a la evolución de oxígeno e hidrógeno a partir de agua (Figura 11).

El potencial redox de un agua natural, medido con un electrodo de platino, da cuenta de un potencial mixto resultante de todas las cuplas redox presentes en el sistema [4-7]; brindando de esta forma una idea sobre un proceso redox global del sistema.

Algunas cuplas redox, como ser NO_3^-/N_2 , donde el nitrato es un fuerte oxidante, no influyen sobre el potencial (E) pues evolucionan muy lentamente (el factor cinético es el limitante de la reacción). La definición de la constante de la hemireacción redox de la ecuación 10, con $(\text{H}^+) = 1$, y su expresión logarítmica se presentan en las ecuaciones 14 y 15.

$$K = \frac{[\text{Especie Reducida}]}{[\text{Especie Oxidada}] (e^-)^n} \quad (14)$$

$$\log K = n \text{pe} + \log \left\{ \frac{[\text{Especie Reducida}]}{[\text{Especie Oxidada}]} \right\} \quad (15)$$

En estas ecuaciones se define convencionalmente a (e^-) como la actividad de electrones y a pe como el potencial de electrones del agua, por analogía con la definición de pH tal como se presenta en la ecuación 16.

$$\text{pe} = -\log (e^-) \quad (16)$$

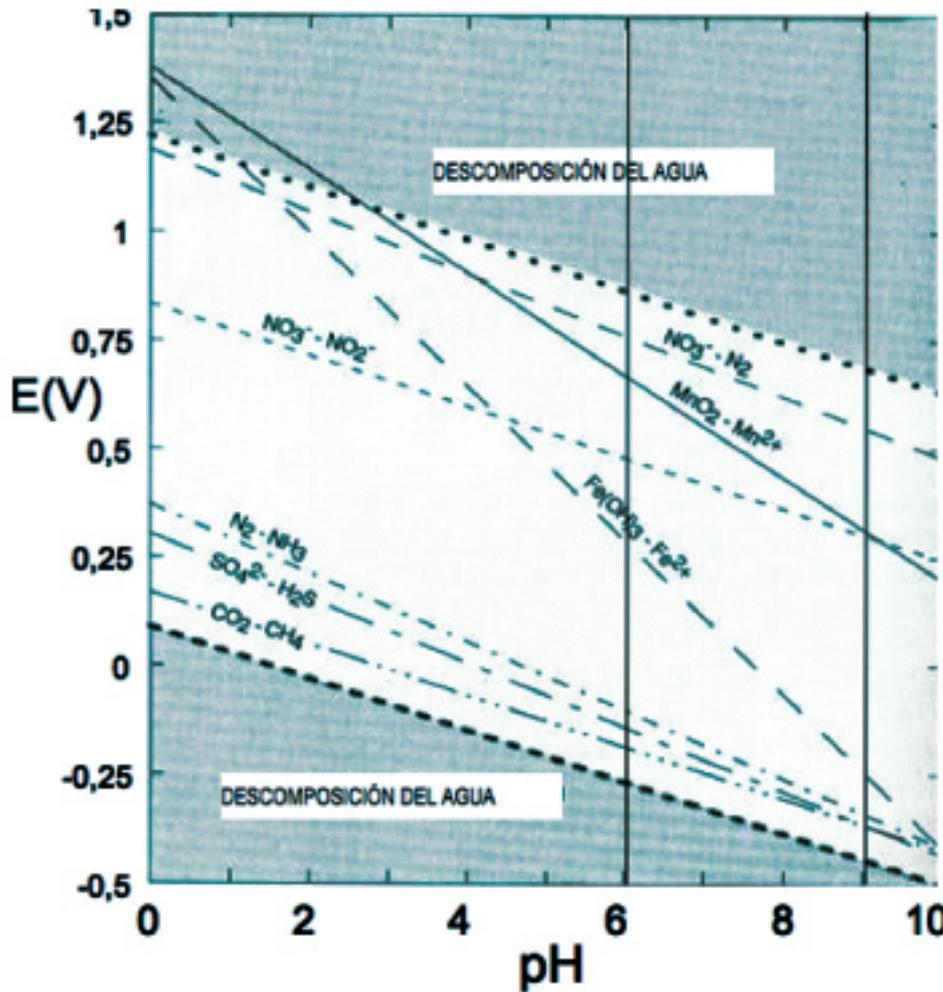


Figura 11. Variación del potencial redox (E) con el pH para reacciones típicas en agua. Se destacan entre pH 6 y 9 las cuplas relevantes en aguas naturales. Adaptado de la referencia [6]

Así como el pH mide la tendencia relativa de una solución a aceptar o transferir protones (en una solución ácida, pH bajo, esta tendencia es baja; en una solución alcalina, pH alto, esta tendencia es elevada), el pe mide la tendencia relativa de una solución a aceptar o transferir electrones (en una solución fuertemente oxidante, pe bajo, la tendencia a tomar electrones es baja; en una solución reductora, pe alto, esta tendencia es elevada). Si se tiene en cuenta la ecuación de Nernst, donde el potencial estándar de la reacción (E°) se relaciona con la constante de equilibrio de la reacción (K) y la energía libre estándar de la misma:

$$\Delta G^\circ = -n F E^\circ = -RT \ln K \quad (17)$$

Es fácil arribar a la relación entre el pe y E tal como se presenta en la ecuación (18) cuando la temperatura es de 25 °C y se intercambia 1 electrón.

$$E (V) = -0.059 pe \quad (18)$$

De esta forma, para un dado pe y pH, los metales y metaloides hasta aquí considerados se estabilizan en agua bajo una especie química en particular, tal como se presenta en la Figura 12 para el arsénico.

Tal como puede observarse, a pH de aguas naturales y bien aireadas, predominan las especies mono y diprotonadas del As(V); mientras que en aguas naturales poco oxígeno o anaerobias predominan el As(III) diprotonado y el ácido arsenioso sin disociar.

Para el caso del hierro, se ha observado que el Fe^{2+} es bastante soluble y puede alcanzar concentraciones altas en soluciones de sedimentos y suelos pobremente aireados.⁶

Como la velocidad de oxidación del Fe^{2+} es alta en presencia de oxígeno disuelto, el Fe^{2+} no persiste más que unos minutos en soluciones aireadas a pH 7 o mayores. La Figura 13 ilustra las especies estables de Fe bajo diversas condiciones pe-pH.

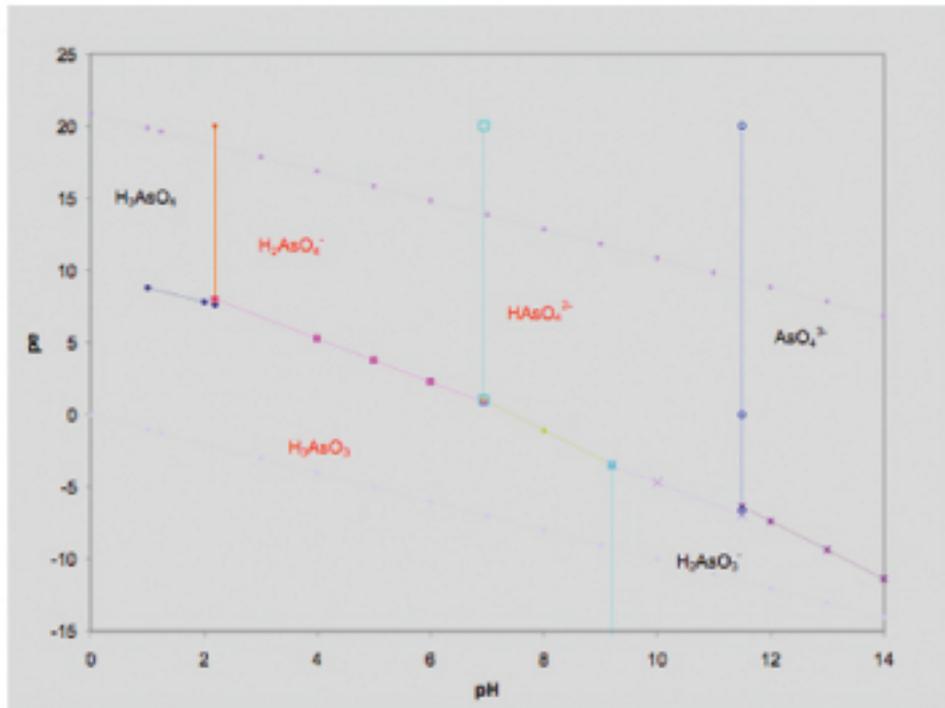


Figura 12. Diagrama de Potencial de Electrones (pe) en función del pH para el As en agua. Los cálculos de especiación química fueron realizados con el programa MINEQL+ ver. 4.0. Temperatura = 25°C, $CT(As) = 1,3 \times 10^{-5} M$. $FI = 0,01 \text{ mol dm}^{-3}$ de KCl. Tomado de [9]

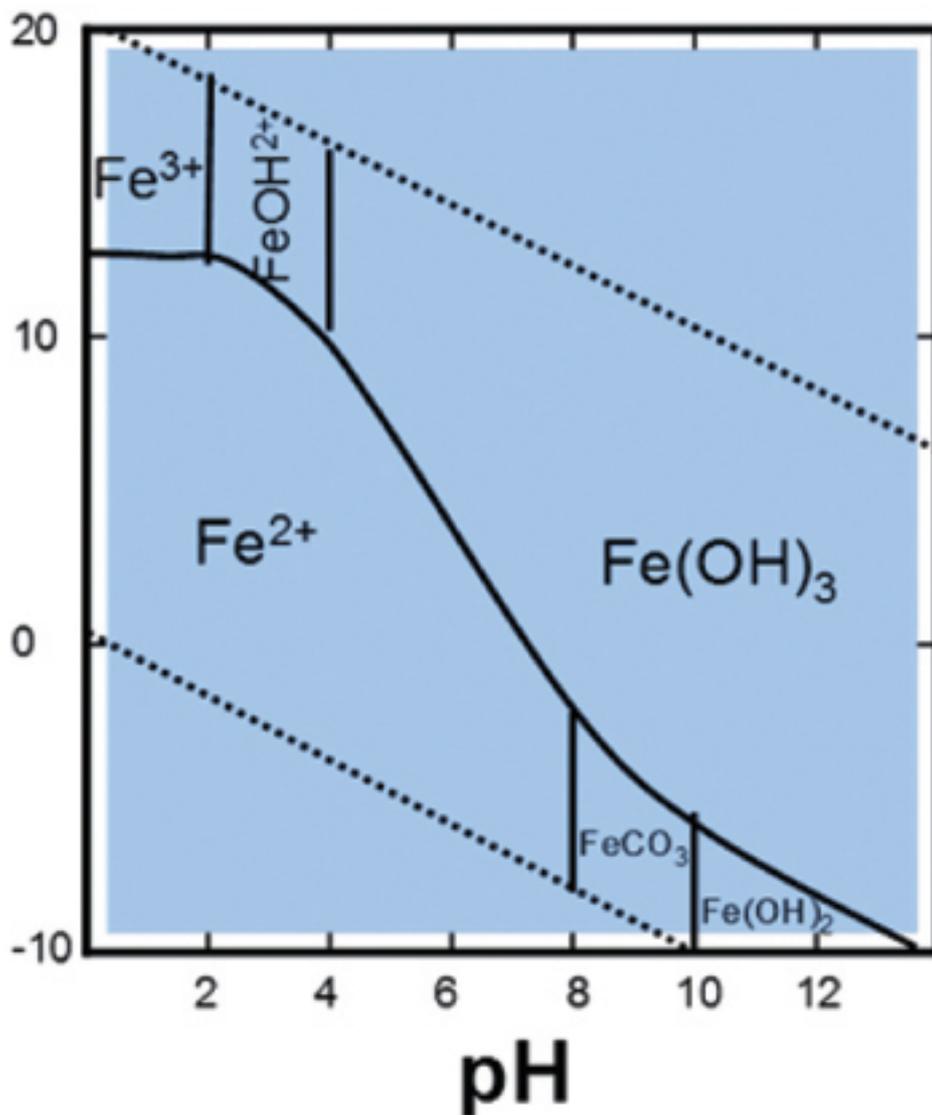


Figura 13. Diagrama pe-pH de Fe a 25 °C y $pCO_2 = 3 \text{ at}$. Adaptado de [5 y 6]

Varios polifenoles del sedimento, incluyendo los ácidos húmicos, pueden reducir el Fe^{3+} tal cual se presenta en la ecuación 19.

Fe^{3+} -húmico \longleftrightarrow Fe^{2+} ácido húmico oxidado (19)

Es por eso que a veces es posible tener concentraciones detectables de Fe^{2+} aún en presencia de oxígeno.

Si el nivel de agua en el sedimento es fluctuante

(típico de la rívera en ríos de llanura aluvional con caudal estacional o en los intermareales), se produce la alternancia de condiciones aeróbicas y anaeróbicas.

Durante los períodos secos el hierro se reduce por electrones aportados por materia orgánica. Cuando dreña agua durante la estación de lluvia, la oxidación del Fe^{2+} genera suelos ácidos y se forman hidróxidos de Fe(III) .

Este proceso se denomina *ferrólisis* (ver Figura 14).

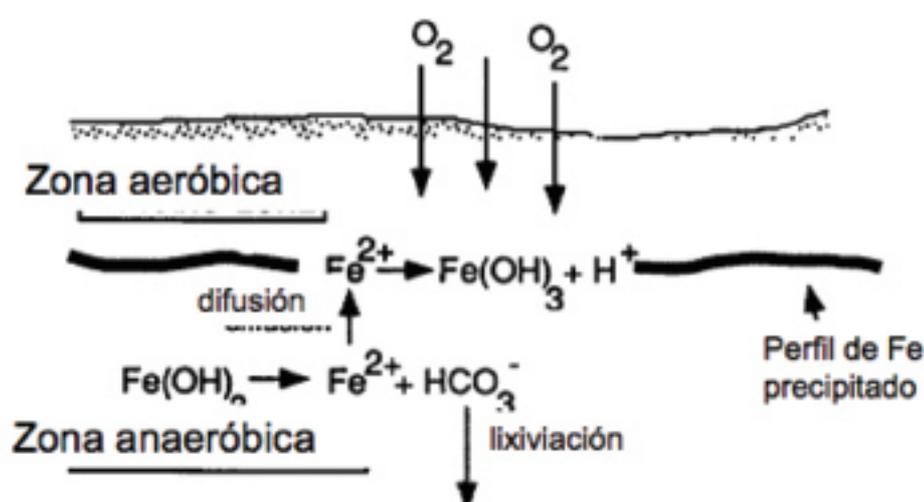


Figura 14. Descripción esquemática del proceso de ferrólisis en sedimentos de intermareales o rívera de un río. Tomado de [5]

En sedimentos aeróbicos el sulfato es la forma estable del azufre. Fuertes condiciones reductoras (sedimento sumergido en la Figura 15) reducen biológicamente el sulfato a H_2S que, disuelto en agua, forma sulfuros insolubles tal cual se presenta en las ecuaciones 20 a 24.



Las ecuaciones 20 y 21 representan la disolución reductiva del sulfato en agua; la 23, la disolución reductiva del hidróxido de Fe(III) ; y la 24, la precipitación de FeS . Los cationes Pb^{2+} , Hg^{2+} , Cd^{2+} y Cu^{2+} , en este tipo de ambientes, precipitan como sulfuros muy insolubles (ver Tabla 3 de productos

de solubilidad de sulfuros metálicos), disminuyendo de esta forma su biodisponibilidad en la columna de agua.

Sin embargo cuando el sedimento se airea (ver Figura 15), los sulfuros metálicos se disuelven oxidativamente para generar lixiviados ácidos de sulfato e hidróxidos de Fe(III) , los cuales se depositan en los mismos. En este caso, quedarán biodisponibles todos aquellos metales como el Pb^{2+} , Hg^{2+} , Cd^{2+} y Cu^{2+} en el agua de poro de los sedimentos pues sus óxidos e hidróxidos son más solubles que los de hierro.

3. Toxicidad

Los elementos metálicos tóxicos (incluyen a los llamados pesados), son aquellos cuyos compuestos químicos afectan negativamente a la salud.

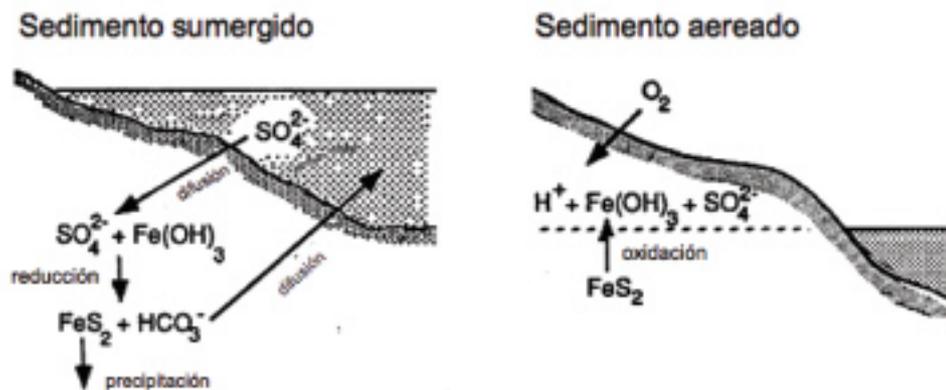


Figura 15.
Procesos de acumulación
de sulfuro (inmersión)
y generación de
ácido sulfúrico (aireación)
en un ambiente costero

Para tener en cuenta:

- La toxicidad aguda en plantas y microorganismos está más relacionada con la concentración de cationes metálicos libres en solución.
- La acumulación de metales en el largo plazo, depende en gran medida de la concentración total del metal en solución y de la capacidad del medio en mantener esta concentración.

Se suele incluir en el grupo también a algunos elementos semimetálicos (arsénico y selenio) debido a su toxicidad.

Desde el punto de vista del riesgo para la salud los metales prioritarios son:

As, Be, Sb, Cd, Cr, Cu, Pb, Hg, Ni, Se, Ag, Tl y Zn

a. Disponibilidad de los metales

Ya sea que un metal esté presente naturalmente en el ambiente o haya sido introducido por el hombre, más importante que la cantidad total del mismo es su disponibilidad.

Esta propiedad se relaciona con la movilidad del metal y su inmovilización en el sedimento, material particulado suspendido y la biota.

Los procesos que gobiernan la disponibilidad de un metal incluyen los ya mencionados de hidrólisis, ácido-base, intercambio iónico, complejación superficial, precipitación-disolución y redox, tanto en fase homogénea (en la columna de agua) como en sedimentos y material particulado suspendidos.

b. Especiación química y disponibilidad

Un determinado elemento metálico puede formar parte de varias especies distintas en el medio acuoso. Por ejemplo, el Fe puede estar presente como Fe^{2+} , Fe^{3+} , $Fe(OH)^{2+}$, $FeCO_3$, y muchas otras especies que difieren en el grado de hidrólisis, en el estado de oxidación y/o en complejación por diversos ligandos. La descripción cuantitativa de todas las especies químicas en las que se presenta un metal en agua recibe el nombre de especiación. Como se ha visto, cada metal tiene una particular especiación química en agua. Ésta afecta profundamente su biodisponibilidad.

Las aguas superficiales ofrecen una rica variedad de posibilidades de interacción de los metales con materia orgánica (ácidos húmicos y fúlvicos), carbonatos (HCO_3^- , CO_3^{2-}), H^+ y OH^- , entre otros aniones capaces de formar complejos solubles con cationes metálicos y oxoaniones. En particular los ligandos orgánicos incrementan la capacidad de transporte de soluciones con metales fuertemente complejados como el Cu y Cd (incrementando su solubilidad). Por ejemplo, la adsorción de iones como Cu y Cd por plantas acuáticas se correlaciona con la concentración del ión metálico libre

en la solución. Si hay materia orgánica presente hay una mayor toma de Cu por las raíces a cualquier concentración de Cu libre (no complejo). Esto se debe a que la concentración de complejos orgánicos de Cu es mucho mayor que la de Cu libre.

La adsorción de cationes metálicos en superficies minerales y orgánicas se ve favorecida por el incremento del pH (ver sección intercambio catiónico y quimisorción de cationes) hasta valores levemente superiores a 8. A partir de este pH, la concentración de distintos ligandos (Cl^- , HCO_3^- , CO_3^{2-} , OH^- y materia orgánica) favorecen la formación de especies solubles de los cationes metálicos, incrementándose entonces su concentración total en solución.

c. Movilidad de metales en agua

Los factores que pueden alterar la movilidad de un elemento en agua son la especiación del mismo, la naturaleza química y mineralógica de los sólidos y el ambiente fisicoquímico y biológico en agua y sedimentos.

i. Forma química del elemento metálico (especiación)

Los cationes débilmente hidratados se fijan fuertemente sobre arcillas y humus.

Los cationes metálicos fuertemente hidratados son intercambiables y algo móviles, excepto los que se adsorben químicamente como Pb^{2+} y Cu^{2+} .

Los hidróxidos anfotéricos son inmóviles por su baja solubilidad. Los aniones solubles son móviles, salvo los que se quimisorben, como el fosfato.

ii. Naturaleza química y mineralógica del material particulado en agua y sedimentos

Los óxidos de Fe, Al y Mn que conforman los sedimentos y el material particulado suspendido, proveen de sitios de quimisorción para cationes y aniones. Los silicatos laminares proveen de sitios de intercambio para cationes y pocos sitios de quimisorción (sobre los bordes) para cationes y aniones. Los aluminosilicatos no cristalinos poseen

grandes cantidades de sitios de quimisorción para cationes y aniones. La materia orgánica adsorbe preferentemente cationes metálicos. En resumen, los sólidos con alto contenido en arcillas, óxidos o materia orgánica retienen fuertemente a los metales. Un alto pH favorece la precipitación de cationes metálicos como óxidos, hidróxidos y carbonatos. La salinidad (fuerza iónica) está siempre asociada con altos niveles de cloruro, sulfato, bicarbonato. El primero es capaz de movilizar metales formando pares iónicos metal-cloruro (por ejemplo, con Hg^{2+} y Cd^{2+}). El potencial redox influye sobre la solubilidad de algunos elementos. El Hg, Cu, Pb, Cd, Zn, As y Se forman sulfuros insolubles en ambientes reductores. La movilización de estos elementos es muy lenta a menos que se restauren las condiciones oxidantes del ambiente.

iii. Ambiente físico y biológico en agua y sedimentos

La alta solubilidad de algunos elementos no se manifiesta en el transporte a menos que exista un significativo movimiento de agua. En climas áridos los elementos móviles se concentran por evaporación, mientras que en climas húmedos recorren grandes distancias la totalidad de la cuenca.

La biota puede inmovilizar metales solubles y acumularlos. Cuando los organismos concluyen su ciclo de vida se forman ácidos húmicos y minerales, que permiten recuperar al cuerpo de agua y los sedimentos los elementos bioacumulados. Hay algunas reglas generales que pueden aplicarse a la movilidad de metales tóxicos en agua y sedimentos:

- Las aguas en contacto con sedimentos ricos en arcillas (silicatos y óxidos) tienden a tener mayor concentración de elementos traza que aquellas con sedimentos arenosos o con grava.
- Las aguas y sedimentos ricos en materia orgánica tienden a tener mayor concentración de elementos traza.
- Las aguas y sedimentos con pH moderados a alto tienden a tener mayor concentración de elementos traza que las aguas y sedimentos naturalmente acidificados.

APÉNDICE: El Programa de Especiación Química MINEQL

El código de cálculo MINEQL es un programa de equilibrio químico, que permite realizar cálculos de distribución de especies químicas en sistemas acuosos; determinaciones de los valores teóricos de pH para un sistema dado; simulaciones del comportamiento químico de la superficie de un sólido en un proceso de adsorción; y la modelización de la precipitación de fases sólidas [3].

a. Terminología

A continuación se definen algunos términos utilizados en el programa.

Componentes. Matemáticamente, son las variables independientes de la ecuación de balance de masa. Representan el conjunto mínimo de entidades químicas imprescindibles para describir la composición del sistema. La selección de los componentes es de alguna manera arbitraria. Por ejemplo en un sistema $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$ se puede elegir como componente a una cualquiera de las siguientes especies: CO_3^{2-} , HCO_3^- o H_2CO_3 ; las otras dos quedan fijadas por los vínculos matemáticos provistos por las constantes de los equilibrios que las relacionan. Sin embargo, una vez que se realiza una elección, ésta sirve como punto de referencia para definir todas las constantes termodinámicas y las reacciones. En el MINEQL, los componentes están predefinidos en su base de datos termodinámicos.

Especies. Entidades químicas resultantes de las reacciones en las cuales los reactantes son las componentes. Hay dos tipos de especies: solubles y sólidos.

Especies solubles. Cualquier especie que pueda estabilizarse en la fase acuosa. Una especie soluble puede ser un componente soluble o un complejo. Ellos pueden incluir especies acuosas (Ca^{2+} , H^+ , SO_4^{2-}), pares iónicos ($\text{PbCO}_3(\text{aq})$) complejos (AlF_2^+), quelatos (FeCIT , Na_2EDTA), etc. La concentración de las especies solubles es variable y es una función de los datos termodinámicos de las

especies y de la concentración de los componentes que componen cada especie.

Sólidos. Cualquier especie que tiene una actividad fija. Por lo general, las fases sólidas ($\text{CdCO}_3(\text{s})$, $\text{Al}(\text{OH})_3(\text{s})$, HgS , $\text{Cr}(\text{OH})_3$) tienen actividad igual a uno. Sin embargo, bajo esta definición, los gases con presión parcial fija son tratados como sólidos. También se puede extender esta definición a parámetros tales como pH y pe. Existen dos tipos de sólidos: **disueltos** y **precipitados**.

Sólidos disueltos. Tienen el potencial de precipitar si su solubilidad es excedida. No contribuyen al balance de masa de un problema.

Sólidos precipitados. Sólidos que están presentes a una actividad fija. Si el sistema está subsaturado, el sólido se convertirá en sólido disuelto y será removido del cálculo.

Estas seis definiciones forman parte de todo cálculo de equilibrio químico y corresponden, en el MINQL+, a seis *Tipos de Especies* utilizados en sus cálculos.

- **Especie Tipo I.** Especies solubles que corresponden a los componentes del sistema.
- **Especie Tipo II.** Complejos acuosos, es decir, todas las especies solubles excluyendo los componentes del sistema.
- **Especie Tipo III.** Sólidos que tienen una actividad fija.
- **Especie Tipo IV.** Sólidos precipitados que tienen el potencial de convertirse en sólidos disueltos.
- **Especie Tipo V.** Sólidos disueltos que tienen el potencial de precipitar.
- **Especie tipo VI.** Especies que no son consideradas en el cálculo.

b. Modelización de procesos de equilibrio químico

La modelización de procesos de equilibrio químico se basa en tres preguntas que deben ser contestadas:

- ¿Qué componentes químicos están presentes en el sistema?

- ¿Cómo interactúan estos componentes entre sí, para formar las especies químicas?
- ¿Cuál es la concentración total de cada componente?

Una sesión típica del MINQL + puede ser esquematizada en los siguientes pasos:

- Selecciona del menú los componentes químicos
- Examina la base de datos termodinámica
- Ingresa las concentraciones totales de cada componente
- Altera las constantes de equilibrio termodinámicas (Opcional).
- Selecciona un criterio de cálculo múltiple (Opcional).
- Inicia los cálculos de equilibrio químico
- Muestra los datos de salida y sus representaciones gráficas. También permite exportar los datos.

c. Uso del código MINEQL+

a. Selección de los componentes del sistema

Select Components for Calculations. Permite seleccionar los componentes, hasta un máximo de 25, entre los 145 existentes en la base de datos. Además existen 55 componentes "NULL" que pueden ser definidos por el usuario.

b. Examen de la base termodinámica

Scan Thermo. Se presentan los nombres de las especies acuosas presentes; los coeficientes estequiométricos que corresponden a las reacciones químicas de formación de las mismas a partir de los componentes seleccionados; las correspondientes constantes de equilibrio ($\log K$), los valores de entalpía (ΔH) y las concentraciones totales en mol/l.

c. Entrada de las características del sistema

Wizard.

- Totals: Concentraciones de los componentes seleccionados

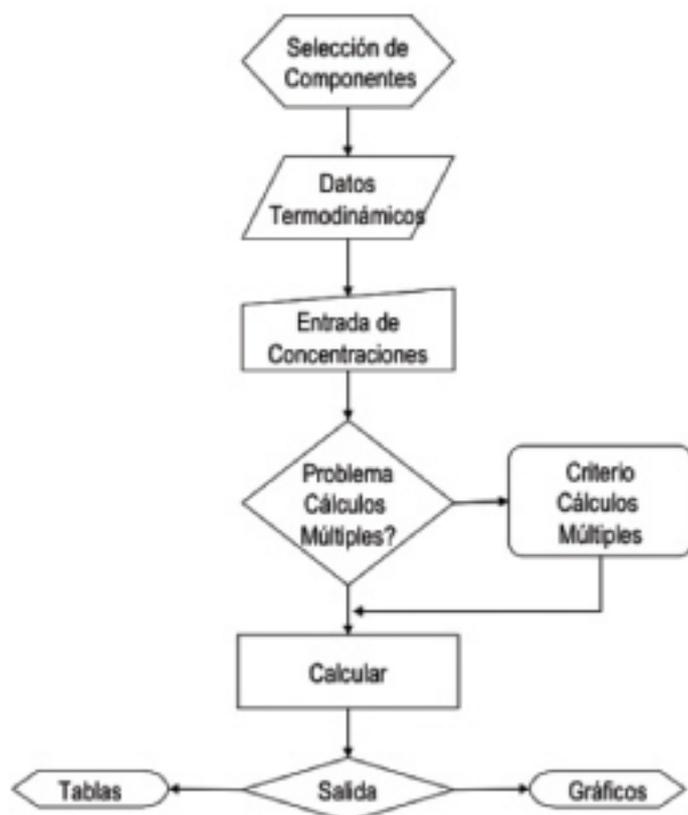


Figura 16. Pasos de una sesión típica de uso del Código de Cálculo MINEQL+

- pH: Valor de pH fijo o calculado por el programa
- CO2: Tipo de cálculo, cerrado o abierto a la atmósfera.
- Solids Mover: Sólidos que están disueltos en el sistema
- Redox: Valor de pe

Run Time Manager

- Output Data Name: Nombre del archivo de salida.
- Ionic Strength Corrections: Valor de la fuerza iónica, fija o calculada por el programa
- Adsorption Model: Modelos para cálculos de adsorción.
- Temperature Correction: Correcciones por temperatura
- MultiRun: Criterios de cálculo múltiple.

d. Corrida de datos

Run. Se realizan los cálculos de equilibrio químico.

e. Vista de los resultados

Output Manager.

Permite examinar los datos de salida desde distintos puntos de vista.

- Header: Resumen de los datos de entrada.
- Log: Contiene distintos datos de salida como por ejemplo la carga total en solución, así también como los posibles mensajes de error.
- Multirun Variables: Variación de los parámetros utilizados en el cálculo múltiple.
- Component Group. Permite visualizar, graficar y exportar los datos de salida.

4. Literatura Citada

1 Proyecto ARCAL RLA/1/010 Mejora de la gestión de la contaminación de masas de aguas superficiales contaminadas por metales. ARCAL es la sigla con que se denomina al Acuerdo Regional de Cooperación para la Promoción de la Ciencia y Tecnología Nucleares en América Latina. El Programa, del Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA), se basa principalmente en la cooperación horizontal, técnica y económica con el fin de promover el uso de las diversas técnicas nucleares y sus aplicaciones con fines pacíficos.

2 Baes, C., F., Mesmer, R., E., 1976. The hydrolysis of cations. Wiley Interscience: New York. ISBN: 0471039853.

3 Blesa, M.A., La contaminación por metales, Ciencia e Investigación.

4 MINTEQA2. A Geochemical Assessment Model for Environmental Systems, 2006. Environmental Protection Agency.

5 Environmental Research Software, 2007. MINEQL 4.6. A Chemical Equilibrium Modeling System.

6 McBride, M., B., 1994. Environmental Chemistry of Soils. Oxford University Press. Nueva York, EEUU. ISBN: 9780195070118.

7 Blesa, M.,A., Morando, P.,J., Regazzoni, A., E., 1994. Chemical Dissolution of Metal Oxides. CRC Press, Boca Raton, EEUU. ISBN: 0849359430.

8 Stumm, W., Morgan, J.J., 1996. Aquatic Chemistry: chemical equilibria and rates in natural waters, 3ra ed., John Wiley & Sons, Inc., Nueva York, EEUU. ISBN: 9780471511854.

9 El pH del punto de carga cero se define como el valor de pH al cual la carga superficial neta es nula, ya que existe el mismo número de sitios cargados positivamente y negativamente.

10 Stumm, W., 1992. Chemistry of the Solid Water Interface. 1era

Ed, John Wiley&Sons Inc. New York, EEUU. ISBN: 978-0471576723.

11 Blesa, M.A., dos Santos, M y Apella, M.C., Agua y ambiente: un enfoque desde la Química. (2011) EUDEBA, en prensa.

12 La nucleación es la etapa de la precipitación en la cual se forma una partícula lo suficientemente grande como para que no se redissuelva. En efecto, las partículas muy pequeñas son más solubles, y llegar a crecer el núcleo en muchos casos es el factor que retarda la formación del sólido.

13 Bard, A. J., Parsons, R., Jordan, J., 1985. Standard Potentials in Aqueous Solutions. Marcel Dekker, New York, EEUU.

14 Czemiczyniec, M., 2008. Estudios fundamentales de retención de arsénico [As(V)] en sólidos suspendidos y matrices porosas de materiales biogénicos de hidroxiapatita. Tesis Doctoral. Doctorado en Ciencia y Tecnología Mención Química. Universidad Nacional de San Martín.



CONVOCATORIA ABIERTA SYNCROTÓN-SOLEIL

En el marco del Acuerdo MINCYT-SOLEIL, firmado el 27 de abril de 2011, se encuentra abierta la convocatoria hasta el 15 de febrero de 2012, con el objeto fortalecer la vinculación de la comunidad científica argentina y el Sincrotrón SOLEIL de Francia.

A través de dicho acuerdo ambas Partes incrementaron el acceso a líneas de haz, la capacidad de investigación;

El desarrollo del capital humano y la producción científica en relación con el uso de las facilidades de luz sincrotrón.

Esta cooperación es una excelente oportunidad para que los científicos argentinos accedan con un status especial a las Convocatorias Synchrotron-Soleil.

Con especial apoyo del Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva y el CONICET.

Podrá acceder a la convocatoria 2012 en:
<http://www.synchrotron-soleil.fr/Recherche/SUN>



CONVOCATORIA CYTED 2012

Se encuentra abierta la Convocatoria CYTED 2012, que permanecerá abierta desde el 1 de febrero hasta el 3 de abril de 2012 a las 17 hs. (hora local de Madrid, España).

En www.cytcd.org/cytcd_investigacion/participa.php Acceder a las bases de la Convocatoria y los documentos donde especifican los instrumentos de participación que se admiten en cada línea convocada.

(Red Temática o Acciones de transferencia de tecnología al sector empresarial para la presente Convocatoria) de las Áreas Científico-Tecnológicas en las que se desarrolla el Programa CYTED.

(Agroalimentación, Salud, Promoción del Desarrollo Industrial, Desarrollo Sostenible, Cambio Global y Ecosistemas, Tecnologías de la Información y las Comunicaciones, Ciencia y Sociedad y Energía).

La propuesta se deberá completar on line en www.cytcd.org

Para consultas contactarse con Magdalena Álvarez Arancedo: marancedo@mincyt.gov.ar

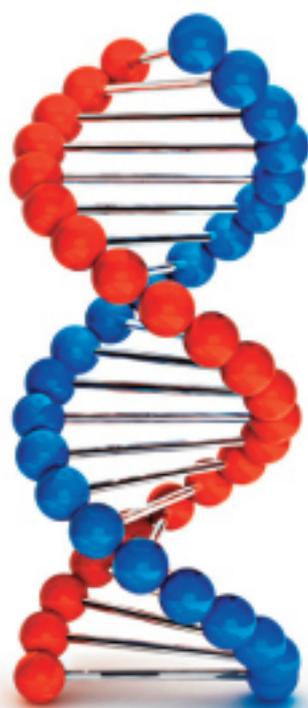
Premio 2011

LALCEC
90 LIGA ARGENTINA DE LUCHA
CONTRA EL CÁNCER
ANIVERSARIO

Fundación Rene Baron

AL MEJOR TRABAJO SOBRE

Avances innovativos en biología molecular del cáncer



El premio consistirá en un Diploma y
la suma de \$ 11.000 (Pesos, once mil).

CALENDARIO

Segundo llamado a Concurso: 14 de Noviembre de 2011

Cierre del concurso: 26 de Marzo de 2012

Fecha de entrega del premio:

11 de Abril de 2012 a las 18.00 horas.

Lugar de entrega de premio y diploma:

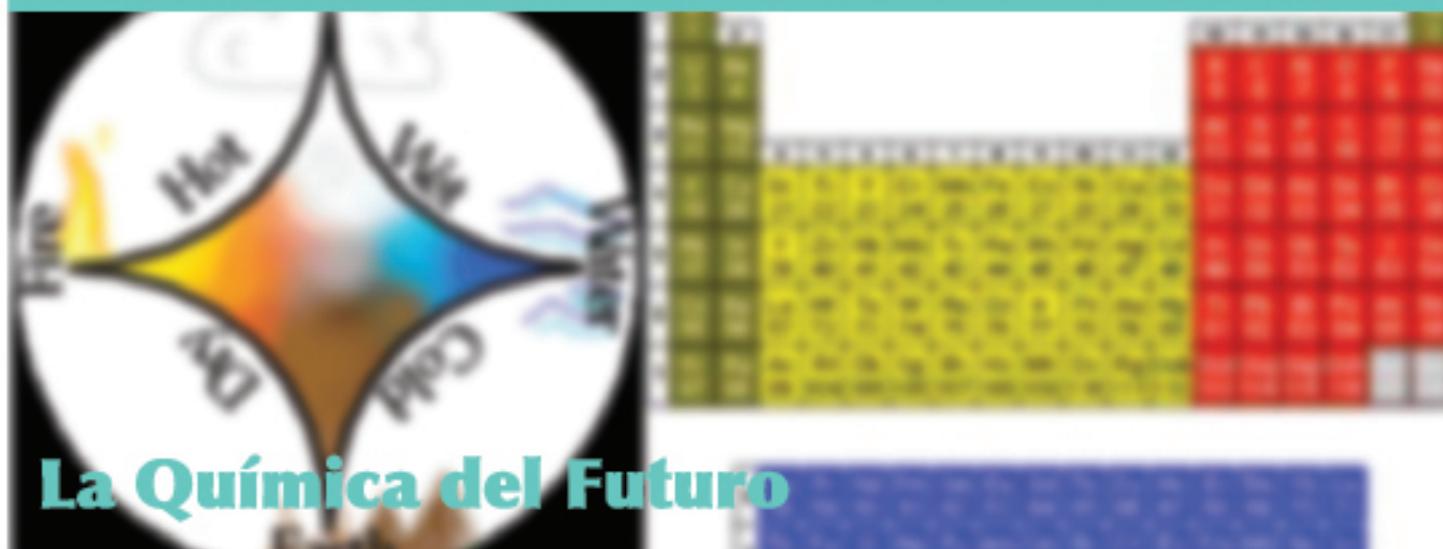
Sede LALCEC (Araoz 2380 - C.A.B.A.)

BASES Y CONDICIONES

info@lalcec.org.ar

www.lalcec.org.ar

De los cuatro elementos aristotélicos a la moderna Tabla Periódica de los Elementos



José A. Olabe^{a,b} y Miguel A. Blesa^{c,d}

^aDepartamento de Química Inorgánica y Analítica e INQUIMAE, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA

olabe@qi.fcen.uba.ar

^bCONICET

^cGerencia Química, Comisión Nacional de Energía Atómica

miblesa@cnea.gov.ar

^dInstituto de Investigación e Ingeniería Ambiental, UNSAM

Este documento fue confeccionado por M.A. Blesa y J.A. Olabe por pedido de la Asociación Argentina de Investigación Fisicoquímica (AAIFQ), como parte de las actividades para acompañar en 2011 al Año Internacional de la Química. El documento contó con aportes de numerosos colegas: S. Aldabe-Bilmes, P. Aramendía, J. Chessa de Silber, H.R. Corti, D. Estrín, J.C. Ferrero, R. Fernández Prini, M. Folquer, N.E. Katz, E. Leiva, V. A. Macagno, E. Marceca, D. Murgida, G. Narda, A. Olivieri, J.C. Pedregosa, J.C. Podestá, R. Requejo, R. Salvarezza, G. Soler-Illia. Algunas secciones fueron redactadas por estos colegas, lo que se reconoce en las mismas. Las opiniones vertidas son sin embargo responsabilidad exclusiva de los dos autores. Se reproduce con leves modificaciones en Ciencia e Investigación por autorización de la AAIFQ.

Este Documento realiza una evaluación de la situación actual de la Química en la Argentina en 2011, y trata de identificar las líneas más relevantes de investigación y desarrollo. Para ello describe los profundos cambios que ha producido la aparición, como tema de la disciplina, de los sistemas supramoleculares, organizados y nanoestructurados. También pone énfasis en la interrelación entre la Química y otras disciplinas hermanas, como la Física y la Biología, y en la necesidad de incorporar también análisis que vienen de las ciencias sociales, en áreas como la Química

Ambiental. Se describen en más detalle algunos de los temas de investigación actuales, para después presentar algunas de las características institucionales de la Química en la Argentina y discutir el rol que juega la enseñanza de la ciencia

La química, omnipresente e imposible de encontrar, opera en todas partes, y en todas partes está subordinada a cuestiones, problemas, intereses o técnicas que no le pertenecen en propiedad y, además, es víctima de vicisitudes contemporáneas del concepto de progreso industrial. Hija de una madre desvergonzada, la alquimia, consiguió dar una imagen de sí misma seria, moral, responsable, invocando su utilidad social y su interés económico. Ahora bien, todas estas proezas industriales, agrícolas o médicas que parecían asegurarle a la química un valor positivo, se vuelven hoy en su contra y la hacen sumamente vulnerable. La química de los profesores enarbolaba con orgullo un blasón de doble faz: ciencia pura, al servicio del conocimiento desinteresado, y ciencia aplicada, al servicio de la humanidad. Pero en la

actualidad todo sucede como si la pureza fuera un rasgo exclusivo de la física. Considerada más útil para la vida que para la mente, según una expresión de Bachelard, la química se presenta como objetivo escogido de las controversias políticas y sociales a propósito de los valores de la industria y del progreso. Catástrofes como la de Bhopal (3500 muertos, centenares de millares de personas irreversiblemente minusválidas), lluvias ácidas, gases CFC que destruyen la capa de ozono, fertilizantes con nitrato o pesticidas que envenenan las capas freáticas, residuos industriales peligrosos, todo esto es química.

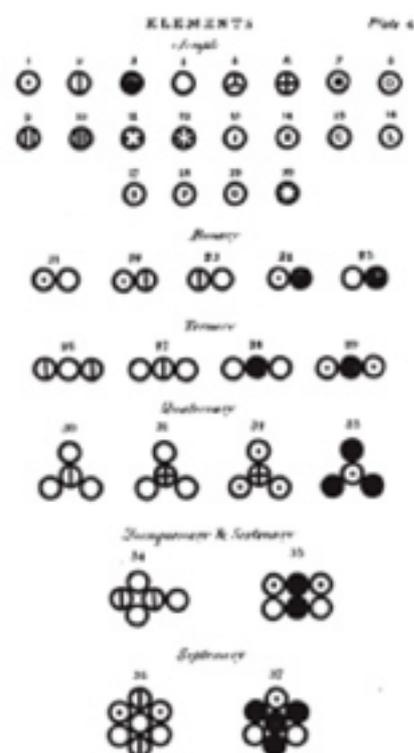
B. Bensaunde-Vincent e I. Stengers, Qué es la Química

Las fronteras del Conocimiento en Química

1.1. Más allá de la molécula

La Química ha ocupado un lugar central entre las llamadas Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, con una identidad vinculada a la preparación (síntesis) y a la caracterización de sustancias, estén ellas presentes en la naturaleza o bien sean generadas en el laboratorio. Los químicos abordan a las sustancias en constante transformación, buscando controlar esos procesos de cambio. Así, la Química contribuye a satisfacer necesidades vitales, a través de la utilización y transformación de los recursos naturales. Es por eso que ella ya estaba implícita en actividades ancestrales, como la metalurgia. También en nuestra América las aplicaciones de la Química anteceden a su desarrollo como ciencia estructurada, a través de diversas actividades en las civilizaciones precolombinas. En la fase colonial aparece la explotación minera, que constituyó una actividad central de la conquista, y que ya entonces prefigura la relación entre la Química y la necesidad de controlar los daños ambientales de la actividad productiva. Con las diferencias del caso, el debate acerca de ese tema particular continúa impregnando nuestra actualidad.

La centralidad de la Química como disciplina se ha sustentado históricamente en el marco de la estructuración jerárquica de las Ciencias, con la Física en su base y la Biología en su cima, dentro de un sistema de interacciones fuertes entre ellas. También de esta manera puede apreciarse el surgimiento y desarrollo de la Química en nuestro país, con una fuerte inserción personal e institucional de los físicos, farmacéuticos y médicos. La Historia de la Química en la Argentina muestra en el siglo XIX los comienzos de los estudios sistemáticos de nivel universitario y la creación de Academias y Sociedades Científicas. Su importancia se desarrolla notoriamente en el siglo XX con su inserción en los ámbitos de la Universidad, la Ciencia y la Industria. Aunque su presencia domina inicialmente en Buenos Aires, Córdoba y La Plata, se extiende luego a todo el país, sobre todo desde la segunda mitad del siglo XX.¹



INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY

Recommendations on Organic & Biochemical Nomenclature, Symbols & Terminology etc.

<http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>

World Wide Web material prepared by G. P. Moss
 School of Biological and Chemical Sciences, Queen Mary University of London,
 Mile End Road, London, E1 4NS, UK
 g.p.moss@qmul.ac.uk

If the table below is unusable
 check the button
 for an alternative presentation

To search the database [click here](#).

[What's Here and What's New](#)

[Changes to Published Documents for World Wide Web Presentation](#)

[Main IUPAC Home Page](#)

Full text of IUPAC Recommendations

[Glossary of Organic Class Names](#)

[Glossary of Terms in Physical Organic Chemistry](#)

[Basic Terminology of Stereochemistry](#)

[Hantzsch-Widman Nomenclature for Heteromonocyclic Rings](#)

[Non-standard Valence States \(Lambda Convention\)](#)

[Cyclic compounds with contiguous formal double bonds \(delta Convention\)](#)

[Fused Ring Nomenclature](#)

[Phase Nomenclature](#)

[Phase Nomenclature Part II](#)

[Glossary of Terms in Bioorganic Chemistry](#)

[Glossary of Medicinal Chemistry Terms](#)

[Nomenclature of Isotopically Modified Compounds \(Section II\)](#)

[IUPAC Atomic Weights](#)

and [Periodic Table](#)
 (2009 values) **New December 2010**

[Van Buren nomenclature](#)

[Spiro nomenclature](#)

[Natural product nomenclature \(Section I\)](#)

[Radicals, Ions & Radical Ion Nomenclature](#)

[Gold Book](#)
 IUPAC definitions of terms

[Fullerenes nomenclature](#)

[Numbering of Fullerenes](#)

[Numerical Terms to 9999](#)

[Regular single strand organic polymers nomenclature](#)

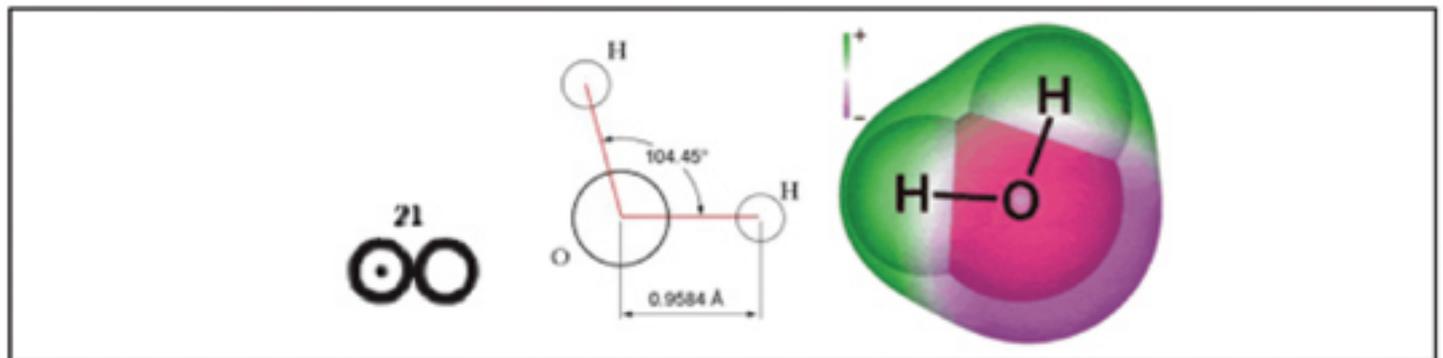
Watch this space

Recommendations by IUPAC and IUBMB

La nomenclatura química a lo largo del tiempo: los símbolos alquímicos, la nomenclatura de Dalton (ca. 1808), y la página web de nomenclatura de la International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC)

El surgimiento de la Química como ciencia puede vincularse claramente con la Teoría Atómica y Molecular, en el marco de precisar la idea de "sustancia". La molécula fue el concepto unificador que permitió sistematizar los conceptos de la Química, y la naturaleza de la unión química fue su centro de atención, lo cual condujo al establecimiento de la Química como una disciplina racional y no meramente descriptiva. En los estudios químicos básicos el papel extremadamente central que jugó el concepto de molécula llevó a enfatizar el estudio de sistemas simples (gases y líquidos), mientras que se carecía de herramientas teóricas y experimentales para encarar adecuadamente el estudio de la materia condensada en su totalidad.

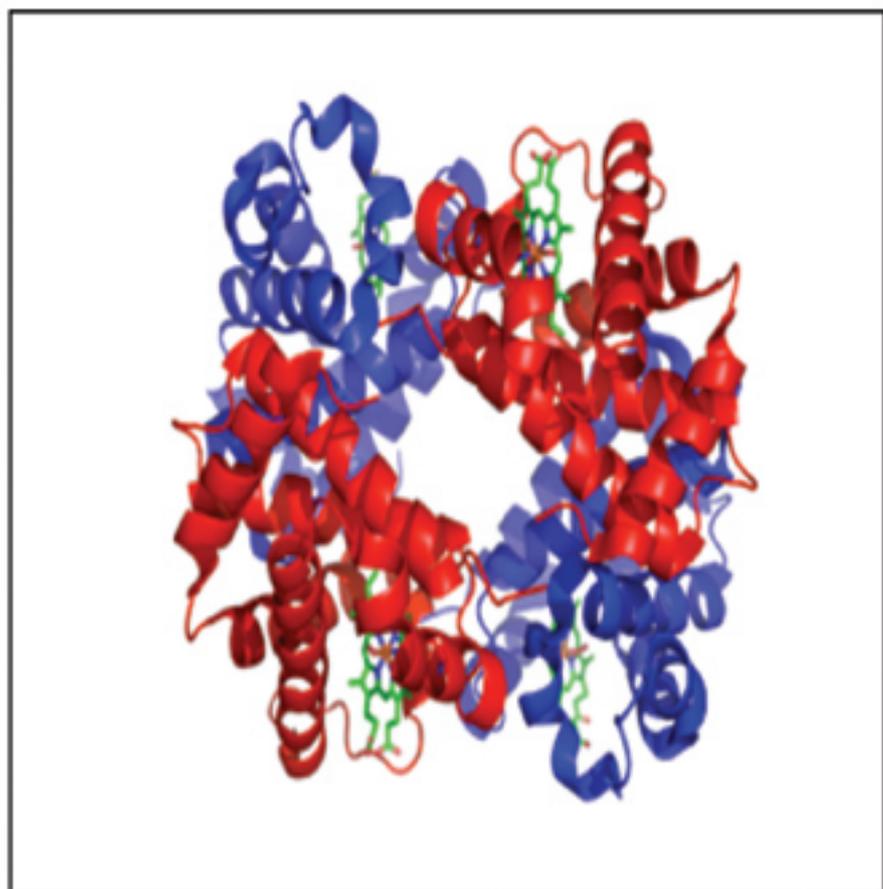
Poco lugar había para el estudio de los metales y de los sólidos moleculares y covalentes. Sólo escapaba a esta exclusión la descripción de los sólidos iónicos. Subyacente en el enfoque descrito estaba el énfasis puesto en las interacciones fuertes, como las uniones covalente o iónica. La extensión a la descripción de los sólidos covalentes tridimensionales y de los metales, si bien fuera del marco de los cursos básicos, pudo hacerse manteniendo el enfoque en esas interacciones fuertes. El estudio de las mismas sigue siendo central en Química, pero ahora no restringido al marco "molecular".



La imagen de la molécula de agua, desde Dalton hasta la descripción actual de la distribución de densidad electrónica

El advenimiento de la llamada Química Supramolecular se basa en el reconocimiento y la manipulación de las fuerzas intermoleculares no-covalentes. Se comienzan a estudiar y a usar sistemas de complejidad creciente, que contienen estructuras polimoleculares, en los que las unidades moleculares se vinculan por interacciones "débiles". Estos sistemas forman la base de procesos de reconocimiento altamente específico, reactividad, transporte, regulación, etc., de importancia central en la Biología, tales como la unión de un sustrato a una proteína receptora, reacciones enzimáticas, ordenamiento de complejos multiproteicos, asociaciones inmunológicas antígeno-anticuerpo, lectura intermolecular, translación y transcripción del código genético, regulación de la expresión génica por proteínas DNA-enlazantes, entrada de un virus a una célula,

señalización por neurotransmisores, reconocimiento celular, etc. No obstante, la Química Supramolecular no restringe sus miras a la biología. Se tiende al diseño de sistemas artificiales, abióticos, capaces de ejecutar procesos de alta eficiencia y selectividad, lo cual requiere de la correcta manipulación de aspectos energéticos y estereoquímicos propios de las fuerzas no-covalentes, intermoleculares (electrostáticas, enlaces de H, van der Waals, etc), en el marco de una arquitectura molecular definida. Este nuevo paradigma tiene sus raíces en conceptos no tan nuevos como el de receptor, fijación selectiva, reconocimiento molecular y finalmente, coordinación (Werner). En relación a esta última, la química supramolecular puede concebirse como una generalización de la química de coordinación.²



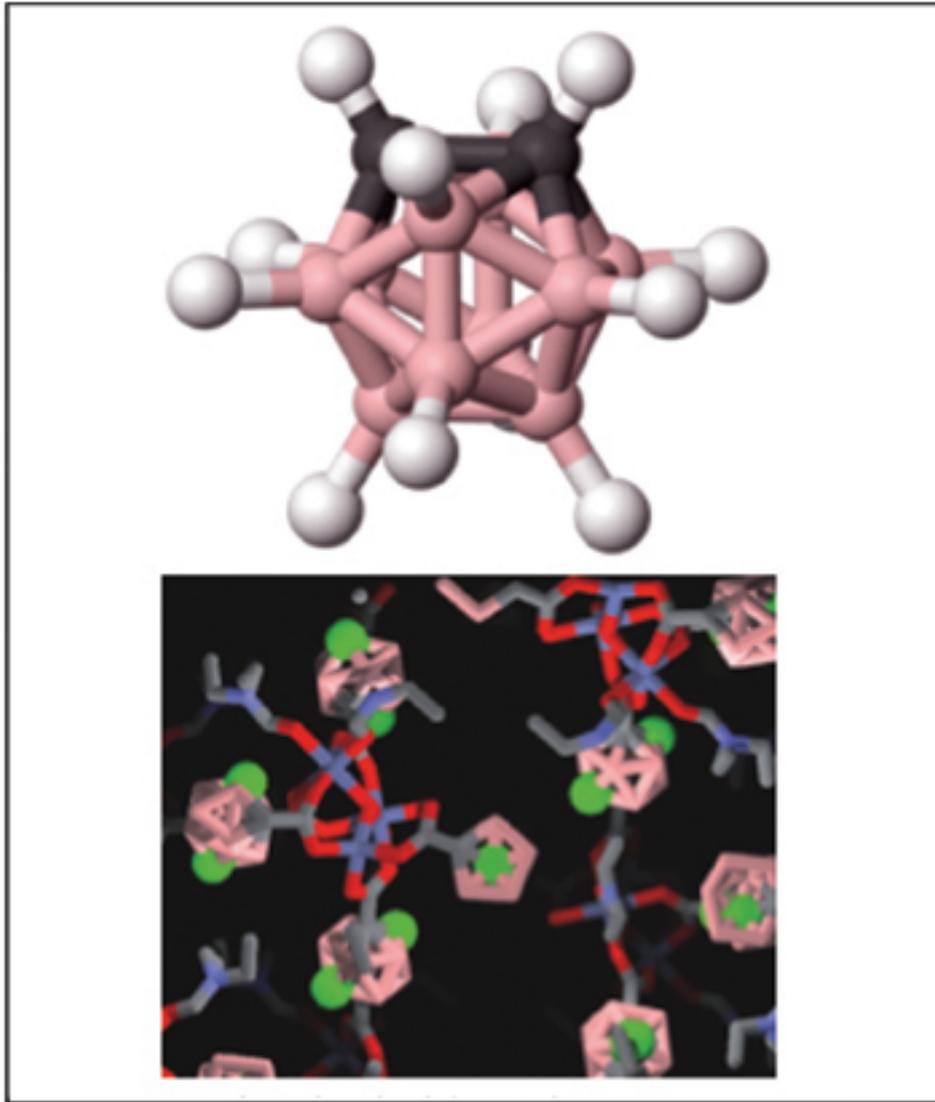
Una biomolécula típica: la hemoglobina. Está formada por cuatro subunidades, cada una de las cuales contiene una proteína plegada adecuadamente, y unida a un grupo hemo, que es el capaz de unirse reversiblemente al oxígeno para su transporte. La estructura global, y su funcionalidad, depende de interacciones de variada magnitud y tipo

La incorporación de las interacciones débiles ha sido central en la evolución más reciente de la Química. Hacia fines del siglo XX ya existían herramientas experimentales y teóricas poderosas, que permitieron enfocar los estudios en sistemas más complejos con ese tipo de interacciones. Los estudios de la materia blanda, de los sistemas organizados, de la bioquímica molecular, de los nanomateriales híbridos, avanzaron a pasos agigantados.

Se abría así el paso a lo que J.M. Lehn (premio Nobel en 1987) llamara una suerte de sociología molecular. Con esta apertura de campo, se está acentuando la fuerte impronta de la Física, por un lado, y de la Biología por otro, lo que provoca que las disciplinas tradicionales, la Química Física (o Física Química) y la Bioquímica cobren una dimensión mucho mayor. Este fuerte impulso de la Química, paradójicamente, parece insinuar un cierto desdibujamiento de la disciplina.



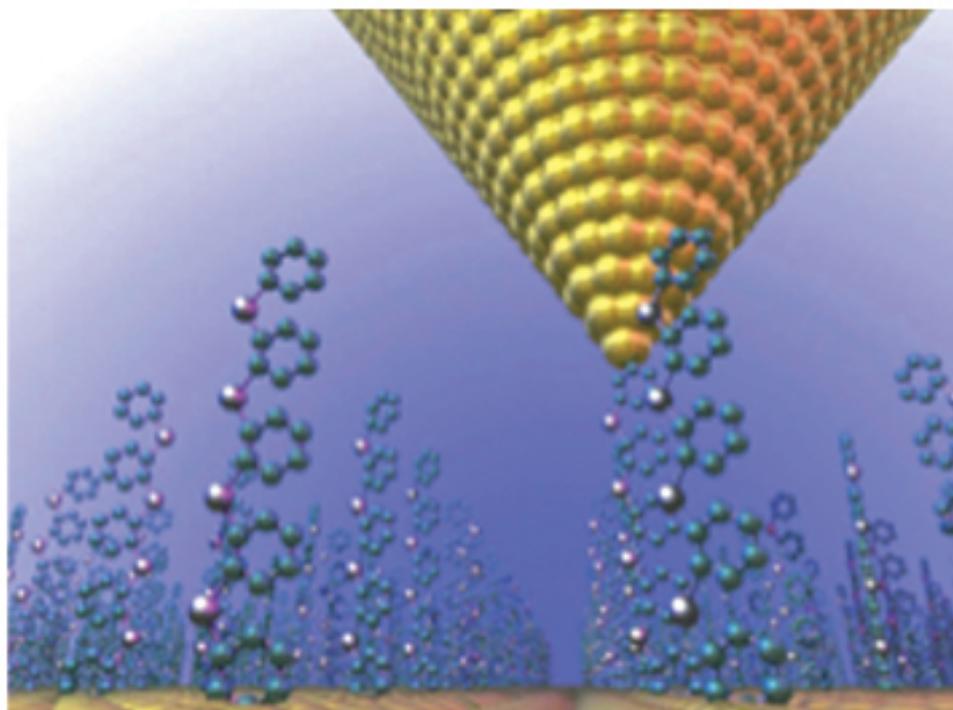
Jean-Marie Lehn



A partir de un carborano (ver izquierda), se han construido metalocarboranos sustituyendo unidades BH por metales como Sc o Ti, y estos metales pueden interactuar con H₂ fijándolo con una energía del orden de 0,4 eV, energía intermedia entre la de una unión química típica y la de una interacción intermolecular. La arquitectura del material de la izquierda presenta la porosidad necesaria para fijar el H₂, y la rigidez para evitar que la estructura colapse [Singh et al., J Am Chem Soc (2010) doi: 10.1021/ja104544s]. Se ponen pues en juego energías de interacción de diversa magnitud en busca de una funcionalidad definida

La Química, como tecnología, ha estado presente desde los orígenes de las civilizaciones. La comprensión racional basada en el concepto de molécula fue generando una cierta divergencia, que estableció diferencias entre las Ciencias Químicas y la Tecnología Química, enfocada en sus aplicaciones. Todavía en la década de 1960/70, se contraponían inadecuadamente esos dos aspectos. Aunque no faltan menciones recurrentes actuales, este debate está bastante superado, siendo evidente que la dicotomía entre fundamentos y aplicaciones ha ido desapareciendo. Hoy está muy enfatizada la idea de que la actividad científica responda a la solución de problemas, más que a una motivación restringida por estudiar mejor tal o cual molécula o reacción. Está claro sin embargo que en la actualidad sin base científica no hay posibilidad de desarrollar nuevas aplicaciones de la Quí-

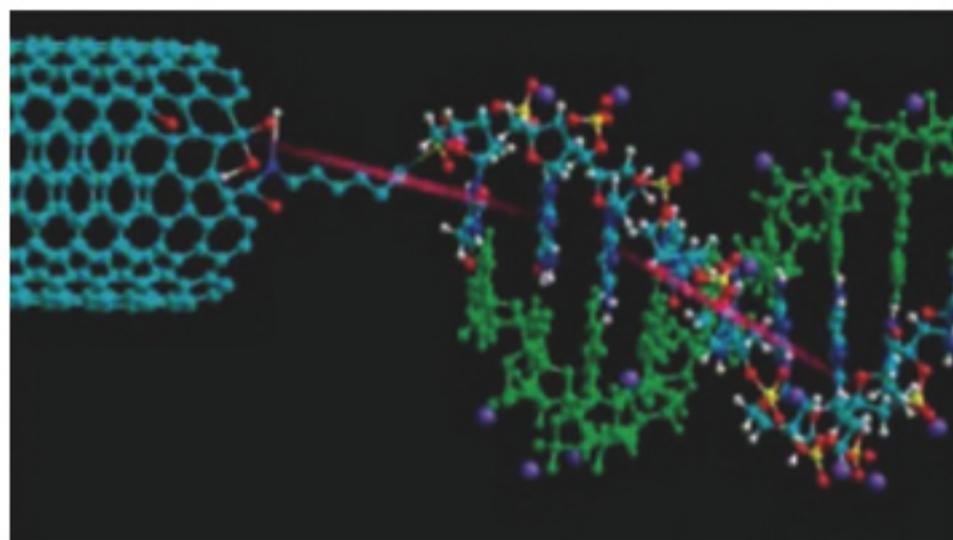
mica. Es en el marco de la superación de estas barreras metodológicas que se ha propuesto el surgimiento de dos campos científicos, que podríamos llamar Ciencias Tecnológicas Integradas, en los que desaparecen las fronteras entre investigación básica y aplicaciones: las Ciencias de los Materiales y las Ciencias Biomoleculares, las que, además, se solapan en más de un ejemplo. La Química juega un papel fundamental en estos campos, ahora entremezclada con la Física y con la Biología. Lo dicho no debe ocultar que la problemática y la terminología acerca de la Ciencia, la Tecnología y la Innovación siguen vigentes, y admiten debates acerca de los enfoques personales e institucionales para encarar acciones en cada uno de esos ámbitos, dentro de un marco sistémico.



Cadenas de polifeniléter autoensambladas, y ubicadas entre dos electrodos metálicos que pueden dar origen a dispositivos termoléctricos muy eficientes basados en efectos cuánticos [Bergfield et al., ACS Nano (2010) 4 (9), 5314]

También con la aplicación como criterio, las Ciencias Ambientales (en el sentido restringido de Ciencias Físicas y Naturales) deberían agregarse a las otras dos ciencias tecnológicas integradas.

En ellas, la Química reúne su aporte con los de la Física, la Biología (no necesariamente molecular) y la Geología.



Unión covalente entre sssADN con amino terminal y un nanotubo de carbono de pared simple, con un espaciador (-CH₂-) [Roy, S., et al., Nano Lett (2008) 8 (1), 26]

Los intentos por adecuar los Planes de Estudios de Química a estas nuevas realidades han sido hasta ahora modestos, especialmente en la Argentina, donde los planes de estudio se caracterizan por su rigidez. La propuesta del Foro de Decanos de Química, discutida más adelante, si bien es razonablemente flexible, también acepta lecturas que pueden reforzar esa rigidez. Cabe es-

perar en el futuro próximo cambios cada vez más drásticos en los textos de Química Básica, que apunten a la vinculación de los conceptos fundamentales con las aplicaciones en esas tres ciencias integradas, así como a una estructuración más moderna de las organizaciones docentes y científicas (Departamentos e Institutos). La tradicional estructura interna de la Química en sus

cinco ramas "clásicas" (Química Física, Inorgánica, Orgánica, Analítica y Biológica), a veces calificada como ya obsoleta en función del mezclamiento que caracteriza a las mismas en la actualidad, sigue y probablemente seguirá aún vigente. Más importante que discutir dicha estructuración es garantizar un enfoque moderno en cada una de ellas. Claro que los planes de estudio requieren la inserción de "nuevos" abordajes docentes (Química Teórica o Computacional, de Macromoléculas, de Materiales, etc.) para superar los tratamientos en dichas materias troncales como compartimientos excesivamente estancos. Es importante también reivindicar el enfoque químico en la visión del mundo material, ya que el mismo, diferente de, por ejemplo, el enfoque físico o biológico, es único e insustituible.

Con toda la magnitud que implican los cambios delineados hasta aquí, los mismos no agotan la descripción de las características actuales de las Ciencias Químicas. Se ha descrito también la emergencia de campos de estudio que incorporan dimensiones sociales, políticas y económicas (metaciencias). Las Ciencias Ambientales, en su sentido más amplio, constituyen el mejor ejemplo, dentro de la cual se destaca la Química Verde. Se ha sugerido que la Química puede transformarse en una ciencia de apoyo de la biología y la física, cuya misión fundamental sería la síntesis y el análisis de los sistemas de interés para esas disciplinas. Si bien es posible una "pérdida de identidad" en el marco de una visión integral de las Ciencias, el papel de la Química seguirá siendo tan central como el de las otras disciplinas fácticas. Irá incrementando el trabajo en equipos interdisciplinarios, con investigadores de diversas formaciones de grado; en ese contexto, el rol de los químicos con sus específicas habilidades para el diseño, la síntesis de nuevos compuestos con propiedades deseadas, y su capacidad para investigar las transformaciones materiales en escalas de espacio y tiempo inimaginables hasta hace poco, han de resultar más que necesarias, por no decir imprescindibles. Cabe aquí valorar muy especialmente los modernos requerimientos para la Química Analítica, que demuestran su pujanza. Ya antes que existiera el concepto de molécula o incluso la noción de conservación de la masa, exis-

tían los testadores o *assayers*, capaces de certificar la legitimidad de un objeto de plata u oro. En la actualidad, hacer Química Analítica significa ser capaz de caracterizar muchas muestras complejas, y evaluar los resultados con herramientas quimiométricas. En paralelo, se vuelve imprescindible contar con estructuras bien montadas capaces de enfrentar los requerimientos de todo tipo de la sociedad sobre materiales, alimentos, ambiente, etc. Dentro del propio campo disciplinar, sigue siendo posible visualizar a la Química como la ciencia del cambio, la disciplina que estudia cómo y por qué se reordenan los átomos en moléculas o en estructuras supramoleculares. Si antes era posible sólo manipular la materia macroscópicamente, es posible en la actualidad estudiar ensambles de átomos (desde moléculas aisladas hasta arreglos supramoleculares), caracterizar sus reacciones y sus propiedades. Si bien el comportamiento molecular ha perdido su papel muy central, las interacciones entre átomos, dentro y fuera de moléculas, sigue siendo el hilo conductor de la Química: los átomos en superficies, en macromoléculas biológicas, en nanomateriales, en la materia blanda, interactúan con sus átomos vecinos a través de diversas fuerzas de interacción. La comprensión de las funciones de energía potencial que describen estas interacciones sigue siendo un tema central de la Química. No se ha agotado sin embargo el estudio de sistemas moleculares, ni los avances en los campos tradicionales de la Química, como la síntesis de nuevos compuestos, o la cinética química. En el primer caso queda muy claro que se entremezcla cada vez más la frontera de la Química Orgánica y de la Química Inorgánica, cuya demarcación no puede ya basarse en su relevancia o no con los procesos de la vida. Nótese por ejemplo el gran desarrollo de la química de los metales de transición, común a ambas "subdisciplinas" (que incluye la Química Organometálica, y también muchos aspectos de la Química Bioinorgánica). Estos abordajes únicos e integrados son imprescindibles también para las ciencias integradas, en el objetivo de mejorar los procesos industriales, particularmente los catalíticos, o para entender la estructura y funciones de buena parte de las biomoléculas. En el caso de la Cinética Química se advierte una importante modificación del

concepto de compuesto químico. En los albores de la Química, los compuestos estaban definidos por su composición. El advenimiento de la Química Estructural permitió distinguir entre isómeros. En la actualidad los progresos en la instrumentación permiten caracterizar las propiedades químicas de moléculas individuales en estados electrónicos y vibracionales específicos, que generan una nueva "química de los estados excitados". Se ha abierto un panorama de cruciales desafíos que lindan con utopías, relacionados con la necesidad de abordar el manejo de fuentes de generación y almacenamiento de energía más asociadas con el aprovechamiento de la luz solar.

Así se fortalecen las tendencias en la investigación química vinculadas con la imitación inteligente de los procesos naturales bioquímicos: la electrónica molecular, conducente al almacenamiento de información a nivel molecular, la fotosíntesis artificial, y la dilucidación detallada de los mecanismos que operan en los procesos vitales.

Un ejemplo interesante e importante de la dificul-

tad actual de "limitar" a disciplinas como la Química o la Física de materia condensada, ha sido el otorgamiento del Premio Nobel de Física a A. Gelm y a K. Novoselov, dos físicos rusos que trabajan en el Reino Unido, "for groundbreaking experiments regarding the two-dimensional material graphene".

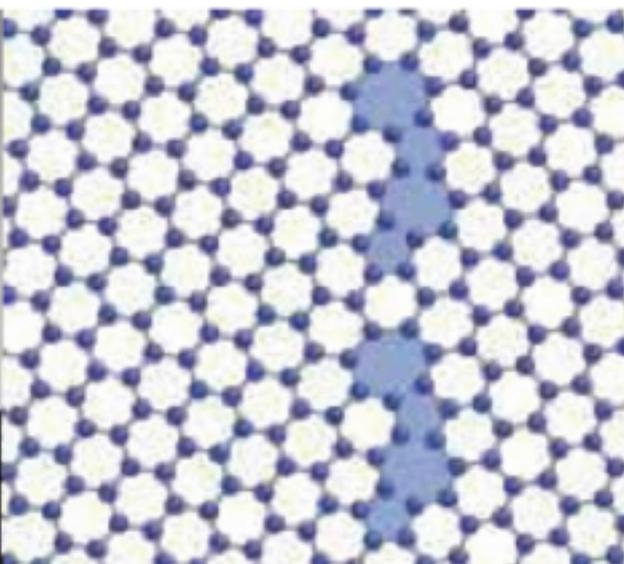
En las secciones siguientes describiremos brevemente algunas de las áreas de desarrollo reciente en la Química. La selección refleja nuestro criterio de cuáles son las áreas que vale la pena recalcar, y es por lo tanto en buena medida arbitraria. Visualizamos que este sector del documento puede enriquecerse en el futuro con aportes sobre otros temas provenientes de los distintos grupos de investigación de la Argentina.



Andre Gelm



Konstantin Novoselov



El grafeno, con sus defectos

Cuadro 1. El Premio Nobel de Química

El Premio Nobel en Química se creó por una disposición del testamento de Alfred Nobel, cuando éste murió en 1896. El premio fue otorgado en 1901 por primera vez, y desde entonces anualmente, con ocho excepciones. Se otorgó pues en 102 ocasiones; en 22 casos fue compartido por dos científicos, y en 18 ocasiones por tres. De esta forma, el total de laureados hasta 2010 es de 159, ya que Frederick Sanger recibió el premio en dos ocasiones (1958 y 1980). A esta lista deberá agregarse lo que resulte del anuncio que se hará el 5 de octubre, cuando se anuncie(n) el o los ganadores de 2011.



El primer laureado fue Jacobus H. van't Hoff (primero desde la izquierda) "en reconocimiento de los servicios extraordinarios que él ha brindado por su descubrimiento de las leyes de la dinámica química y presión osmótica en soluciones". Los últimos tres, en 2010, fueron Richard F. Heck (segundo desde la izquierda), Ei-ichi Negishi (tercero desde la izquierda) y Akira Suzuki (último desde la izquierda) "por acoplamientos catalizados por paladio en síntesis orgánica". El recorrido de temas y logros premiados constituye una excelente aproximación a la comprensión de qué es la Química.

1.2. Las nuevas herramientas experimentales (E. Marceca, D. Murgida)

En los próximos años, la práctica de la Química será especialmente excitante y cada vez más interdisciplinaria. El desarrollo científico y tecnológico espectacular al que asistimos a lo largo del siglo XX nos coloca hoy frente a herramientas experimentales de manipulación y caracterización de la materia que pocos años antes hubieran parecido salidas de una novela de ciencia ficción. Basta pensar en el impacto que ha tenido en las últimas décadas la incorporación de la electrónica y la computación modernas al control del instru-

mental químico convencional, así como en el explosivo incremento de la capacidad de cálculo que permitió el desarrollo de la química computacional. Viejas ideas de la química, la física y la biología que en su momento eran técnicamente inviables, pudieron plasmarse en las nuevas tecnologías dando lugar a instrumentos cada vez más potentes, confiables y accesibles, que permitieron abordar nuevos aspectos y escalas de observación de la química hasta entonces inexplorados, generando a su vez nuevas demandas instrumentales e interrogantes. Estos desarrollos tecnológicos, conjuntamente con los enormes pasos dados en el área de la síntesis química de sistemas su-

pramoleculares y con las poderosas herramientas que aporta la biología molecular, brindan la posibilidad de que en la actualidad se puedan describir a nivel atómico/molecular fenómenos químicos y biológicos de gran complejidad. Este círculo virtuoso ha catalizado por ejemplo el surgimiento y desarrollo de las nanociencias y nanotecnologías, donde la Química y la Física ocupan roles centra-

les, con límites cada vez más difusos entre ellas.

Hoy es posible crear, manipular y estudiar objetos de tamaño nanométrico empleando posicionadores e instrumentos de observación que cuentan con resolución espacial atómica



Ernst Ruska "por su trabajo fundamental en óptica de electrones, y por el diseño del primer microscopio electrónico", Gerd Binnig y Heinrich Rohrer "por su diseño del microscopio de barrido de efecto túnel" recibieron el Premio Nobel de Física en 1986

Aunque las ideas seminales que dieron fundamento a estas disciplinas fueron enunciadas por Richard Feynman en 1959, las primeras imágenes con resolución nanométrica no se obtuvieron hasta fines de los años 70 con la invención de la microscopía de efecto túnel (STM), que fue destacada con el premio Nobel de Física de 1986. Hoy en día, esta técnica permite caracterizar la topografía de superficies, y su aplicación es particularmente útil para el desarrollo del área de la electrónica molecular, en la cual moléculas individuales cumplen las funciones de los componentes electrónicos.

Algunas de las limitaciones originales de la STM fueron rápidamente superadas por la microscopía de fuerza atómica (AFM) que actualmente permite obtener imágenes de superficies con resolución atómica en forma prácticamente rutinaria. Las técnicas STM y AFM no han perdido vigencia y de hecho continúan incorporando innovaciones técnicas. Sin embargo, la herramienta más versátil a la hora de caracterizar la topología de una estructura nanométrica, es la microscopía electrónica en sus distintas versiones (TEM, SEM, REM, STEM, LVEM). Basados en un desarrollo original de 1932, los microscopios electrónicos actuales son capa-

ces de alcanzar resoluciones superiores a 0,5 Å, y de producir mapas químicos de alta resolución espacial por acoplamiento a métodos de análisis elemental, como son los casos de las técnicas EDXS y EELS.

Así como los desarrollos de las microscopías STM, AFM, TEM y SEM constituyeron hitos fundamentales que impulsaron el desarrollo de las nanociencias, otras técnicas hicieron el camino inverso beneficiándose de los logros de la nanotecnología. Este es el caso por ejemplo de la espectroscopía Raman intensificada por efecto de superficies (SER). Desde hace aproximadamente 15 años una fracción de los esfuerzos de la nanotecnología se centran en desarrollar nanoestructuras metálicas ordenadas y reproducibles capaces de intensificar las señales. La espectroscopía Raman ha incorporado estos elementos alcanzando niveles de detección de moléculas únicas, a pesar de ser una técnica intrínsecamente poco sensible. Esto incluye el acoplamiento de microscopios confocales Raman con microscopios STM o AFM, en los cuales la punta (tip) constituye a su vez el sustrato metálico que provee la intensificación SER. Este desarrollo ha permitido contar con una herramienta robusta capaz de aportar si-

multáneamente información espectroscópica y topográfica con alta resolución espacial y temporal. La segunda mitad del siglo XX ha sido testigo de un impresionante progreso respecto a la investigación de las reacciones químicas a una escala temporal ultracorta. El puntapié inicial puede asignarse a G. Porter, quien desarrolló la técnica de fotólisis flash con resolución de milisegundos en 1949, y por lo cual recibió el premio Nobel de Química de 1967. El posterior desarrollo de láseres de pulsos ultracortos permitió ir mejorando paulatinamente la resolución temporal de este tipo de experimentos hasta llegar a la "femtoquímica" en la década de los 80, por lo que Zewail recibió el

premio Nobel de Química en 1999. El concepto original de la fotólisis flash se ha ido ampliando y adaptando a distintos tipos de sistemas, de forma tal que en la actualidad existen formas alternativas de iniciar las reacciones, tales como inyección rápida de carga, saltos de temperatura y saltos de potencial (su desarrollo llevó a que M. Eigen compartiera el Premio Nobel de Química en 1967) así como métodos alternativos de detección resuelta en el tiempo tales como espectroscopía IR, Raman, fluorescencia, EPR, etc.



Ahmed H. Zewail

George Porter

Manfred Eigen

En los últimos años los físicos R.J. Glauber, J.L. Hall y T.W. Hänsch (premio Nobel de Física 2005) han liderado la ruptura de la siguiente barrera temporal: el attosegundo. Si bien las técnicas de attosegundo se encuentran en su infancia y continúan confinadas al reino de la Física, el nacimiento de la attoquímica pa-

rece cada vez más cercano. A diferencia de los anteriores saltos producidos al momento de dominar la escala temporal, este implica un verdadero cambio de paradigma debido a la aparición de fenómenos cuánticos usualmente despreciables en una escala temporal más larga.



Roy J. Glauber

John L. Hall

Theodor W. Hänsch

Las hoy consideradas técnicas tradicionales de caracterización de la química orgánica e inorgánica, tales como la resonancia magnética nuclear (RMN) o la espectrometría de masas (MS) también han sufrido una evolución espectacular, fun-

damentalmente durante la segunda mitad del siglo XX. Clara indicación de esto es que la espectroscopía de RMN ha dado origen a dos premios Nobel de Física (1944 y 1952) y dos de Química (1991 y 2002).



*Isidor Isaac Raabi
(1944)*

*Felix Bloch
(1952)*

*Edward Mills Purcell
(1952)*

Los laureados en Física por sus trabajos sobre RMN

El desarrollo de métodos pulsados (FT) y de técnicas multidimensionales, el reemplazo de magnetos convencionales por superconductores, el desarrollo de técnicas para estado sólido y el diseño de sondas para distintos elementos y condiciones experimentales constituyen hitos en el desarrollo de la técnica. Hoy es posible elucidar mediante RMN la estructura completa de macromoléculas tales como proteínas, así como estudiar su dinámica e interacciones transitorias con otras moléculas en una amplia escala temporal, sin excluirse de estos estudios a las moléculas paramagnéticas como ocurría anteriormente. En el año 2009 se instaló el primer espectrómetro comercial

de 1 GHz, algo impensable pocos años antes. Otras técnicas magnéticas relacionadas, tales como la resonancia paramagnética electrónica (EPR) también han evolucionado notablemente con el desarrollo de métodos pulsados (por ejemplo, el método ENDOR), tornándose herramientas de gran utilidad en la Química Inorgánica, Bioinorgánica, Biofísicoquímica y la Química de radicales, que permiten entre otras cosas monitorear distancias y movimientos sutiles ocurridos en el interior de macromoléculas biológicas. En la actualidad existen equipos de EPR comerciales de hasta 263 GHz.



Richard Ernst (1991), y Kurt Wüthrich (2002), laureados en química por sus trabajos en RMN. Wüthrich compartió el premio con otros laureados que desarrollaron otros métodos de caracterización estructural de biomoléculas (Fenn y Tanaka, ver más abajo)



Joseph John Thomson Francis William Aston

La espectrometría de masa (MS) fue originalmente desarrollada por los físicos J.J. Thomson y F.W. Aston (premios Nobel de Física de 1906 y de Química en 1922, respectivamente), y rápidamente se convirtió en una herramienta fundamental para la Química. En los años 50, la técnica ya se aplicaba al reconocimiento de pequeñas moléculas orgánicas, basándose en los patrones de fragmentación generados por impacto electrónico.

En esa misma época, se implementaron los análisis de masa por tiempo de vuelo (TOF) o utilizando filtros electrostáticos cuadrupolares, y posteriormente H. Dehmelt y W. Paul (premio Nobel de Física de 1989) desarrolla la trampa de iones, que constituye una herramienta fundamental de la espectrometría de masa moderna.



Hans G. Dehmelt

Wolfgang Paul

En los últimos 25 años, se han implementado nuevos métodos de ionización (por láser, química, por iones secundarios, por bombardeo con partículas, electrospray o ESI, desorción/ionización por láser empleando matrices o MALDI, etc.) que posibilitan el análisis de casi cualquier clase de compuesto empleando alguna variante de la espectrometría de masa, sin limitaciones en su masa molar, volatilidad, etc. En particular, las técnicas ESI y MALDI (premio Nobel de Química 2002 a J. B. Fenn y K. Tanaka) han introducido la espectrometría de masa en el mundo de la biología y la química biológica, produciendo un aporte revolucionario en la secuenciación y análisis de péptidos y proteínas, entre otras aplicaciones.



John B. Fenn

Koichi Tanaka

La espectrometría de masa se ha acoplado con éxito a diversas técnicas cromatográficas (CG-MS y LC-MS), posibilitando la resolución de mezclas complejas. En la actualidad, pueden disponerse en serie múltiples pasos de selección por masa (espectrometría de masa en tandem, o MSn), a través de lo cual se pueden identificar los componentes de mezclas complejas con asombrosa especificidad, realizar estudios estructurales de los mismos, resolver secuencias de biomoléculas poliméricas, cuantificar marcadores traza en matrices clínicas o medioambientales, etc. La espectrometría de masa también se emplea crecientemente en el campo del análisis elemental ultra-traza, acoplando espectrómetros de distinto tipo a fuentes de plasma (ICP-MS).

Finalmente, debemos mencionar el impacto creciente que tiene en distintas áreas de la Química el descubrimiento de la radiación sincrotrón en

1947. En la actualidad existen en el mundo cerca de 50 laboratorios de luz sincrotrón, mayoritariamente en EEUU y Europa; afortunadamente para los investigadores de nuestra región también hay uno en Campinas (Brasil). El rango de aplicaciones de estas facilidades es enorme e incluye distintas técnicas basadas en rayos X de gran utilidad en Química, tales como cristalografía de macromoléculas, EXAFS, XRF, XAS, XANES, SAXS, etc. Gracias a estas tecnologías hoy es posible realizar cristalografía resuelta en el tiempo de proteínas en escalas temporales de hasta picosegundos. Las aplicaciones de la radiación sincrotrón se extienden a todo el espectro electromagnético, permitiendo empujar los límites de sensibilidad de una cantidad de espectroscopias "convencionales" como por ejemplo la absorción infrarroja (FTIR).

1.3. El modelado teórico y la exploración experimental (D. Estrín)



Walter Kohn

John A. Pople

Por las contribuciones teóricas y por el vertiginoso desarrollo en las últimas décadas de computadoras cada vez más accesibles y potentes, las técnicas de simulación computacional han adquirido un rol cada vez más importante en diversas áreas de la química. Eso se ha visto reflejado en el premio Nobel de Química, otorgado en 1998 a dos científicos, J.A. Pople y W. Kohn, por sus contribuciones en esta área

Las técnicas de simulación computacional, o de modelado teórico en Química, hacen uso de modelos matemáticos que nos permiten entender las interacciones entre átomos. Estas interacciones se pueden racionalizar mediante el concepto de superficie de energía potencial, que es simplemente, la función que nos indica como varía la energía potencial de un conjunto de átomos, en función de sus posiciones en el espacio. Es posible describir esta superficie de energía potencial empleando diferentes tipos de modelos. Los modelos más precisos, están basados en las leyes de la Mecánica Cuántica. Estos modelos se pueden implementar en programas computacio-

nales, y existen actualmente diferentes programas accesibles a la comunidad científica e industrial. Son esenciales para describir fenómenos que involucren los electrones del sistema, como en reacciones químicas, o en fenómenos que involucren excitaciones electrónicas. La desventaja principal de los métodos basados en la Mecánica Cuántica está dada por la complejidad de las ecuaciones resultantes, pues los cálculos computacionales asociados son muy demandantes, y requieren de computadoras poderosas y/o de mucho tiempo de cómputo. Por otro lado, existen modelos más sencillos, basados en las leyes de la Física Clásica, que consideran las interaccio-

nes entre átomos describiéndolos en base a leyes simples, como la Ley de Coulomb. Estos modelos, conocidos como potenciales clásicos, o campos de fuerzas, son muchísimo menos demandantes desde un punto de vista computacional, hecho que permite que se puedan estudiar sistemas de miles de átomos, como por ejemplo, proteínas, o materiales. Estos métodos son especialmente adecuados para describir fenómenos que no involucren ruptura o formación de enlaces químicos. Esta limitación impide su uso en, por ejemplo, la descripción de procesos enzimáticos; en estos casos se recurre a modelos híbridos.

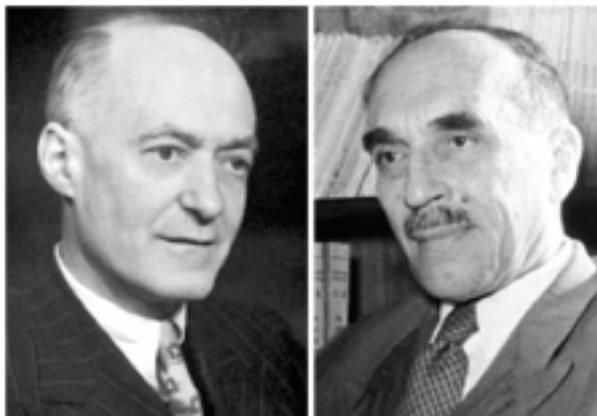
Una vez elegido el modelo de superficie de energía potencial, es posible responder a diversos interrogantes químicos. El caso más sencillo es la optimización de la geometría: la obtención de información estructural, como distancias entre átomos o ángulos, buscando los parámetros geométricos que minimicen la energía potencial. Otros interrogantes incluyen la variable tiempo, como en las simulaciones de dinámica molecular. Se busca aquí obtener la evolución temporal de las posiciones de los átomos que componen el sistema mediante el empleo de las ecuaciones de Newton. De esta manera, es posible incorporar a la simulación los movimientos atómicos a una dada temperatura, relacionados con la energía cinética del sistema. También se puede incluir el efecto de las fluctuaciones térmicas empleando el esquema de Monte Carlo. Mediante el empleo de estas estrategias se pueden estudiar con mucha precisión cambios químicos en fase gaseosa, como por ejemplo, procesos relevantes en química atmosférica. Por otro lado, también es posible estudiar pro-

piedades estructurales, espectroscópicas y reactividad de especies en solución, biomoléculas y materiales.

Las herramientas de modelado permiten racionalizar y explicar comportamientos observados experimentalmente. Esto permite diseñar sistemas nuevos o modular el comportamiento de los mismos. La simulación computacional también provee de herramientas predictivas, ya que permite estudiar sistemas en muchos casos inaccesibles o de difícil acceso experimental. En nuestro país contamos con una experiencia significativa en el área, tanto en lo referente al desarrollo y validación de metodologías, como así también en la aplicación de las mismas a diferentes áreas de la Química, con grupos de investigación activos en distintas ciudades, como Corrientes, Tucumán, San Luis, Córdoba, Comodoro Rivadavia, La Plata, Buenos Aires, y Bahía Blanca.

1.4. Fronteras en la reactividad: fotoquímica, transferencia de electrones, catálisis homogénea y heterogénea (P. Aramendía)

El estudio y comprensión de la reactividad tuvo hitos fundamentales durante el siglo XX. Esto modificó, como ya se dijo, la concepción de molécula. Hoy en día es posible obtener constantes de reacción para la formación y descomposición, espectros de absorción y de emisión y aún propiedades tales como potenciales redox, energías de unión y constantes de acidez de especies que tiene tiempos de vida de pocos picosegundos.



Cyril Norman
Hinshelwood

Nikolai Nikolaevich
Semenov

Los trabajos de las primeras cuatro décadas del siglo XX, desarrollados principalmente por M. Bodenstein en Alemania, C. Hinshelwood en Gran Bretaña y N. Semenov en Rusia (estos dos últimos compartieron el premio Nobel en 1956), permitieron identificar caminos de reacción a través del estudio de mecanismos complejos de reacciones en cadena y explosivas

Los intermediarios se identificaron por argumentos de reactividad y estabilidad química y, en algunos casos, fueron probados por aislamiento y reacciones competitivas. Fue posible su caracterización reactiva y termoquímica, pero no su observación directa.

El siguiente hito se logra hacia 1950 con los trabajos de M. Eigen en Alemania y de R.G. Norrish y G. Porter en Gran Bretaña (compartieron el premio Nobel en 1967). Estos permiten el desarrollo de las técnicas de relajación y de flash fotólisis, que logran la detección en tiempo real de intermediarios de reacción y de la evolución de las reacciones hasta el microsegundo. Se estudiaron de esta manera reacciones en fase gaseosa y líquida, de importancia en química atmosférica, transferencia de electrones y de energía entre

estados excitados, de catálisis enzimática y de sustitución en química orgánica y en complejos metálicos.



*Ronald George Wreyford
Norrish*

El advenimiento del láser, en 1960, permitió bajar la ventana temporal de observación hasta el nanosegundo, y hasta el picosegundo hacia finales de la década del 70. Se estudiaron así los eventos tempranos en la fotosíntesis, visión y en reacciones de transferencia de electrones en solución y en nanopartículas durante la década del 80. El siguiente hito en esta dirección estuvo dado por los trabajos de A. Zewail (premio Nobel en 1999) en EUA, que llegó a la detección del movimiento atómico en la superficie de energía potencial, en el intervalo de tiempo del femtosegundo. Así se puede estudiar directamente la dinámica en el estado de transición.

Por otra parte, el desarrollo de la técnica de haces moleculares (D.R. Herschbach, Y.T. Lee y J.C. Polanyi, galardonados con el premio Nobel en 1986) hizo posible el estudio detallado de la reactividad con la participación de estados cuánticos específicos y el análisis de la acumulación de energía en uniones específicas y en intervalos de temperatura imposibles de conseguir en fase condensada. Esto dio un gran impulso a la comprensión de las reacciones de los estados excitados, y a la formación de productos en estados excitados electrónica o vibracionalmente, fundamentalmente de moléculas simples, de gran importancia en química atmosférica.



Dudley R. Herschbach

Yuan T. Lee

John C. Polanyi

Estos avances experimentales fueron acompañados por desarrollos teóricos, determinantes a la hora de interpretar y planear experimentos. Cabe mencionarse la teoría del estado de transición, formulada por H. Eyring, la explicación de los procesos de transferencia de carga por R.A. Marcus (premio Nobel en 1992), las teorías de la importancia de la simetría de orbitales en reacciones químicas por R.B. Woodward, R. Hoffman y K. Fukui (éstos dos últimos galardonados con el pre-

mio Nobel en 1981; Woodward, que ya había ganado un premio Nobel en 1965 por la síntesis de productos naturales, ya había fallecido) y finalmente el desarrollo de métodos de mecánica cuántica por W. Kohn y J.A. Pople (premios Nobel en 1998), que permiten cálculos de trayectorias en superficies de energía potencial, fundamentales para explicar la reactividad de estados excitados y la naturaleza del estado de transición.



Rudolph A. Marcus



Robert Burns Woodward



Roald Hoffman



Kenichi Fukui

A partir de 1990 se desarrollaron los métodos de moléculas individuales y de fluctuaciones. Así se llegó al límite último de detección. El auge paralelo de la microscopía de fluorescencia, tanto confocal como de campo cercano permite actualmente seguir procesos de moléculas individuales con resolución temporal de 100 microsegundos y resolución espacial en el intervalo de decenas de nanómetros.

Si bien estamos muy cerca de los límites imaginables de detectar una molécula, ver su ubicación con precisión de decenas de nanómetros y observar su reactividad en el femtosegundo, se abren nuevas preguntas ante estas evidencias. El comportamiento cuántico individual de una molécula se puede seguir y promediar en el tiempo, apareciendo intermitencias y cambios repentinos de régimen de comportamiento que son inobservables en medidas de conjunto. Se puede seguir la migración intramolecular de energía electrónica en sistemas multicromofóricos como los usados en química supramolecular o en polímeros conductores. Se pueden analizar los comportamientos reactivos en conjuntos de moléculas de tamaño

nanométrico y composición controlada molécula a molécula. Mediante la regulación de excitación con patrones de pulsos a intervalos controlados y de composición espectral conocida, se puede regular el destino de reacciones con una enorme precisión (control cuántico).

La catálisis juega un papel importantísimo en las reacciones tanto a nivel de laboratorio, biológico como industrial. Desde los comienzos del siglo XX se dedicaron esfuerzos remarcables a la síntesis en gran escala usando catalizadores heterogéneos en los procesos de hidrogenación del carbono y de producción de amoníaco (F. Haber, Premio Nobel 1918, C. Bosch, F. Bergius, Premio Nobel compartido en 1931).



Fritz Haber

Carl Bosch

Friedrich Bergius

La elucidación de la catálisis enzimática básica por Michaelis y Menten ha sido un descubrimiento de gran trascendencia para la comprensión de los procesos biológicos. La formación y descomposición atmosférica del ozono por Chapman y la influencia de los contaminantes antropogénicos,

tanto en la catálisis homogénea como heterogénea del ozono estratosférico por P.J. Crutzen, F.S. Rowland y M.J. Molina (Premio Nobel 1995), han sido descubrimientos de gran trascendencia para la concientización de los efectos de la actividad humana a nivel planetario.



Paul J. Crutzen

Mario M. Molina

F. Sherwood Rowland



Karl Ziegler

Giulio Natta

En la producción de productos químicos de gran valor agregado merecen citarse los catalizadores de K. Ziegler y G. Natta para la producción de polímeros con control estereoquímico (Premio Nobel 1963)

Una medida de la importancia que ha adquirido tanto el descubrimiento de nuevos catalizadores, como los procesos catalíticos en sí, es el hecho de que de los diez premios Nobel de Química otorgados entre 2001 y 2010, cuatro fueron destina-

dos a esta rama de la Química.

En 2001 los galardonados fueron W.S. Knowles, R. Noyori y K.B. Sharpless por los procesos de hidrogenación y oxidación de moléculas orgánicas con control quiral.

*William S. Knowles**Ryoji Noyori**K. Barry Sharpless*

El premio de 2007 fue otorgado a G. Ertl por el estudio de reacciones sobre superficies. En 2005 se premió el descubrimiento y desarrollo de catalizadores, mecanismo y diversas aplicaciones de las reacciones de metátesis de olefinas por Y. Chauvin, R.H. Grubbs y R.R. Schrock. Finalmente, en 2010 se distinguió a R.F. Heck, E. Negishi y A. Suzuki por las reacciones de formación de uniones carbono-carbono catalizadas por paladio. Estos trabajos permiten procesos más eficientes (menos

pasos de reacción, menos materia prima y menos desperdicio), más simples de usar (estables en aire, a temperatura y presiones ambientes) y menos dañinos para el ambiente (solventes y desechos más inocuos) en la industria del petróleo, farmacéutica, agroquímica y en la producción de compuestos orgánicos usados en electrónica. Una compilación de temas de frontera en esta área ha sido editada por John Gladysz en *Chemical Reviews* en Marzo 2011.

*Yves Chauvin**Robert H. Grubbs**Richard R. Schrock*

1.5. Química de materiales (*S. Aldabe, G. Soler-Illia*)

La Química de Materiales emerge como una de las ramas más activas y transversales de la Química. Su extraordinario crecimiento se ha visto reflejado en las publicaciones, patentes, y la cantidad de departamentos y de recursos humanos específicos dedicados al área. Esta subdisciplina ha tomado herramientas de la química orgánica y de polímeros, y de la química de coordinación y, con la visión del autoensamblado molecular, las ha combinado con la física del sólido, la ingeniería de materiales, y la biotecnología, para aplicarlas a problemas complejos y relevantes de hoy en día: gestión del medio ambiente, las energías sustentables y las nuevas terapias. En particular, en la última década del siglo XX, la Química de Materiales se ha volcado hacia el diseño, producción y la aplicación de materiales nanoestructurados con nuevas propiedades "a medida", apuntando en un futuro cercano a sistemas supramoleculares espacialmente organizados, con una aproximación biomimética. Estos términos que hoy están incorporados al lenguaje cotidiano de los químicos, físicos e ingenieros, son un deber en las introducciones de las publicaciones científicas y de los pedidos de financiación. El mundo de la química de materiales es muy amplio, y tiene su base en la química de sistemas extendidos, como sólidos y polímeros, donde la noción de molécula como un conjunto discreto de átomos unidos y con una determinada geometría comienza a desdibujarse. Sin embargo, la riqueza de esta disciplina es la de mantener un enfoque químico centrado en comprender el entorno microscópico atómico-molecular, que puede proyectarse al comportamiento de un material macroscópico.

Son materiales, e incluso nanomateriales, el cemento, el Poxipol™, el acero, el vidrio, el Teflón™, el Kevlar™, o los materiales híbridos nanocompuestos que se usan en pinturas antirrayado, cascos de embarcaciones o raquetas de tenis. En todos los casos, se evidencia las posibilidades que tiene actualmente el control químico para alcanzar la/s funcionalidad/es del material final.

La característica más importante de la química de materiales de los últimos años es la síntesis y el desarrollo de materiales basados en bloques de construcción en la escala del nanómetro mediante lo que se podría llamar "diseño químico". Estos "ladrillos" pueden ser moléculas, oligómeros, conjuntos de moléculas formando una supramolécula (por ejemplo, micelas), clústeres, nanopartículas o cualquier combinación de éstos. La forma en que estas unidades se ensamblan y se distribuyen por el espacio es la que definirá las propiedades (mecánicas, ópticas, eléctricas, magnéticas) de cada material.

Desde el punto de vista conceptual, los trabajos de síntesis de los últimos años nos han enseñado que se pueden construir materiales con propiedades bien definidas, sin necesidad de usar alto vacío o de ensamblar molécula a molécula con las puntas de microscopios de efecto túnel o de fuerza atómica.

En la naturaleza se encuentran estructuras con propiedades inmejorables: la elasticidad de una tela de araña o la resistencia mecánica de algunas caparazones, la abrasividad de la piel de tiburón, la adherencia de las patas de las lagartijas, en especial del gecko (o geco). También hemos aprendido que se pueden lograr estructuras mecánicamente muy resistentes sin necesidad de procesamientos a altas temperaturas.



Geco de Madagascar

Geco adherido a vidrio

Las patas de un geco caminando en vidrio

Por ser el tema tan amplio, haremos sólo algunas consideraciones muy generales sobre las características de la investigación química moderna en estos temas.

- Los trabajos de síntesis de materiales que dicen, respecto del objetivo, que el trabajo se realizó *in order to gain deeper insight* están pasados de moda. En la actualidad, el proceso comienza por la definición de las propiedades que se buscan, y a partir de allí se analiza qué materiales (y bajo qué forma) son adecuados para esa función, y finalmente se define cuál es la ruta de síntesis más adecuada de esos materiales.
- El diseño de los nanomateriales tiene que tener en cuenta no solamente las clásicas relaciones estructura-propiedad, sino las estructura-morfología-propiedad, derivadas de la cuantización de las propiedades, y el efecto de la superficie (i.e., carga superficial, "filicidad", etc), que han sido ampliamente analizadas en la fisicoquímica de coloides y superficies, y que cobran nueva dimensión, a la luz de las características de los nanomateriales.
- La necesidad de caracterizar completamente materiales complejos, formados por bloques co-ensamblados con diferente funcionalidad química ha llevado a que los químicos accedan a técnicas de caracterización cada vez más sofisticadas. Esto incluye el desarrollo de técnicas de caracterización estructural multiescala (espectroscopias, técnicas de dispersión de luz o microscopías) y la determinación de propiedades y de procesos in situ, in-

- cluyendo la formación de materiales, y su reactividad. La combinación de los esfuerzos entre las comunidades de síntesis de materiales y la caracterización avanzada ha llevado a una sinergia que permite una realimentación eficiente que apunta hacia "nanomateriales por diseño".
- De la misma manera, el desarrollo de la química computacional de alto nivel permite analizar sistemas extendidos más complejos, lo que cierra el círculo síntesis-caracterización-modelado.
- Las fronteras entre la Química Orgánica y la Química Inorgánica han desaparecido. Existe una fuerte tendencia al diseñar y sintetizar materiales híbridos, que aprovechan lo mejor de ambas ramas.
- El ensamblado espacial de los ladrillos que constituyen el material es crucial. Es más, las estructuras presentan diferencias importantes según la escala que se analice. Es así que habrá interacciones fuertes (uniones químicas) vinculando los átomos dentro de los ladrillos más elementales, y después diferentes niveles de interacciones que definirán una estructura muy compleja. En este tema, la inspiración biomimética juega su papel más importante. Comprender el origen de las interacciones fuertes y débiles es pues crucial.
- Para los químicos, el enfoque bottom-up es más prometedor que el enfoque top-down, ya que es el que permite modular la estructura, y por lo tanto las propiedades, a nivel molecular. En cambio, la preparación de materiales con un enfoque top-

down es más típica de la Física y de la Ingeniería.

- El autoensamblado, proceso por el cual los ladrillos constituyentes se ordenan (se ensamblan) naturalmente en el curso de la síntesis, es una poderosa herramienta frecuentemente empleada por los químicos. Los materiales nanocompuestos, de extendida aplicación industrial como refuerzo mecánico de plásticos y polímeros, son un excelente ejemplo.

- Materiales ¿para qué? Los campos de aplicación que registran una intensa búsqueda de nuevos (nano)materiales son la energía, la química analítica (especialmente aplicada al análisis clínico y a la química ambiental), la medicina, y, por supuesto, la electrónica.

- Como se ha dicho, la síntesis de nanomateriales puede realizarse a menudo por métodos suaves, que no requieren de complicados equipos de vacío. Sin embargo, los intentos de síntesis sin herramientas de caracterización difícilmente tendrán éxito. Caracterizar los nuevos materiales implica usar muchas técnicas. La síntesis es pues un complejo proceso con notable necesidad de bagaje fisicoquímico e instrumental sofisticado.

1.6. Química de superficies (E. Leiva, R. Salvezza)

Los desafíos que se plantean desde la Nanotecnología han impactado profundamente en la ciencia de las superficies motivando nuevas áreas de investigación antes impensadas. En un evolución desde una menor hacia una mayor complejidad, el estudio de moléculas sencillas adsorbidas sobre superficies perfectamente definidas en condiciones de ultra alto vacío ha sido reemplazado en los últimos años por el interés en el estudio de moléculas complejas y biomoléculas que se organizan en medio líquido sobre sustratos de distinta dimensionalidad. El objetivo es claro: se trata de construir superficies funcionales utilizando la química supramolecular y sintética como herramientas preferentes, ya sea sobre superficies monocristalinas, fractales o bien de nanomateriales. Las monocapas autoensambladas han sido los sistemas modelo más utilizados en la construcción de sensores, biosensores, actuadores, sistemas biomiméticos, dispositivos electrónicos,

motores moleculares, elementos de transporte y liberación de fármacos.

La posibilidad de "construir" dispositivos sobre superficies en la nanoescala exige una rigurosa caracterización química y estructural. A pesar de la disponibilidad de poderosas herramientas de caracterización tales como modernas microscopias con resolución atómica y molecular y espectroscopias electrónicas y de rayos X, entre otras poderosas técnicas, existen aún numerosos interrogantes y dificultades que resolver. Estas incluyen el conocimiento de la naturaleza de la interfaz molécula-sustrato, la presencia de defectos estructurales y configuracionales, la inclusión de contaminantes, y la estabilidad química y térmica en condiciones ambientales. Estas dificultades revelan las limitaciones que aún existen en la manipulación y el control de los sistemas en escala molecular y que limitan seriamente sus posibles aplicaciones tecnológicas.

En consonancia con la mejora de las técnicas experimentales, han aparecido en las últimas décadas herramientas teóricas y computacionales que los experimentadores han comenzado a emplear para dilucidar los interrogantes que se generan a raíz de las limitaciones experimentales. De particular interés, por su capacidad para describir el enlace químico, han sido los métodos basados en la mecánica cuántica (MC). Esto es así, porque la MC permite, en principio, predecir todas las magnitudes observables a partir de ecuaciones que sólo contienen como información necesaria la masa y la carga de las partículas que constituyen el sistema. Sin embargo, las palabras escritas en *italica* esconden un problema no menor. Esto es así porque las ecuaciones de la MC se deben resolver numéricamente en una computadora mediante métodos que requieren un uso computacional sumamente intensivo. Por otro lado, los métodos más difundidos ampliamente para sistemas complejos, que se basan en ideas que le valieron el premio Nobel a Walter Kohn en 1998, tienen algunas aproximaciones que no han permitido hasta ahora asegurar que un resultado teórico-computacional sea completamente exacto. ¿Cuál es el rol entonces que juegan actualmente los cálculos de MC en aclarar estos experimentos? Por un lado, cuando existen un número relativa-

mente pequeño de alternativas para un dado fenómeno que el experimento no permite dirimir, la MC permite analizar la energética de estos sistemas (ya sea en sus aspectos termodinámicos y dinámicos) y establecer cuál será más favorable. Por otro lado, existen fenómenos propuestos que los cálculos demuestran que son claramente inviables, y a allí podemos confiar plenamente en la MC.

¿Qué mejoras son deseables entonces para que la MC provea resultados más útiles para el experimento? En esta dirección, podemos señalar dos grandes objetivos, que sucintamente se pueden describir con las palabras: más grande y más rápido. El primero se refiere al desarrollo de métodos de cálculo que permitan atacar sistemas con un mayor número de átomos. Acá la mayor aspiración del teórico es lograr que sus programas logren "linealidad", en el sentido de que su tiempo de cálculo se incremente en forma lineal con el tamaño de su sistema, y no con una ley de potencias superior. En cuanto al segundo objetivo, es lograr que sus cálculos puedan predecir eventos en la escala de tiempo experimental (muchas veces milisegundos, segundos o aún días), y no en la escala pico o nanosegundos, que es lo que ocurre en la actualidad. Ésta es también un área candente de desarrollo actual, en la que se esperan grandes progresos. Finalmente, otra área en pleno desarrollo son simulaciones computacionales donde las interacciones no se calculan directamente a partir de la mecánica cuántica, sino que se ajustan heurísticamente a ella. Cuando el fenómeno en estudio no depende críticamente de la naturaleza de las interacciones entre las partículas, esta metodología puede contribuir a la comprensión de numerosos fenómenos.

1.7. Química y Biología

Dentro de la reconocida interacción entre la Química y la Biología, que se ha manifestado visiblemente en el caso de la Química Orgánica desde hace mucho tiempo, destacamos la irrupción de la llamada Química Bioinorgánica en tiempos más recientes. Si se miran las fechas de fundación de las revistas de la American Chemical Society (ACS): J. Am. Chem. Soc. (JACS, 1879), J. Phys.

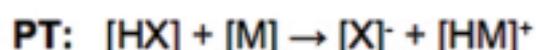
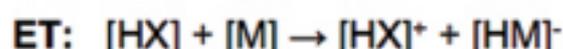
Chem. (1896), Anal. Chem. (1929), J. Org. Chem. (1936), Biochemistry (1962), Inorg. Chem. (1962), llama la atención la más reciente diferenciación de las dos últimas. Más reciente aún es, en Inorg. Chem., el aditamento including bioinorganic chemistry, lo que no es antagónico con que también se destaque a la revista cubriendo estudios fundamentales en todas las facetas de la química inorgánica, como la química organometálica, del estado sólido, de los materiales y la nanoquímica. La interfaz entre la Química Inorgánica y la Biología ha sido realizada recientemente por una serie de artículos del 2009 publicados en JACS, que son representativos de una temática muy generalizada en la última década: el rol de los metales en biología. Sin dejar de notar que la aplicación de metales al tratamiento de dolencias humanas nos remonta al siglo V AC., y que la iatroquímica de Paracelso incluía el uso del bismuto como bactericida, al tiempo de alertar sobre la toxicidad del arsénico, en la actualidad se destaca el rol de los elementos inorgánicos, especialmente metales, en importantes funciones biológicas, que incluyen el señalamiento celular, el metabolismo, la producción de energía y la respuesta inmune. Crecen las evidencias inorgánicas en los aspectos de estructura/función biológica, y el rol expandido de los metales en medicina. La creatividad de los químicos se manifiesta en la invención de moléculas que mimetizan aspectos de un sitio activo enzimático proveyendo elementos fundamentales geométricos y mecanísticos que ayudan en la interpretación de resultados obtenidos por los estudios directos en los sistemas naturales. También se enfatiza en la manera en que los sistemas naturales importan iones metálicos o metalodrogas, ensamblan cofactores, o efectivizan una química catalítica. Estudios más emergentes se refieren a la aparición de sondas analíticas novedosas para los iones metálicos.

Un gran impulso están adquiriendo los estudios estructurales y mecanísticos en Química, particularmente con los avances en la instrumentación y el acceso a escalas de tiempo pequeñas y a la posibilidad de detección de intermediarios/productos por técnicas espectroscópicas y computacionales modernas (ver 1.2 a 1.4). Un tema de enorme relevancia y gran generalidad está constituido por

las reacciones de oxidación-reducción en las cuales se transfieren electrones y protones, los que forman parte de importantes procesos de conversión de energía en química y biología, tal el caso de la fotosíntesis en las plantas verdes. Existen diferentes clasificaciones de este tipo de reacciones, englobándose las bajo la sigla PCET (proton coupled electron transfer). Sin entrar en mayores detalles aquí, se diferencia a los procesos consecutivos de transferencia (ET-PT o bien PT-

ET) de aquellos en los que se manifiesta un proceso concertado, de transferencia simultánea de ambas partículas, EPT o CPET). En la nomenclatura EPT (electron-proton transfer) se incluyen definiciones particulares, como HAT (transferencia de átomo de H), transferencia de hidruro, de átomo de O, etc., para describir a diferentes variantes en las transferencias de electrones netas entre moléculas.²²

Los esquemas de ET, PT y PCET



El acoplamiento de la transferencia del electrón y el protón influencia tanto a la energética como a los mecanismos. Facilita la acumulación de equivalentes redox múltiples necesarios para llevar a cabo reacciones multielectrónicas. Además provee caminos de reacción donde la simultaneidad de la transferencia de ambas especies evita la aparición de especies intermediarias de alta energía. Abordar un mejor conocimiento de estos mecanismos es crítico para entender procesos como la respiración, la fijación del nitrógeno y la fotosíntesis, así como la conversión de energía en la fotosíntesis artificial o en las celdas de combustible. El tema adquiere también gran relevancia en procesos que ocurren en superficies y películas delgadas. Las necesarias modificaciones en los recubrimientos de electrodos tienen su causa en que muchos metales no presentan caminos accesibles que no sean los de ET o PT sucesivos (los cuales presentan barreras cinéticas altas), por lo cual se requiere favorecer caminos tipo EPT, donde ambas partículas se transfieren simultáneamente y al potencial termodinámico para la cupla en cuestión.

A medida que los procesos enzimáticos y biológicos vienen siendo elucidados a nivel molecular, se advierte que la biología utiliza extensamente los

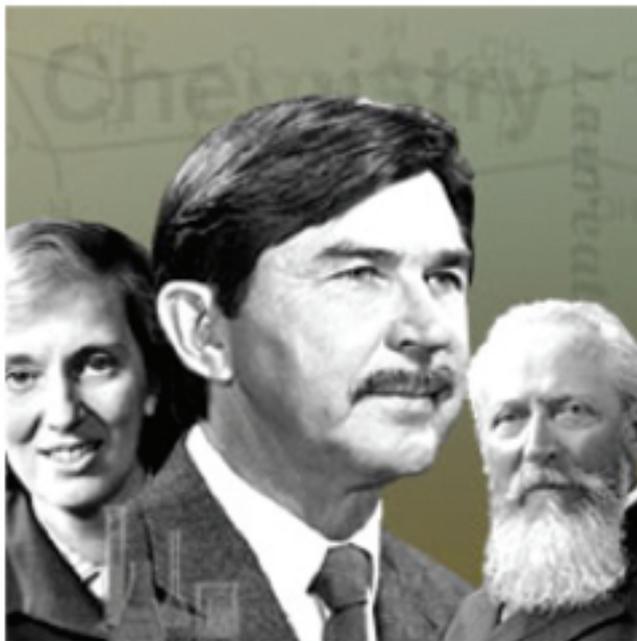
procesos EPT. Durante el proceso evolutivo, han aparecido estructuras complejas que suministran arreglos espaciales orientados para integrar la transferencia del electrón y del protón, eludiendo intermediarios de alta energía. En estos procesos se modifican notoriamente los pKa's y los potenciales redox de las cuplas involucradas. Se habilita el acceso a estados de oxidación superiores y a procesos multielectrónicos, lo cual es muy evidente en los metales de transición (por ejemplo, participación de especies tipo ferrilo, FeO^{n+}). Ejemplos de estudios PCET biológicos comprenden a las proteínas Fe-S, las superóxidodismutasas, la flavodoxina, los efectos de membrana en los potenciales redox, etc. La Química Orgánica se ve incluida en esos avances: si bien las reacciones del tipo HAT se vienen estudiando desde hace una centuria (combustiones y oxidaciones aeróbicas, efectos destructivos de las especies reactivas derivadas del oxígeno, etc), con énfasis en los aspectos termoquímicos, ahora son analizadas en los términos del acoplamiento protón-electrón, llegando a ponerse en evidencia mecanismos similares a los postulados en las reacciones cruzadas de Marcus, y posibilitando una mayor generalización y predictibilidad. Existe también una electroquímica orgánica PCET (quinonas,

hidrocarburos aromáticos, compuestos carbonílicos) que hace uso de los diagramas potencial-pKa para describir procesos redox en una variedad de reacciones orgánicas.

Otro elemento distintivo de las nuevas orientaciones en la Química Inorgánica (no limitadas a la relevancia biológica) es el estudio de la química de las moléculas pequeñas (O_2 , N_2 , H_2 , NO , CO_2 , etc.). En la gran mayoría, si no en todos los casos, el rol biológico de estas especies involucra a iones metálicos, y a la química de coordinación respectiva, donde el hierro y el cobre ocupan un espacio central, aunque no exclusivo.

Algunos de los recientes Foros de Inorganic Chemistry (2005-2010) se ocupan de estos temas, que no solo son impulsados por la relevancia bioinorgánica de dichas moléculas sino por su incidencia en procesos de interés sintético industrial. En el apartado 3.2 se discute la generación y almacenamiento de energía a partir del sol; cabe aquí sólo mencionar que algunas estrategias para opti-

mizar los catalizadores de la conversión del agua en H_2 y O_2 (water splitting), buscan inspirarse en el comportamiento de los sistemas fotosintéticos. Los estudios de "fotosíntesis artificial" comprenden una estrategia compleja que intenta emular el proceso natural por vía del ensamble molecular de sucesivos elementos y procesos químicos de absorción de luz, transferencias de energía y electrónica, y catálisis de procesos multielectrónicos. Se intenta mimetizar el proceso natural a través de la síntesis de materiales accesibles (según la imaginación del químico).



Henry Taube

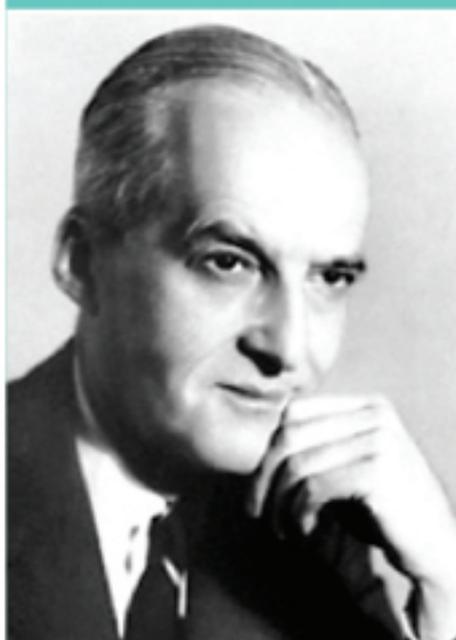
El desarrollo de esta área comenzó con los trabajos teóricos de Marcus ya citados en 1.4, y con el estudio experimental de las reacciones de transferencia de electrones por H. Taube (Premio Nobel de Química 1983)

Un ejemplo muy actual realza el papel de los óxidos de cobalto, emulando el rol de los cúmulos de Mn en el proceso de la fotosíntesis natural en plantas. Los procesos de reducción del O_2 y de oxidación de H_2 en las celdas de combustible constituyen un renovado foco de atención actual. Los procesos redox asociados con el O_2 y el H_2

(como así también con N_2 y NO) son efectivizados muy eficientemente en los fluidos biológicos por sendas enzimas (oxidetasas, nitrogenetasas, hidrogenetasas, sintetetasas, etc.) y las enseñanzas de los sistemas biológicos constituyen una importante fuente de inspiración en estos temas tecnológicos.

CUADRO II LOS ARGENTINOS Y EL PREMIO NOBEL DE QUÍMICA

Como ya se dijo, esta reseña está centrada en temas de la Química Física y la Química Inorgánica, aun cuando las fronteras entre sub-disciplinas se esfuma cada vez más, como lo ilustra todo este documento. Por ese motivo, los grandes hallazgos en Química Biológica no están resaltados. Es precisamente en esta área que la Argentina ha aportado científicos de muy alto nivel, como se describe en muchos números de Ciencia e Investigación.



Un argentino fue galardonado con el Premio Nobel de Química: Luis Federico Leloir, en 1970, "por su descubrimiento de los nucleótidos-azúcar y su papel en la biosíntesis de carbohidratos". Fue el primer laureado Nobel en Química de Latinoamérica; a él se unió después Mario Molina (mexicano trabajando en California). Se transcribe a continuación el discurso de presentación que dió el Profesor Karl Myrbäck del Comité Nobel para la Química

Your Majesty, Your Royal Highnesses, Ladies and Gentlemen.

The 1970 Nobel Prize for chemistry has been awarded to Dr. Luis Leloir for work of fundamental importance for biochemistry. Dr. Leloir receives the prize for his discovery of the sugar nucleotides and their function in the biosynthesis of carbohydrates.

Carbohydrates, as everybody knows, form a comprehensive group of naturally occurring substances, which include innumerable sugars and sugar derivatives, as well as high-molecular carbohydrates (polysaccharides) like starch and cellulose in plants and glycogen in animals. A polysaccharide molecule is composed of a large number of sugar or sugar-like units.

Carbohydrates are of great importance in biology. The unique reaction, which makes life possible on Earth, namely the assimilation of the green plants, produces

sugar, from which originate, not only all carbohydrates but, indirectly, also all other components of living organisms.

The important role of carbohydrates, especially sugars and starch, in human food and, generally, in the metabolism of living organisms, is well known. The biological break-down of carbohydrates (often spoken of as "combustion") supplies the principal part of the energy that every organism needs for various vital processes. It is not surprising, therefore, that the carbohydrates and their metabolism have been the subject of comprehensive and in many respects successful biochemical and medical research for a long time. While working on these problems, Leloir made the discoveries for which he has now been awarded the Nobel Prize.

Before these discoveries were made, our knowledge of carbohydrate biochemistry was rather one-sided. The biological processes which break down carbohydrates, including the so-called combustion,

have been well known for several decades. Over the years many Nobel Prizes have been awarded for chemistry and still more for physiology or medicine for discoveries about the reactions and catalysts involved. However, our knowledge about the innumerable corresponding synthetic reactions which occur in all organisms, was fragmentary. We had to resort to doubtful hypotheses; it was usually assumed that the syntheses were a direct reversal of the well-known breakdown reactions. The work of Leloir has indeed revolutionized our thinking about these problems.

In 1949 Leloir published the discovery which became the foundation for a remarkable development. He found that in a certain reaction, which results in the transformation of one sugar to another sugar, the participation of a so far unidentified substance was essential. He isolated the substance and determined its chemical nature. It turned out to be a compound of an unknown type, containing a sugar moiety bound to a nucleotide. Compounds of this type are now called sugar nucleotides. Leloir established that the transformation reaction does not occur in the sugars as such, but in the corresponding sugar nucleotides. To put it simply, one may say, that the linking with the nucleotide occasions an activation of the sugar moiety which makes the reaction possible.

The remarkable aspect of the discovery was not the explanation of a single reaction, but Leloir's quick comprehension that he had found the key which would enable us to unravel an immense number of metabolic reactions. He ingeniously realized that a path had been opened to a field of research containing an accumulation of unsolved problems. In the twenty years that have elapsed since his initial discovery he has carried on his research in this field in an admirable manner.

Other scientists were quick to grasp the fundamental importance of Leloir's discovery; they realized that a vast field was now accessible to worth-while scientific investigation and started research along the path which he had opened. There can be no doubt that few discoveries have made such an impact on biochemical research as those of Leloir. All over the world, his discoveries initiated research work, the volume of which has grown over since. Leloir has been the forerunner and guide throughout; he made all the primary discoveries which determined the path and the objectives of the ensuing research work.

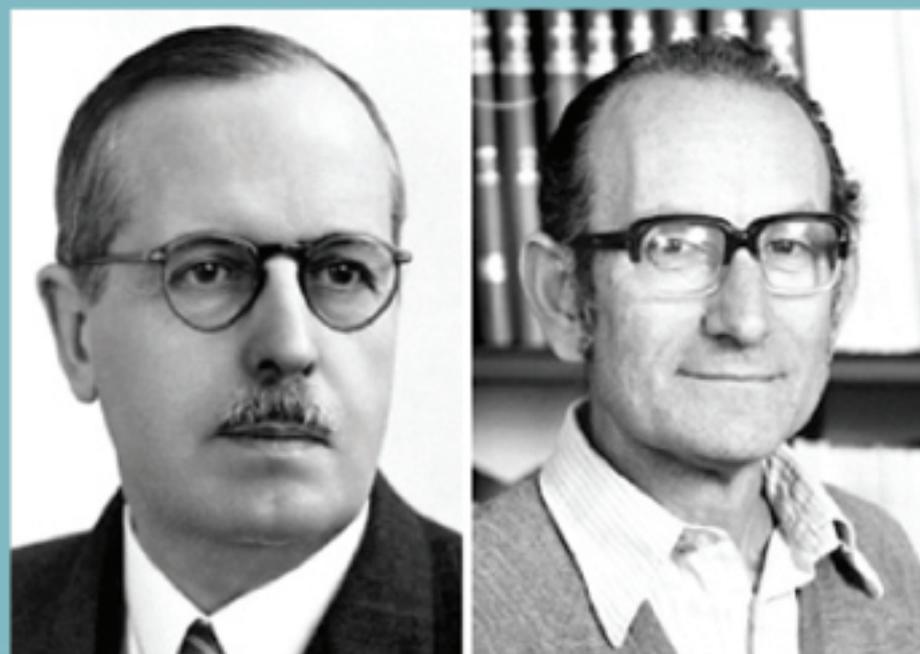
Leloir soon found that besides the sugar nucleotide first isolated, several others of the same type occur in Nature, and many have also been found by other research workers. Today more than one hundred

sugar nucleotides which are essential participants in various reactions are known and well characterized. Some of them have an action similar to that of the first isolated, namely in the transformations of simple sugars to other simple sugars or sugar derivatives. Still more important was Leloir's discovery that other sugar nucleotides have another action which occurs in the biological synthesis of compounds which are composed of or contain simple sugars or sugar derivatives. Leloir showed that all these syntheses are essentially transfer reactions.

Sugar moieties from sugar nucleotides are transferred to accepting molecules which thereby increase in size. Probably the most sensational discovery made by Leloir was that the synthesis of the high-molecular polysaccharides also functions in this manner. The first example of the fundamental role of the sugar nucleotides in polysaccharide biosynthesis was found by Leloir in 1959 in the case of glycogen. It became clear that the polysaccharide biosynthesis is not a reversal of the biological breakdown, as had doubtfully been assumed earlier. On the contrary, Nature uses different and quite independent processes for synthesis and breakdown. Later on the same extremely important principle was also shown to be valid with other groups of substances, for instance with proteins and nucleic acids.

Through Leloir's work and the work of others, who were inspired by his discoveries, knowledge of great significance has been gained in wide and important sections of biochemistry, which were previously obscure. It can be readily appreciated that Leloir's work has also had far-reaching consequences in physiology and medicine.

**The manuscript was read by Professor Arne Tiselius*



Otros dos argentinos fueron galardonados con el Premio Nobel en Medicina o Fisiología, por sus estudios bioquímicos: Bernardo Houssay (1947) y César Milstein (1984).

La escuela argentina de Bioquímica vinculada a la Medicina, que se puede remontar a Bernardo Houssay, ha mantenido a lo largo del tiempo un nivel internacional indiscutido

2. La Química y la Innovación Tecnológica

Esta Sección no pretende realizar un análisis exhaustivo de los alcances reales de la innovación tecnológica, y su transferencia al sector productivo. Esa tarea demandaría un esfuerzo que está más allá de las posibilidades de este documento. Sólo analizaremos aquí algunos ejemplos bien documentados de desarrollos tecnológicos encarados en el país, algunos de ellos razonablemente exitosos, y otros abortados, especialmente durante la década de 1990. En todos los casos la descripción se centrará en las contribuciones químicas.

2.1. Tecnología Nuclear

La tecnología nuclear es tal vez el único ejemplo de una política de estado sobre el desarrollo tecnológico proseguida coherentemente por diversas administraciones nacionales. En sus aspectos centrales, apunta muy especialmente al desarrollo de reactores nucleares de investigación y de potencia. También incluye el desarrollo de la Medicina Nuclear y de las metodologías nucleares de

análisis (de materiales y de muestras ambientales). Las áreas de investigación en Química se describen en 4.3.

Aun dentro de este caso, el más exitoso de desarrollo de tecnología en el país, se advierte que muchas veces los logros tecnológicos fueron acotados por la realidad imperante. En buena medida, CNEA contribuyó a mantener viva la investigación fundamental, pero sus logros tecnológicos en el área de la Química se mantuvieron relativamente acotados. Como aspecto positivo, es de destacar especialmente el efecto de "derrame" que la actividad nuclear ha tenido sobre el desarrollo de la Química. La identificación de temas de importancia tecnológica, combinada con una política de recepción de recursos humanos altamente calificada, y la construcción de infraestructura a lo largo de los años, ha transformado a CNEA en un referente importante de la actividad científica del país, incluyendo la Química. Cabe destacar que uno de los primeros desafíos importantes del INTEC en Santa Fe fue el diseño de la Planta Experimental de Agua Pesada (PEAP), por contrato con CNEA.

El proyecto nuclear necesitará en el futuro inme-

diato de recursos humanos bien preparados para encarar desarrollos en tecnología química. Se advierte aquí un desafío importante, ya que no abundan esos recursos humanos. La alianza estratégica con las universidades (UNSAM, UN Cuyo, UBA, UNLP, etc.) es fundamental para evitar el aislamiento que atenta en contra de la renovación de los recursos humanos. Este tipo de alianza es fundamental en el futuro para todos los Institutos no universitarios del sistema de Ciencia y Técnica.

2.2. Petroquímica

El descubrimiento de petróleo, y la creación de Yacimientos Petrolíferos Fiscales (YPF) fueron la base de un ambicioso intento de desarrollo de la industria química pesada, que desembocó más adelante en la instalación del Polo Petroquímico Bahía Blanca y otras plantas petroquímicas. El apoyo oficial se manifestaba a través de las acciones de Investigación y Desarrollo de YPF, y a través de diversas acciones de las autoridades nacionales de ciencia y técnica, como el establecimiento de un Plan Nacional de Catálisis. En efecto, el apreciable desarrollo de la catálisis, con la creación de Institutos de buen prestigio como el INCAPE, CINDECA y otros, era parte de una estrategia global de apuntalamiento de la actividad petroquímica. Los laboratorios de investigación y desarrollo de YPF en Florencio Varela apuntaban en la misma dirección. La venta de YPF y el desmantelamiento de los laboratorios de Florencio Varela marcaron el final de este ambicioso proyecto. Las "leyes de mercado" signaron la destrucción del esfuerzo por construir tecnología en el sector. Siguen en pie los Institutos formados alrededor de la catálisis y la industria petroquímica.

2.3. Nanotecnología

Un esfuerzo más reciente de construcción de un puente entre la I&D y la innovación productiva lo constituye la nanotecnología. Originada en una iniciativa del entonces Ministro de Economía Lavagna, se buscó definir un Proyecto que integrara I&D con la actividad productiva real en un área que mostraba un desarrollo explosivo en el mundo. La

iniciativa llevó finalmente a la creación de la Fundación Argentina de Nanotecnología (FAN), una entidad de derecho privado y sin fines de lucro, creada por el Decreto 380/2005 del Poder Ejecutivo Nacional. Tiene como objetivo sentar las bases necesarias para el fomento y promoción del desarrollo de la infraestructura humana y técnica del país en el campo de la nanotecnología y la microtecnología. Su responsabilidad principal es fomentar la generación de mayor valor agregado en la producción nacional, para el consumo del mercado interno y para la inserción de la industria local en los mercados internacionales.

En 2006 se abrió un concurso de proyectos para ser financiados por la FAN. Se requería que el objetivo del proyecto fuera la generación de un producto o un procedimiento de interés comercial y que involucrara micro o nanotecnología. La selección que se hizo tras el análisis de las propuestas dejó a nueve proyectos para que pudieran formularse en forma completa. En muchos de ellos la Química era un componente importante. Al pasar la FAN a ser parte del MINCyT, se redefinió su cometido, en particular con referencia a su forma de operación, teniendo en cuenta que existían otras fuentes de financiación para este tipo de proyectos inclusive dentro del MINCyT, especialmente a través de la ANPCyT.

Tanto en el Consejo de Administración, como en el Consejo Asesor de FAN hay miembros que son químicos.

Sin embargo, la Química participa de manera destacada solo en los proyectos que involucran la síntesis de nanopartículas y la formulación de recubrimientos conteniendo nanopartículas.

Hasta ahora, la FAN ha firmado un primer acuerdo para la ejecución de un proyecto vinculado a temas de biología molecular y nanomedicina. Cabe abrir un crédito a la esperanza que la FAN se transforme realmente en una herramienta poderosa para impulsar la vinculación entre los sectores de C&T y los sectores productivos, a través de la innovación.

Recientemente se han conocido los resultados del concurso FONARSEC en el área de nanotecnología. FONARSEC es un instrumento de MINCyT para la financiación que promueve proyectos consorciados y asociativos de gran envergadura que

han superado la fase temprana de investigación y se encuentran orientados a generar, adaptar y transferir conocimientos de alto impacto a nivel productivo y social. Se han asignado fondos importantes a varios proyectos con fuertes componentes químicos.

2.4. Fuentes de energía alternativas. Celdas de combustible y energía solar.

En Argentina el apoyo a la investigación sobre celdas de combustible se ha dirigido mayormente a proyectos sobre los aspectos electroquímicos de los catalizadores de celdas PEM, que usan membranas de intercambio de protones (proton exchange membranes). Más recientemente se ha encarado el desarrollo de nuevos materiales para membranas y capas difusoras a través de un proyecto PICT Start Up financiado por la ANPCyT. En el marco de este proyecto se desarrollan también electrocatalizadores nanoestructurados. En celdas de óxido sólido hay grupos trabajando en el desarrollo de electrolitos y catalizadores de temperatura intermedia. En agosto de 2006 se aprobó la ley N° 26.123 Régimen para el desarrollo de la tecnología, producción, uso y aplicaciones del hidrógeno como combustible y vector de energía, pero aún no se ha reglamentado. Pese a ello el MINCYT ha incluido las energías renovables dentro de los Proyectos en Áreas Estratégicas y desde 2008 financia el PAE 36985 Producción, purificación y aplicaciones del hidrógeno como combustible y vector de energía del cual participan más de 100 investigadores y becarios de 12 grupos de todo el país (Centros Atómicos de Bariloche y Constituyentes, CINDECA, CINSO, INCAPE, INGAR, INIFTA, INTEQUI y PLAPIQUI, Laboratorio de Procesos Catalíticos y el Departamento de Ingeniería Química de la Facultad de Ingeniería de la UBA, la Universidad Nacional del Sur y la Universidad Tecnológica Nacional Regional La Plata). El proyecto comprende cuatro subproyectos dedicados al estudio de reformado de etanol/gas natural y purificación de hidrógeno gaseoso proveniente del mismo, almacenamiento de hidrógeno, celdas de combustible e integración de los distintos procesos para el desarrollo de un prototipo de planta que permita generar 5 kW de energía eléctrica a partir de bioetanol o gas

natural.

Por los antecedentes del país en áreas tales como electroquímica, catálisis, materiales y por los recursos humanos y de energías renovables disponibles, Argentina se encuentra en una posición muy ventajosa para generar tecnología propia en esta área. Para ello se requiere un apoyo sostenido en el tiempo al sector científico-técnico y a las empresas capaces de adoptar o desarrollar estas tecnologías, y alianzas con países de la región que, como Brasil, han tomado la delantera en el tema. Hay temas que aún no han sido abordados en Argentina y que son vitales para el desarrollo de la economía de hidrógeno, uno de ellos es el desarrollo de electrolizadores de alta eficiencia.

3. La Química Ambiental y de la Energía

3.1. Química Ambiental

Las Ciencias Ambientales cubren un espectro de actividades muy amplio, en consonancia con su carácter de campo de estudio transdisciplinario; una publicación reciente describe los temas de más actualidad para la Argentina, que incluyen desde aspectos físicos y químicos hasta aspectos sociales. Dentro de ese espectro, algunos temas son altamente relevantes a la Química. En 2009, Environmental Science and Technology seleccionó los que a su juicio fueron los artículos más importantes. Esta revista de la American Chemical Society ilustra acerca de cuáles son los temas químicos más relevantes en Ciencias Ambientales: contaminación de cuerpos de agua y sus efectos ecotoxicológicos, procesos de remediación, en especial el uso de nuevos materiales como adsorbentes, complejantes de metales, etc. Una descripción precisa de los temas de frontera puede apreciarse en los temas enfatizados para la International Conference on Chemistry and the Environment (ICCE 2011), Emerging Issues in Environmental Chemistry: from Basic Research to Implementation:

- **Contaminantes emergentes**
- **Nanomateriales**
- **Agua potable: calidad y tratamiento**
- **Química atmosférica y aerosoles**
- **Contaminación de suelos y sedimentos**

- **Procesos de transformación**
- **Predicciones mediante modelos**
- **Efectos sobre organismos y ecosistemas**

Como es lógico, el tema de contaminación es central en Química Ambiental. En el caso de Química Atmosférica, las metodologías analíticas constituyen aun hoy un desafío (por ejemplo, sensado remoto). Respecto de la contaminación del agua, es también importante el desarrollo de nuevas metodologías analíticas (y la implementación de tecnologías modernas), con límites de detección cada vez más bajos, y con tecnologías acorde a las condiciones socioambientales en que serán usadas. Una característica importante de la Química Analítica Ambiental se refiere a los métodos y estrategias de muestreo, y otro se refiere al procesamiento estadístico de una masa importante de datos. El análisis multivariado y la quimiometría en general son fundamentales. En ciertos tipos de contaminación, los efectos (eco)toxicológicos son bien conocidos, pero en el caso particular de contaminantes orgánicos (agroquímicos, detergentes, antibióticos, y sus productos de degradación), existe todavía una importante necesidad de estudios epidemiológicos y de laboratorio para establecer con alguna certeza el verdadero riesgo ecotoxicológico.

La Química Ambiental tiene una lógica que requiere en general de estudios de campo. Sólo en ciertos casos los estudios de laboratorio por sí mismos tienen un impacto real sobre el conocimiento y la gestión ambiental. Por este motivo, es deseable que los estudios ambientales se integren en un plan de investigaciones que no puede ser de pequeña escala y que, en general, exceden el marco disciplinario de la Química.

3.2. Química de la energía: Celdas de combustible y economía de hidrógeno (H.R. Corti)

La búsqueda de nuevas fuentes de energía ha suscitado mucho interés en la posibilidad de lograr la fotosíntesis artificial; a falta de éxitos inmediatos en esta búsqueda, el desarrollo de celdas fotovoltaicas solares promete resultados más rápidamente. Ya se mencionó la relevancia de la Química Bioinorgánica en estos intentos. En este

campo, las celdas híbridas son un tema de trabajo natural para los químicos. El aprovechamiento solar térmico también requiere de mucho desarrollo de la Química, en este caso de óxidos metálicos y otros sistemas que a través de un ciclo térmico puedan generar hidrógeno a partir de la energía solar. El aprovechamiento de los biocombustibles, y el uso de otros vectores como el hidrógeno hace necesario desarrollar materiales como polímeros conductores y electrodos catalíticos para las celdas de combustibles. Este tema es tratado en detalle en los párrafos siguientes. La era de la energía fósil es un abrir y cerrar de ojos entre la primera y segunda civilización solar. La primera abarca desde el hombre primitivo hasta la sociedad preindustrial, mientras que la segunda comenzará cuando se agoten las reservas de combustible fósil o, más probablemente, cuando los efectos ambientales producidos por su uso obliguen al uso de energías renovables, aun cuando los costos sean mayores.

Las energías renovables incluyen las energías solar directa (fotovoltaica o térmica), eólica, geotérmica, mareomotriz y toda aquella que sea producto de la influencia del sol sobre nuestro planeta, incluyendo la biomasa. Esta segunda civilización solar, prevista para este siglo, estará fuertemente vinculada al uso del hidrógeno como vector energético.

Las energías renovables rara vez están próximas a los centros de consumo, por ello es necesario convertirlas en energía eléctrica y distribuir las a través de costosas redes. Una alternativa es utilizarlas para generar hidrógeno, lo que daría origen a una economía basada en este gas. El hidrógeno puede obtenerse a partir de fuentes renovables, básicamente utilizando la energía eléctrica producida por estas para electrolizar agua, o por reformado de biomasa, un proceso químico donde un hidrocarburo o la biomasa son transformados en una mezcla de H_2 y CO_2 . Las emisiones totales de este último gas son sustancialmente menores a las que se derivan del combustible fósil en una central termoeléctrica.

El hidrógeno, como vector energético, finalmente convertido en energía eléctrica en las celdas de combustible es tan limpio como la fuente de energía que se utilice en producirlo.

En la actualidad el reformado de gas natural es el método más económico de producir H_2 . Sin embargo, falta todavía para que el costo de transporte sea competitivo si se usan celdas de combustible con H_2 en lugar de vehículos con motores de explosión alimentados con nafta, a pesar que una celda de combustible alcanza rendimientos del 45-50%, mientras que un motor a explosión no supera el 25%.

En este desarrollo competitivo jugará un rol fundamental la química de catalizadores, y de materiales en general. El desarrollo de nuevos catalizadores nanoparticulados ha comenzado a aumentar la eficiencia energética del reformado convencional de gas natural al reducirse drásticamente las temperaturas de los procesos fundamentales, incluyendo la eliminación del CO, requisito importante para su uso en celdas de combustible.

Existen varios tipos de celdas de combustible, pero las que se adaptan más convenientemente a usos móviles (vehículos) o portátiles son las de baja temperatura, llamadas celdas de membrana de intercambio de protones (PEM). El ánodo y el cátodo de una celda de combustible están formados por nanopartículas de platino (2 a 5 nm de diámetro) soportadas sobre un material carbonoso conductor electrónico de corriente. La conducción iónica la realizan los protones a través de la membrana conductora.

El corazón de una celda de combustible es el conjunto electrodo-membrana, es decir el resultado de unir los catalizadores anódico y catódico soportado sobre un material carbonoso conductor a la membrana conductora de protones. En la interfaz electrodo-membrana, de unos pocos micrones de espesor, se produce la llamada región de tres fases: catalizador metálico, gases (H_2/O_2) y la membrana hidratada. Actualmente se acepta que la nanoestructura de esta región es fundamental para un funcionamiento eficiente de la celda. Los desafíos actuales referidos a los catalizadores para la reacción de oxidación de hidrógeno (HOR) y de reducción de oxígeno (ORR) son: (i) El reemplazo parcial o totalmente el Pt por otros metales (por ejemplo aleaciones Pt/Rh), para abaratar costos y aumentar la tolerancia del catalizador anódico a la presencia de impurezas,

especialmente CO.

(ii) El desarrollo de catalizadores con mayor eficiencia para oxidar oxígeno, ya que la ORR es la etapa limitante en la cinética electroquímica de una celda PEM.

(iii) La optimización del tamaño y estructura de los catalizadores y el tipo de soporte utilizado para facilitar el transporte de masa en los mesoporos. Es posible electrodepositar Pt y aleaciones de Pt con otros metales con estructura y tamaño de poros predeterminados utilizando distintos tipos de mol-des supramoleculares. Los materiales soportes de naturaleza grafitica, incluyendo nanotubos de carbono empiezan a ser estudiados como alternativa al clásico carbón Vulcan y es de esperar que en los próximos años el grafeno haga su irrupción en este tipo de dispositivos y también en baterías avanzadas e incluso en el almacenamiento de hidrógeno.

(iv) La producción de membranas más conductoras y durables que las de Nafion, que puedan operar a temperaturas superiores a $120^\circ C$. Una estrategia es la formación de composites de materiales inorgánicos con Nafion, que mejoren sus propiedades de hidratación y conducción a altas temperaturas, pero también se recurren a otros tipos de polímeros térmicamente más estables. Las membranas de polibenzimidazol (PBI) parecen ser buenas candidatas para el desarrollo de celdas PEM de alta temperatura ($150-180^\circ C$). Estas membranas conducen protones al doparlas con ácido fosfórico, mediante un mecanismo tipo Grotthuss donde interviene el ácido inorgánico y el grupo imidazol. Otra alternativa que comienza a explorarse es el uso de matrices mesoporosas inorgánicas cuyos poros pueden ser funcionalizados con grupos ácidos (por ejemplo del tipo sulfónico). Otros apuestan a eliminar totalmente el agua del electrolito y ensayan distintos tipos de conductores protónicos, incluyendo líquidos iónicos. Las celdas de combustible PEM son tal vez las más cercanas a la comercialización, pero hay otros tipos de celdas de combustible de alta temperatura que utilizan otro tipo de electrolitos para conducir la carga entre los electrodos. La más prometedora parece ser la celda de combustible de óxido sólido, donde el electrolito es un sólido conductor de carga por vacancias de óxido, como

ZrO₂ (circonia) dopada con ytria o ceria. La temperatura de operación es de 900-1000°C y se usan como electrodos diversos materiales nanoestructurados, como perovskitas. El principal objetivo en el desarrollo de estas celdas es encontrar materiales que permitan una operación eficiente a temperaturas intermedias (600-700°C), lo que disminuirá notablemente su costo. Estas celdas pueden tener una eficiencia de conversión mayor que las PEM y por trabajar a altas temperaturas puede usar como combustible gas, biogas y otros hidrocarburos.

4. La Química en la Argentina

La reciente creación del Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva (MINCyT) ha jerarquizado la actividad científico-tecnológica, incluyendo la Química. El Ministerio cuenta con una serie de áreas e instituciones propias, y además coordina las actividades desarrolladas en instituciones que dependen de otros ministerios. Las instituciones propias son el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), la Agencia Nacional de Promoción de la Ciencia y la Tecnología (ANPCyT, o Agencia) y la Fundación Argentina de Nanotecnología (FAN). La coordinación de actividades del Gobierno Nacional se realiza a través del Gabinete Científico Tecnológico (GACTEC) y del Consejo Interinstitucional de Ciencia y Tecnología (CICYT). El GACTEC reúne a los Ministros de los cuales dependen las instituciones, y el CICTyC a los Presidentes de las instituciones.

El Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), la Comisión Nacional de Actividades Espaciales (CONAE), la Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), el Instituto Nacional de Tecnología Industrial (INTI), el Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria (INTA), la Administración Nacional de Laboratorios e Institutos de Salud (ANLIS), el Servicio Geológico Minero (SEGEMAR), el Instituto Nacional del Agua (INA), el Servicio de Hidrografía Naval, el Instituto Nacional de Investigación Pesquera (INIDEP), el Instituto de Investigaciones Científicas y Técnicas para la Defensa (CITEFA) participan del CICTyC. También participan del mismo el Consejo Interuni-

versitario Nacional (CIN) y el Consejo de Rectores de Universidades Privadas (CRUP). En todas estas instituciones se desarrollan actividades relacionadas con la Química. También se hace Química en otras instituciones como el Servicio Meteorológico Nacional y el Instituto Antártico Argentino. Por su importancia, describiremos más abajo en detalle la situación de la Química en CONICET, y haremos menciones breves a algunas de las otras instituciones, las más relevantes en función de la inserción de la Química en ellas. El MINCyT se ha estructurado en dos Secretarías sustantivas, que ponen de manifiesto su visión de la gestión de la Ciencia y la Tecnología: La Secretaría de Planeamiento y Políticas en Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva, y la Secretaría de Articulación Científico Tecnológica. Sus tareas son pues el planeamiento estratégico de la actividad científico tecnológica, lo que incluye una fuerte tarea de articulación y de evaluación de las diversas instituciones participantes. Debemos esperar una creciente intervención en planificación, a través del direccionamiento de fondos, una creciente importancia en la regionalización, y una creciente presión para la realización de autoevaluaciones y evaluaciones externas de las instituciones y programas. Se ha dicho:

La ley orgánica de ciencia, tecnología e innovación creó una nueva institucionalidad para la gestión pública de los asuntos científicos-tecnológicos nacionales. El aporte central de la ley es que formaliza tres instrumentos de coordinación sistémica orientados a la construcción permanente de consensos orientadores de medidas, acciones y planes públicos (el CICYT, el COFECYT y el GACTEC)...

...En conexión con el debate acerca de los resultados logrados del plan y con la hipótesis de la existencia de serias insuficiencias de coordinación institucional, se plantea iniciar el debate de un régimen tecnológico nacional (RTN). Este régimen tecnológico provocaría un fuerte efecto de articulación positiva de intereses en el sistema científico-tecnológico nacional. El enfoque está inspirado en las ideas del físico argentino Jorge Sábato.

El RTN profundizaría el desempeño de los orga-

nismos de coordinación sistémica (CICYT, COFECYT y GAGTEC) en tanto que actuaría como un factor catalizador de inversiones públicas en actividades de I+D. La determinación del RTN supone, a la vez, elegir y descartar áreas de conocimiento y, por ende, concentrar el esfuerzo en un grupo limitado de campos tecnológicos que constituyan la Estrategia Nacional de Dominio Tecnológico.

Todas estas reflexiones sobre la totalidad del sistema de ciencia y técnica tienen como es obvio fuertes implicancias para el desarrollo de la Química. En particular, es importante reflexionar sobre los mecanismos y criterios de evaluación de Investigadores y Proyectos. Ha de resultar cada vez más necesario evaluar críticamente el carácter del problema que aborda el investigador en un Proyecto, centrandolo en su carácter novedoso, y en el uso de herramientas experimentales o teóricas modernas y adecuadas. Además, habiéndose señalado la importancia de la irrupción de las ciencias integradas, en las que las fronteras disciplinares tradicionales desaparecen, deberá promoverse la integración transdisciplinar. Sin embargo, a la hora de las evaluaciones (evaluaciones por pares), priman muy fuertemente los criterios disciplinares. Es necesario un debate profundo para aclarar cómo se debe evaluar un Investigador o Proyecto transdisciplinario, sin ponerlo en desventaja frente a los enfoques muy altamente especializados. Los proyectos estratégicos y las redes son un paso adelante para promover la investigación sin acotarla a límites disciplinares. La solución de fondo llegará sólo a través de una adecuada actitud de los pares evaluadores.

Dentro de las acciones del MINCyT vale la pena destacar el Programa Red de Argentinos Investigadores y Científicos en el Exterior (Raíces), establecido por Ley 26.421, que tiene como objetivo, entre otros, facilitar el retorno al país de científicos argentinos. En 2011 se ha concretado la repatriación número 800, que corresponde a una investigadora joven de la Química, originaria de Buenos Aires y que se radicó en Mar del Plata. La Agencia es en la actualidad un organismo cen-

tral para la financiación de la Ciencia y la Tecnología. Cuenta con cuatro instrumentos centrales, los Fondos: Fondo para la Investigación Científica y Tecnológica (FONCyT), Fondo Tecnológico Argentino (FONTAR), Fondo Fiduciario de Promoción de la Industria del Software (FONSOFT) y Fondo Argentino Sectorial (FONARSEC). Con la posible excepción del FONSOFT, son todos altamente relevantes para la Química.

La Agencia dispone de fondos del Tesoro Nacional, de Préstamos del Banco Interamericano de Desarrollo (BID), de préstamos del Banco Internacional de Reconstrucción y Fomento (BIRF), del recupero del financiamiento reembolsable y provenientes de convenios de cooperación con organismos o instituciones nacionales e internacionales. Los recursos públicos son en parte otorgados a la Agencia para su administración como responsable de la aplicación de la Ley 23877 de Promoción y Fomento de la Innovación Tecnológica; y de la Ley 25.922/04 (de Promoción de la Industria del Software). El Cuadro III muestra algunos datos estadísticos provistos por la Agencia.

Por su importancia central en la financiación de la investigación en Química, los métodos de evaluación de proyectos para su eventual financiación están siempre bajo la lupa de la comunidad Química. Mientras que la evaluación en sí misma no se realiza por un sistema de comparación y competencia, la asignación de fondos resulta de la calificación recibida individualmente por cada proyecto. Este mecanismo puede generar evaluaciones que no son equivalentes, y que reflejan las características de los pares evaluadores que actúan en cada caso.

Es opinión personal de uno de los redactores de este documento (MAB) que, en la medida en que todo proyecto razonable resulte financiado en la programación trienal, esta característica no incide demasiado en el sistema en su conjunto. Sin embargo, en épocas de poca disponibilidad de fondos, una propuesta puede tener éxito o fracasar en su búsqueda de financiación, de forma muy aleatoria, poco vinculada con la calidad intrínseca del proyecto.

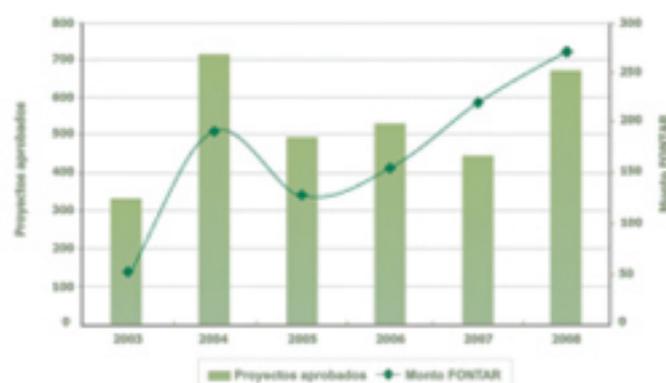
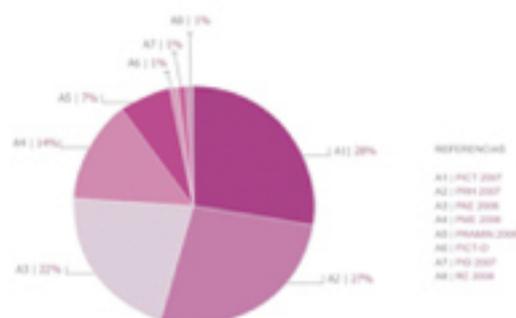
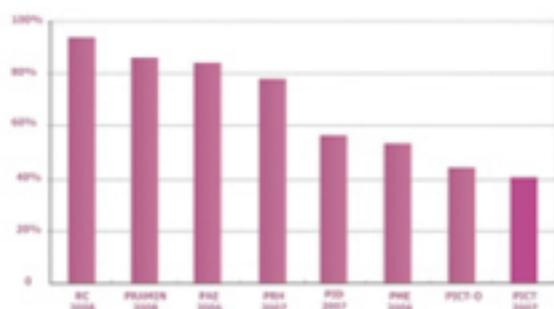
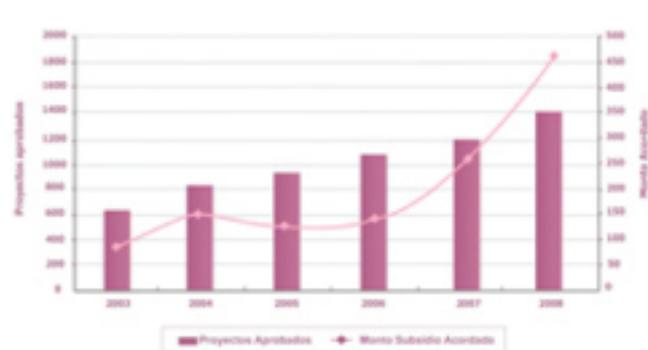
4.1. Las Universidades y la formación de recursos humanos

La mayoría de las Universidades Nacionales tradicionales, y varias de las más nuevas, ofrecen carreras de grado en Química. La Licenciatura en Química existe en las Universidades de Buenos Aires y Nacionales de La Plata, Córdoba, Tucumán, Sur (Bahía Blanca), San Luis, Santa Fe, Rosario, Río Cuarto, Salta, Mar del Plata. Otras Universidades ofrecen carreras de grado menos tradicionales, en las cuales hay una fuerte impronta química (Licenciatura en Biotecnología, Análisis Ambiental, etc.).

Recientemente, el Foro de Decanos de Química (Fodequi), ha propuesto pautas para la definición de incumbencias del título de Licenciado en Química o en Ciencias Químicas, estándares para la acreditación de las carreras, y contenidos de los planes de estudio. En este último sentido, propone como áreas temáticas necesarias las subdisciplinas tradicionales de la Química. Este rasgo puede conducir a una rigidez curricular inconveniente, aunque es importante consignar que se proponen áreas temáticas y no asignaturas, lo que permite cierto grado de flexibilidad para atender las tendencias modernas de integración entre áreas. Las áreas temáticas necesarias cubren el 74% de la carga horaria total.

Cuadro III: Datos Estadísticos de la ANPCYT

(fuente: página web de la Agencia)



Evolución de los proyectos adjudicados y montos acordados por FONCYT durante el período 2003-2008 (en millones de \$)

Proporción de los proyectos adjudicados por FONCYT en relación a los presentados durante 2008

Distribución de los montos acordados por el FONCYT por línea de financiamiento abierta durante 2008

PICT: Proyectos de Investigación Científica y Tecnológica; PICT-O: Proyectos de Investigación C&T Orientados; PID: Proyectos de Investigación y Desarrollo; PME: Proyectos de Modernización de Equipamiento; PAE: Programa de Áreas Estratégicas; PRAMIN: Proyectos de Adecuación y/o Mejora de Infraestructura; PRH: Programa de Recursos Humanos; RC: Reuniones Científicas

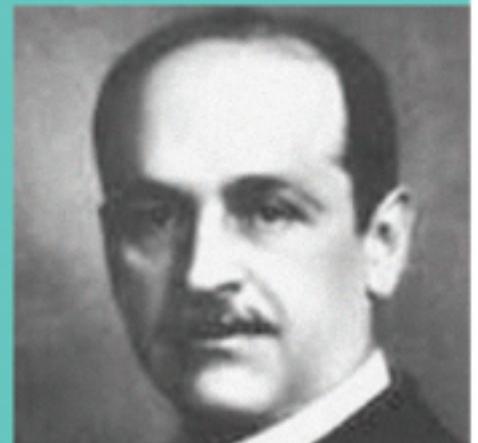
Evolución de los proyectos y montos aprobados por FONCYT durante el período 2003-2008 (en millones de \$)

Las Universidades ofrecen también programas de posgrado, concretamente Doctorados en Química, y Maestrías diversas relacionadas con la problemática ambiental, de salud, de materiales, etc. También hay oferta académica en Química en varias universidades

privadas. El Cuadro IV muestra una breve descripción de dos programas de doctorado, uno tradicional y uno reciente. Es de desear que este Cuadro en el futuro pueda enriquecerse con descripciones de programas de otras Universidades.

CUADRO IV. EL POSGRADO EN EL ÁREA DE LA QUÍMICA EN LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMÁN (M.E. Folquer)

La Universidad de Tucumán es una de las más tradicionales del país. Se inauguró oficialmente el 25 de mayo de 1914. El rector-fundador y gestor fundamental fue el Dr. Juan B. Terán (ver foto), quien afirmó que "como toda fundación intelectual, la apertura de la casa es el punto de partida de una evolución indefinida". El proyecto fundador, sintetizado en el lema 'Pedes in terra ad sidera visus' (Los pies en la tierra y la mirada en el cielo), le asigna una vocación regional con carácter moderno, atenta a la ciencia de la época y abierta al mundo. Nacionalizada en 1921 con la promulgación de la Ley 11.027, la UNT comienza una nueva época en donde la docencia y la investigación van a ser sus objetivos centrales.



La Universidad Nacional de Tucumán (UNT) acredita una extensa y productiva trayectoria en actividades de posgrado en el área de la Química, iniciada a mediados de la década del '50, en la que egresaron los primeros Doctores en Química. A partir de 1989, se crea el Programa de Posgrado en Ciencias Químicas de la UNT, conducente a la obtención de los grados académicos de "Magíster en Ciencias Químicas" y "Doctor en Ciencias Químicas". La CONEAU categorizó al Doctorado como "A" y a la Maestría como "B" (esta última, por el bajo número de egresados) en el año 2003,

destacando en las respectivas resoluciones, que ambas carreras "superan los estándares y criterios de evaluación". En el cuerpo docente del Programa participa un considerable número de Profesores visitantes de otras Universidades y centros de investigación del país. Entre Doctores en Química y Doctores en Ciencias Químicas se cuentan, hasta la fecha, 94 egresados. Actualmente, se encuentran desarrollando sus trabajos de tesis doctorales 37 estudiantes, a través de becas del CONICET, de la ANPCyT y de la UNT.

EL POSGRADO EN EL ÁREA DE LA QUÍMICA EN LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN MARTÍN

La UNSAM es una de las universidades nacionales de creación reciente (se creó en el año 1992). En 2002 creó el Doctorado en Ciencia y Tecnología, Mención Química (DCTMQ), que se sumó a los Doctorados en Ciencia y Tecnología anteriores (menciones en Materiales y en Física). El DCTMQ fue acreditado como An por CONEAU, y se desarrolla en un esquema de colaboración con CNEA, CITEFA e INTI. A la fecha, se registran 13 egresa-

dos, y una matrícula actual de alrededor de 20 alumnos. Este doctorado pone fuerte énfasis en la Química Ambiental (es parte de la oferta académica del Instituto de Investigación e Ingeniería Ambiental, 3iA), y acepta la participación de egresados de diversas carreras de grado, que lleven a cabo sus estudios doctorales con una mirada desde la Química. Es por lo tanto fuertemente interdisciplinario.

Las modalidades descriptas permiten que una buena parte de los Licenciados en Química se inserten adecuadamente en el sistema productivo en la actualidad, dándose la situación de que son bien recibidos también los que poseen un nivel de Doctorado. Muchos egresados pasan también a integrar las plantas de los organismos del CICTyC. Las actuales circunstancias de un mayor apoyo estatal a la investigación científica promueven un fuerte direccionamiento de los egresados universitarios hacia esa actividad, ya sea en las propias universidades o en los otros organismos del CICTyC. La articulación de la formación de recursos humanos de posgrado entre el CONICET y el sistema universitario se manifiesta en la actualidad a través del requerimiento de inscripción de los becarios en un Doctorado acreditado por CONEAU: Se pueden visualizar otros posibles mecanismos de articulación complementarios, que apunten a incentivar la inscripción y participación de graduados universitarios en tareas de I&D. Existen buenas experiencias de articulación entre el CONICET y las UU.NN., que deberían ampliarse. Una de ellas es la de facilitar tempranamente el contacto de los estudiantes de grado con los grupos de investigación. Para ello, y a modo de ejemplo, UBA sostiene un Programa de Becas Estimulo para alumnos de grado en su último tercio de la Carrera. Para algunos investigadores, estos programas son buenos ya que acercan a los estudiantes al trabajo científico y aplicado, pero requieren de medidas complementarias para evitar sesgos y definiciones de perfiles especializados en forma demasiado temprana. Otra vertiente se relaciona con la llegada a las Escuelas Medias, para estimular las vocaciones químicas. El Programa de Olimpíadas es una buena iniciativa, que ha adquirido continuidad en el tiempo. En la actualidad, el número de Escuelas y estudiantes participantes se ha estabilizado (alrededor de 120 y 1500, respectivamente, en todo el país). Una ampliación de este programa requiere de un compromiso mayor de las universidades en apoyo a la capacitación de Profesores, entre otras cosas. Otras actividades que tienen un buen impacto en la promoción de la disciplina entre los estudiantes secundarios son las Jornadas especiales de difusión de la Química en las Facultades, que pueden

también incluir pasantías breves de los jóvenes en los grupos de investigación, en su etapa final del ciclo medio. Un aumento efectivo de las vocaciones puede generarse si las Universidades, así como los Centros Regionales del CONICET, o bien los Institutos directamente, desarrollan este tipo de acciones en forma continuada y destinando recursos específicos para ello.

Tal vez el problema más importante es el diseño de acciones para garantizar un buen nivel, cualitativo y cuantitativo, de egresos en las Licenciaturas en Química. Las Universidades argentinas se ven afectadas por la escasa movilidad interna que caracteriza al país, especialmente en la dirección desde los centros más desarrollados hacia la periferia. Ello conduce a una escasa fracción de docentes formados en otras unidades académicas, lo que atenta contra la fertilización de ideas y proyectos. Para propender a una formación más sólida, completa y moderna en todas (y cada una) de las cinco disciplinas tradicionales mencionadas, al tiempo de ofrecer opciones docentes integradoras, serán muy convenientes acciones tendientes a incrementar la movilidad de Profesores, Investigadores y estudiantes de los Doctorados. Dicha movilidad debe darse tanto hacia los centros más recientes como hacia los centros más consolidados. Se necesita para ello disponer de mejores herramientas y de facilidades logísticas y económicas. Estas acciones deben conducir a un incremento en calidad y cantidad de los proyectos de investigación colaborativos. Debido a los requerimientos experimentales apuntados para llevar adelante una Química de alto nivel, es necesario contar con algunos Centros muy bien equipados, y sobre todo garantizar el acceso a los mismos de los investigadores y estudiantes de las Universidades menos dotadas. Las limitaciones locales en equipamiento no constituyen hoy una razón valedera para no abordar ciencia de alto nivel. También es necesario superar la arraigada concepción de que los trabajos colaborativos con muchos autores perjudican a un investigador al momento de la evaluación de su desempeño científico individual. Cabe hacer notar que existe un incipiente aumento de la movilidad en los años recientes, que es necesario aumentar significativamente. Cabría enfatizar que ello es más que ne-

cesario en el nivel del posgrado. Las estadías "externas" (entendiendo por éstas a los traslados al exterior como a otros centros de nuestro país) no deben comprender necesariamente tiempos prolongados.

Es también importante apoyar la realización de acciones de formación llevadas a cabo en forma colaborativa por varias universidades, y con mecanismos que permitan financiar la participación de estudiantes de todo el país. Las Escuelas de Verano y la Escuela Sol-Gel son ejemplos de este tipo de acciones.

Finalmente, cabe esperar un ordenamiento de las acciones colaborativas institucionales entre las universidades y los organismos de promoción. Muchas universidades brindan apoyo a las tareas de I&D de su personal; estas acciones, administradas sabiamente, deben complementar los subsidios de CONICET y de ANPCyT, teniendo en cuenta situaciones locales dignas de consideración. Pero tal vez la oferta más importante de las universidades es la de cargos de dedicación exclusiva. Esta oferta, bien administrada, puede constituirse en un instrumento muy idóneo para impulsar la necesaria radicación de investigadores jóvenes en el interior, siempre que se les abran las puertas y se les brinden incentivos concretos de despegue en su trabajo.

4.2. El CONICET, sus Centros Regionales y sus Unidades Ejecutoras (Fuente: V. A. Macagno)

El CONICET es la Institución gubernamental fundamental para la promoción y la ejecución de la ciencia en la Argentina. En esta reseña nos referiremos centralmente a la Química, inscrita en la Gran Área de las Ciencias Exactas y Naturales (KE), junto con las Ciencias de la Tierra, Agua y Atmósfera, con las Matemáticas y Computación, con la Física y con la Astronomía. Cabe anticipar que muchos aspectos de la Química, particularmente los de aplicación, son también tratados en otras Áreas: KA) Ciencias Agrarias, de la Ingeniería de los Materiales, que incluye a la Ingeniería de Procesos. KB) Ciencias Biológicas y de la Salud, donde se incluye entre otras a la Bioquímica. Estas integraciones cobran especial rele-

vancia a luz del surgimiento de las grandes superciencias de los materiales y biomoleculares. Visto el notorio crecimiento en la actividad del CONICET en la última década, se advierte una fuerte política de descentralización regional, a través de la creación de los Centros Científicos Tecnológicos (CCT), que han mejorado la eficiencia del trabajo administrativo. Esta política es muy dinámica, y nos remitimos a la página web del CONICET para una mirada detallada. Una labor similar se advierte en la creación de nuevas Unidades Ejecutoras (Institutos, Centros, Unidades en Red), que comprende a todo el país, y que se está intensificando en los tiempos recientes.

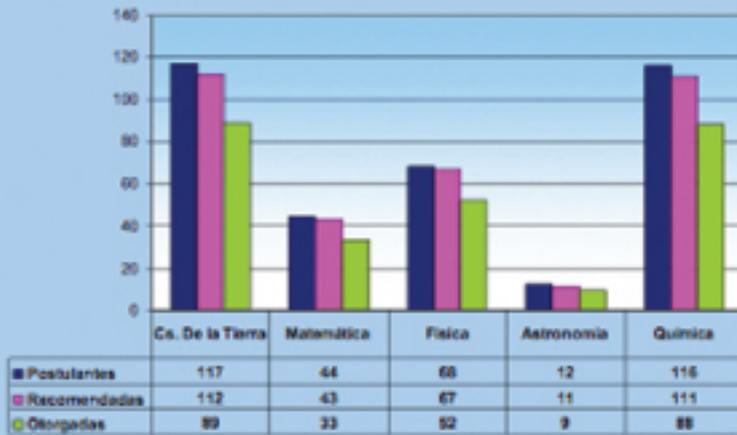
Los miembros de la Carrera del Investigador Científico (CIC) en el campo de la Química son 405, estimados a diciembre de 2010, sobre un total de 6.350 en todas las Áreas y Categorías. De los 405, se registran 18 Superiores, 69 Principales, 102 Independientes, 125 Adjuntos y 91 Asistentes. Como se ve, una pirámide razonablemente bien estructurada, excepto en la base, donde se arrastra la situación de restricción de ingresos de fines de 1990 y principios de 2000. Dichos rasgos se observan también en las demás disciplinas. La política actual de ingresos del CONICET está paliando esta distorsión. Se estima que cerca del 70% de los Investigadores Químicos de CONICET desarrollan su actividad en Unidades Ejecutoras. Los Institutos de Química, ordenados según su localización y número de Investigadores de CONICET, son: 1) La Plata (78), agrupados en INIFTA (63) y CEQUINOR (15). 2) Buenos Aires (70), agrupados en INQUIMAE (36), CIHIDECAR (21) y UMYMFOR (13). 3) Córdoba, INFIQC (67). 4) Rosario, IQUIR (30). 5) San Luis INQUISAL (11). 6) Tucumán/ Santiago del Estero, INQUINOA (19). 7) Bahía Blanca, INQUISUR (20). En general, en esos institutos trabajan además investigadores de otras instituciones (especialmente docentes universitarios con dedicación exclusiva). Además de estas Unidades Ejecutoras de CONICET, existen importantes centros de buena concentración en la actividad química, en diversas Universidades Nacionales, destacándose Río Cuarto por el número y amplitud del desarrollo de la disciplina, así como en Instituciones como la CNEA, INTI, etc. Cabe una mención al número de 470 Becarios en

Becas Tipo I – Convocatoria 2009



Distribución de Becas Tipo I en la Gran Área Ciencias Exactas y Naturales, 2009

Disciplinas del Gran Área de Ciencias Exactas y Naturales

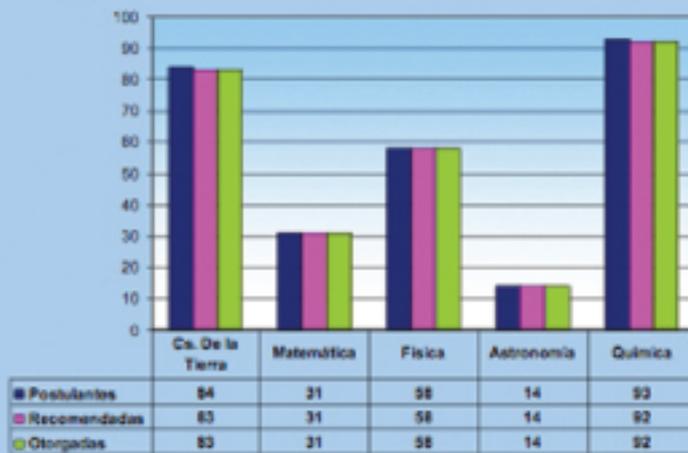


Becas Tipo II – Convocatoria 2009



Distribución de Becas Tipo II en la Gran Área Ciencias Exactas y Naturales, 2009

Disciplinas del Gran Área de Ciencias Exactas y Naturales

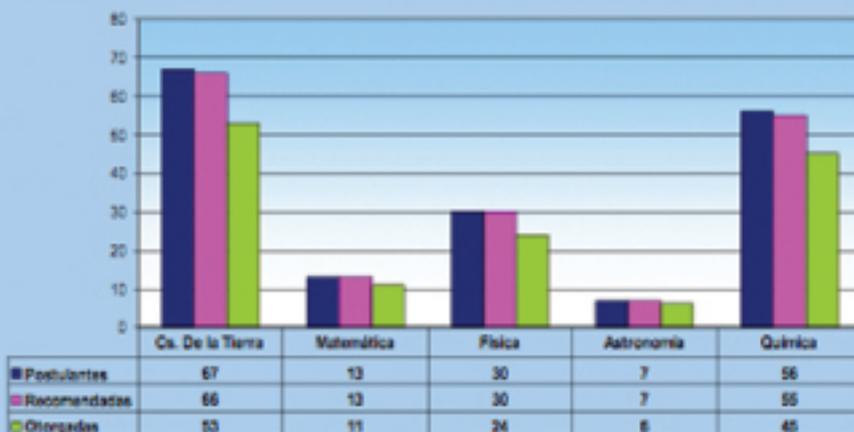


Becas Posdoctorales – Convocatoria 2009

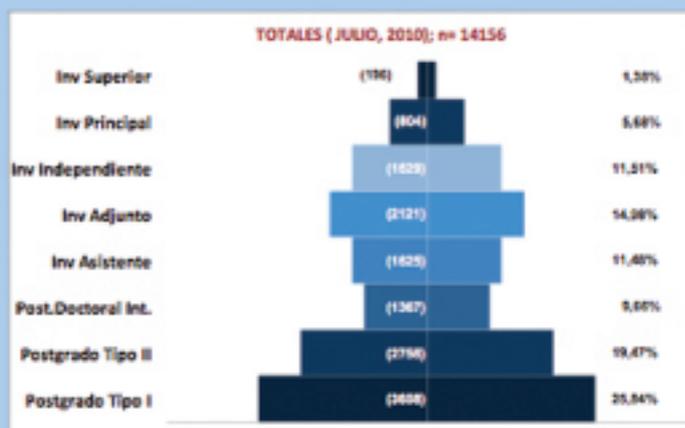


Distribución de Becas Posdoctorales en la Gran Área Ciencias Exactas y Naturales, 2009

Disciplinas de la Gran Área de Ciencias Exactas y Naturales

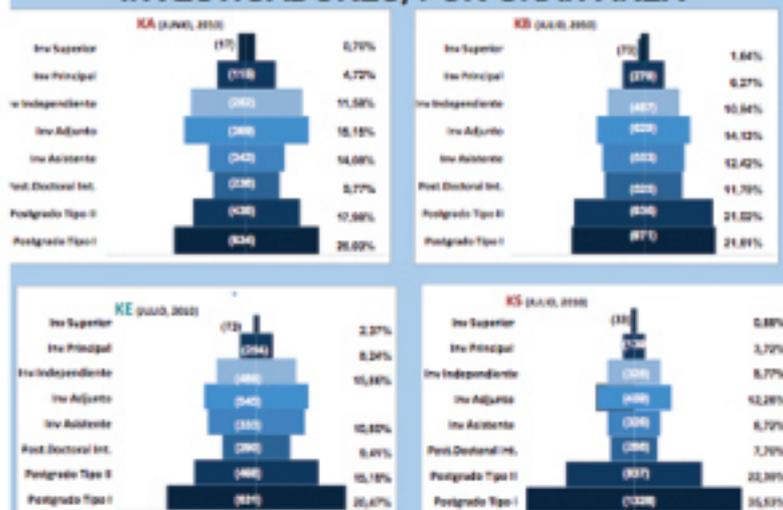


Recursos Humanos



Números totales de Investigadores y Becarios de CONICET, por clase, 2010

DISTRIBUCIÓN de BECARIOS E INVESTIGADORES, POR GRAN ÁREA



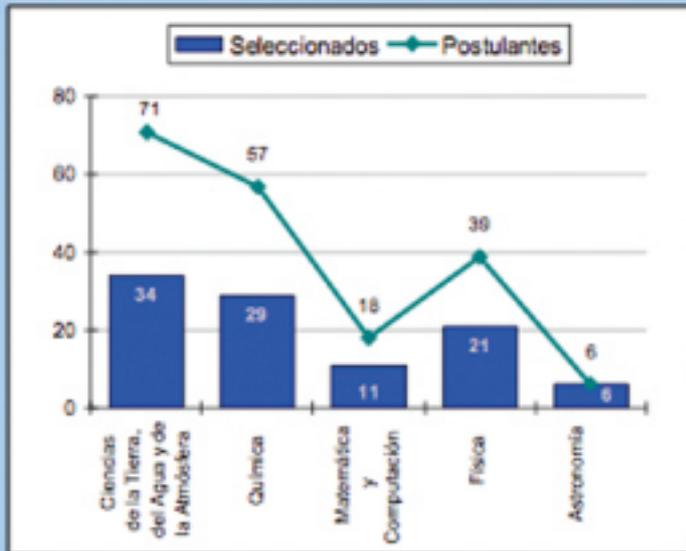
Números de Investigadores y Becarios de CONICET, por clase y por Gran Área, 2010

QUÍMICA

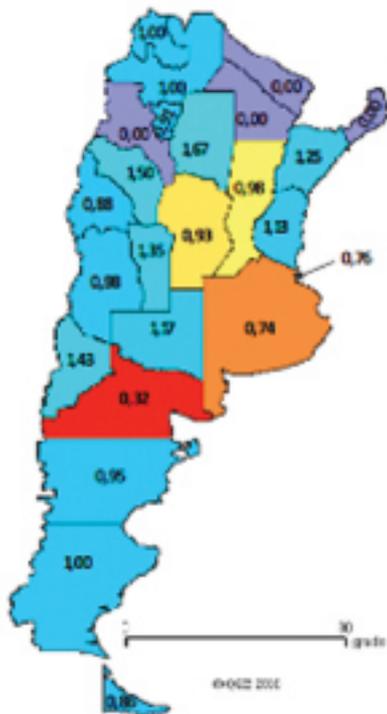


Números de Investigadores y Becarios de Química, por clase, 2010

Resultados CIC, Convocatoria 2010 por Disciplina en KE



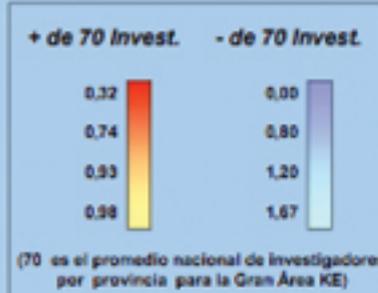
Postulantes e ingresantes a la CI en las disciplinas de la Gran Área Ciencias Exactas y Naturales, 2010



Relación Becario/Investigador, de KE por provincia

Relación Becario / Investigador, en la Gran Área Ciencias Exactas y Naturales, por provincia. Sólo en cinco distritos hay más de 70 investigadores: Buenos Aires, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Córdoba, Santa Fe y Río Negro

Referencias



4.3. Las otras Instituciones del Sistema de Ciencia y Técnica

De todas las instituciones que componen el CICTyC, hemos elegido realizar una breve descripción de aquellas en las cuales la investigación, el desarrollo, la innovación y los servicios químicos juegan un papel más importante. Hemos excluido además a CITEFA, en razón que la misma está en estos momentos en un proceso de re-estructuración que dificulta la descripción de la Química en su interior.

4.3.1. Comisión Nacional de Energía Atómica (www.cnea.gov.ar). CNEA está estructurada en Gerencias de Área, que se distribuyen en Centros Atómicos y Sedes Regionales. Hay actividades en Química en prácticamente todas las Gerencias de Área, todos los Centros Atómicos y en varias Sedes Regionales. CNEA fue la cuna de la metalurgia, bajo el impulso de Jorge Sábato, y aun en la actualidad desarrolla intensa actividad en temas químicos vinculados con la metalurgia (en especial, corrosión). También hay intensa actividad de tecnología química en los desarrollos que se hacen actualmente de nuevos combustibles nucleares. Además, existe una Gerencia Química (GQ) que tiene a su cargo mantener el conocimiento en las fronteras de la Química, y al mismo tiempo atender a las necesidades internas de todos los proyectos de CNEA. Los temas centrales que se estudian en la GQ son la Química del Agua como fluido de procesos, las suspensiones coloidales acuosas, y la síntesis de materiales nanoestructurados, diversos aspectos de la Química Ambiental, y el aprovechamiento de la energía solar térmica. También se centra en la GQ la ingeniería química de reactores (como CAREM) y centrales nucleares de potencia. También tiene a su cargo estudios y desarrollos vinculados con el Monitoreo y la Química Ambiental. A estas actividades se ha sumado recientemente la hidrometalurgia del uranio. La GQ es también responsable de proveer y atender la infraestructura de equipamiento para la Química Analítica que requieren los diversos sectores.

Como tantos otros proyectos ambiciosos de desarrollo tecnológico, el proyecto nuclear de CNEA entró en una crisis casi terminal durante la década

de 1990, cuando se discontinuó el apoyo oficial. La envergadura adquirida por CNEA y otros factores evitaron el desmantelamiento total, y la actividad entró en un período de "hibernación", durante el cual los grupos más activos buscaron financiación externa, en muchos casos diversificando sus objetivos. En la primera década del siglo XXI resurgió el apoyo a la actividad, que tiene actualmente proyectos ambiciosos en curso. En los últimos años se ha revertido la desatención a las necesidades de personal y de equipamiento, que había obligado a los sectores más dinámicos a buscar su financiación de fuentes externas, y con proyectos que no eran centrales para el desarrollo estratégico nuclear. En la actualidad, CNEA ha invertido sumas importantes en re-equipamiento, y se ha incorporado personal joven, bajo diversas figuras. Estas acciones han ido acompañadas de un requerimiento de atención preferencial a las necesidades del recientemente formulado Plan Estratégico de CNEA.

4.3.2. Instituto Nacional de Tecnología Industrial (www.inti.gov.ar). El INTI está estructurado en Centros de Investigación y Desarrollo. El área Química está integrada por seis centros: Biotecnología Industrial, Caucho, Contaminantes Orgánicos, Plásticos, Procesos Superficiales y Química. Éste último, INTI-QUÍMICA cuenta con una serie de líneas de trabajo: Aguas, Metales y Aleaciones, Productos Industriales, Productos Farmacéuticos, Productos de Limpieza y Cosmética, Productos del Petróleo y medioambiente. La Química está también muy presente no sólo en los otros centros del área Química, sino también en muchos Centros de otras áreas (como Alimentos; Construcción, Materiales y Procesos; Recursos Naturales y Medioambiente), y en sus diversos Centros Regionales. El Plan Estratégico de 2008 identifica como algunas de las iniciativas centrales para brindar soluciones a problemas comunitarios a las siguientes: Prevención, identificación y remediación de problemas de medio ambiente; Energías renovables y uso eficiente de la energía; Construcción masiva sustentable; Calidad y comercialización de alimentos. El INTI presta especial atención a su inserción en la actividad productiva real del país, y por ese motivo dedica muchos esfuerzos a resolver problemas de las actuales pe-

queñas industrias argentinas.

4.3.3. Instituto Nacional del Agua (www.ina.gov.ar). El INA es un organismo descentralizado dependiente de la Subsecretaría de Recursos Hídricos, que continúa la labor iniciada en 1973 por el Instituto Nacional de Ciencia y Técnica Hídricas (INCYTH). El INA debe satisfacer los requerimientos de estudio, investigación, desarrollo tecnológico y prestación de servicios especializados en el campo del conocimiento, aprovechamiento, control y preservación del agua tendiente a implementar y desarrollar la política hídrica nacional. Las actividades químicas se concentran especialmente en el Centro de Tecnología del Uso del Agua (CTUA), en el Programa Nacional de Calidad de Agua (PNCA), y en sus diversos Centros Regionales. Dentro del CTUA es de destacar el Laboratorio Experimental de Calidad de Aguas (LECA), que cuenta con moderno equipamiento para la caracterización de aguas (fruto de un convenio de colaboración con la Japan International Cooperation Agency, JICA).

4.3.4. Servicio Geológico Minero Argentino (www.segemar.gov.ar). El SEGEMAR, dependiente de la Secretaría de Minería de la Nación, muestra una fuerte participación de la Química a través del Instituto de Tecnología Minera (INTEMIN), que es responsable del proceso tecnológico para el sector Minero Argentino, realizando actividades de Investigación y Desarrollo, Transferencia y Servicios Tecnológicos. En particular, el Centro de Investigación de Procesamiento de Minerales, el Laboratorio Químico y el Centro de Investigación y Desarrollo de Materiales llevan adelante tareas químicas.

4.4. La cooperación regional e internacional

La globalización se ha manifestado en un incremento muy fuerte de los mecanismos de cooperación internacional, cuya administración corresponde especialmente a la Dirección Nacional de Relaciones Internacionales del MINCyT. También desempeña un papel importante el Ministerio de Relaciones Exteriores Comercio Internacional y Culto. Ha tomado especial relevancia la cooperación regional, en particular dentro del

MERCOSUR, y también en Iberoamérica (Programa CYTED de la cumbre de los gobiernos de la región). La cooperación binacional con el Brasil se canaliza a través de Centros Argentino-Brasileños, entre los que cabe destacar, por su relevancia para la Química y por los éxitos conseguidos, los de Biotecnología, Nanotecnología y Energía Sustentable.

Los países más desarrollados han realizado contribuciones cuantitativamente muy importantes al desarrollo de algunos espacios de I&D en Química. Como ejemplos, se puede mencionar el subsidio otorgado por la Deutsche Gesellschaft für Technische Zusammenarbeit (GTZ) que constituyó la base de la creación del INQUIMAE; o los subsidios de la Agencia de Cooperación Internacional de Japón (JICA) para el INA y CNEA, que permitieron el desarrollo del laboratorio de Análisis de Aguas y el Laboratorio de Monitoreo Ambiental, respectivamente.

La participación en los Programas Marco y/o en los Proyectos INCO de la Unión Europea es también una característica importante de la programación de I&D en Argentina en la actualidad. Cabe destacar el papel importante que han tenido algunos organismos alemanes en la cooperación binacional. Ya se mencionó GTZ, y cabe agregar el Servicio Alemán de Intercambio Académico (DAAD), la Fundación Humboldt y en menor medida la Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG). En el área Química la colaboración con EE.UU. a través de la National Science Foundation (NSF) ha sido más limitada.

Escapa a las posibilidades de este documento realizar propuestas concretas de acciones a emprender para mejorar e incentivar los grandes proyectos internacionales. Sólo haremos algunas consideraciones sobre los mecanismos de intercambio de recursos humanos.

En la práctica, el intercambio científico con los países centrales incluye principalmente la realización de estadias posdoctorales en dichos países, muchas veces financiadas por los organismos de nuestro país. La elección de temas y lugares se realiza en general con una total libertad académica, lo que hace deseable perfeccionar los mecanismos que garantizan el buen aprovechamiento de los importantes fondos desti-

nados a ello. Por otro lado, sería importante visualizar el establecimiento de una segunda línea de acción (que no interfiera con la anterior), destinada a promover ciertas áreas que se identifiquen como críticamente importantes. Las Asociaciones Científicas están en condiciones de sugerir medidas impulsoras en la dirección anterior, contribuyendo a jerarquizar la labor de las Oficinas de Cooperación Internacional a nivel de CONICET y otras instituciones.

La movilidad de investigadores formados es también prácticamente unidireccional, desde nuestro país hacia centros desarrollados. Este tipo de movilidad es fundamental, pero queda claro que faltan herramientas de promoción de visitas cortas y prolongadas de investigadores de otros países a nuestros laboratorios.

A nivel regional, los flujos de personal científico son apreciablemente diferentes. En especial, la Argentina sigue siendo un centro importante de formación de posgrado de estudiantes de Latinoamérica. Sin embargo, en el caso de Brasil, se repiten claramente nuestras características de país exportador de recursos humanos altamente calificados.

5. Conclusiones

Es interesante partir de las recientes reflexiones de G. Whitesides y J. Deutch (ref. 12), quienes proponen qué es lo que deben hacer los químicos.

1. Re-escribir el contrato social. Esto significa buscar inspiración en temas que la gente quiere se resuelvan, como agua, alimentos, salud, energía y ambiente, para definir desde allí temas de investigación fundamental. La Química puede mantener su curiosidad, en su ruta para encarar los grandes desafíos que plantea la sociedad en nuestros tiempos.

2. Deshacerse de las viejas estructuras disciplinares y, por ejemplo, fusionar los departamentos de Química y de Ingeniería Química.

3. Enfocarse en las fortalezas de la Química: cinéticas complejas, redes biológicas y ambientales, síntesis de nuevas moléculas y formas materiales, etc.

4. Enseñar a los estudiantes, más que usarlos como técnicos para poner a prueba hipótesis e ideas del director.

No todos estaremos de acuerdo con algunas o todas de estas ideas. Otros agregarán más acciones.... Sin embargo, pensar en estos desafíos puede servir para definir la hoja de ruta que nos lleve a nuevas estructuras académicas, a la optimización de las instituciones de promoción de la Química, y a la formación de recursos humanos más capacitados para competir en el mundo de la alta tecnología.

BIBLIOGRAFÍA

1 a) A.J. Arvía y R. Fernández Prini, Breve reseña histórica de la fisicoquímica en la Argentina, *Actividad* N° 3, p. 5-9, 1988; N° 4, p. 32-33, 1988; N° 5/6, p. 45-46, 1989. b) N. G. Abiusso, "Evolución de las Ciencias en la República Argentina 1923-1972", Tomo IX: Química, 1981.

2 J.M. Lehn, *Supramolecular Chemistry*, VCH, 1995.

3 En su conferencia Nobel de 1991, P. de Gennes se preguntaba qué era la materia blanda. La respuesta más reciente la dan J. Colomero, D. Richter y R. Hidalgo-Álvarez en el editorial de la reciente *International Soft Matter Conference 2010*: Actualmente, estamos seguros que la materia blanda se caracteriza por mezclas multicomponentes, amplios rangos de escalas de longitud y tiempo y muchos grados de libertad de interacción, lo que lleva a estructuras, comportamientos de fase y dinámicas complejas. Esto implica alta sensibilidad a campos externos y fenómenos de no-equilibrio significativos y ubicuos, y requiere un enfoque interdisciplinario que conecta la física teórica, experimental y computacional, la fisicoquímica, la ciencia de materiales y la biología. Más aun, hemos aprendido que biomateriales, coloides, membranas, polímeros, surfactantes y sus composites son buenos ejemplos de materia blanda. (*Soft Matter*, 2011, 7, 1245).

4 J.M. Lehn, From Matter to Life: Chemistry?!, *Resonance*, Marzo 1996, 39-54.

5 Por supuesto, la química molecular sigue teniendo relevancia. En especial, la síntesis orgánica es un campo de mucha actualidad, que ha dado lugar a tres de los últimos veinte Premios Nobel en Química.

6 J. Sjöström, *Beyond Classical Chemistry: Subfields and Metafields of the Molecular Sciences*, *Chemistry International*, Sept.-Oct. 2006, 9-15. Aquí se llama Superencias a las Ciencias Tecnológicas Integradas, lo que es cuestionable. El nombre que usamos nosotros es más neutro, y permite entender con facilidad que no toda la Química está inmersa en estas Ciencias Tecnológicas Integradas. Cabe mencionar que se ha dicho que no existen ciencias aplicadas, sino aplicaciones de las ciencias.

7 J. Sjöström, ver nota 6.

8 B. Bensaunde-Vicent e I. Stengers, *Historia de la Química*, Addison-Wesley/Universidad Autónoma de Madrid, 1997. ISBN: 84-7829-011-7.

9 H. W. Salzberg, *From Caveman to Chemist*, ACS, 1991.

10 Para designar estos fenómenos se suele usar el término transiente; según la Real ACADEMIA Española, el término correcto es transitorio.

11 H. Eyring no recibió el premio Nobel, pero en un artículo de B.G. Malmström y B. Andersson en la propia página oficial de la Organización Nobel se reconoce este hecho como una injusticia, que condujo a que se le otorgara en 1977 el Premio Berzelius, máxima distinción de la Real Academia Sueca de Ciencias: http://nobel-prize.org/nobel_prizes/chemistry/articles/malmstrom/index.html.

12 G.M. Whitesides y J. Deutch, *Nature*, 2011, vol 469, 21-22

13 Edición Temática de Chemical Society Reviews, Hybrid Materials, 2011, Issue 2, C. Sanchez, K. J. Shea, S. Kitagawa, Eds.

14 R.J. Corriu, N. Trong Anh, *Molecular Chemistry of Sol-Gel Derived Materials*, Wiley, 2009, Cap. 2.

15 C. Sanchez, G.J.A.A. Soler-Illia, F. Ribot, T. Lalot, C. R. Mayer, V. Cabuil, *Chemistry of Materials*, 2001, 13, 3061-3083.

16 En lengua culta argentina, caparazón es femenino.

17 Y ni hablar de la impermeabilidad de la exquisita tela del bicho canasto (*Oiketicus kirbyi*).

18 Lagarto de la familia Gekkonidae de la clase de los Saurópsidos.

19 K. Rurack, R. Martínez-Máñez, Eds. *The Supramolecular Chemistry of Organic-Inorganic Hybrid Materials*, Wiley, 2010.

20 S.J. Lippard, *J. Am. Chem. Soc.* 2010, 132, 14689.

21 H.W. Salzberg, *From Caveman to Chemist*, ACS, 1991

22 M.H.V. Huynh y T.J. Meyer, *Chem. Rev.* 2007, 107, 5004

23 J.R. Fernández, Importación de tecnologías capital-intensivas en contextos periféricos: el caso de Atucha I, *Revista Iberoamericana de Ciencia, Tecnología y Sociedad*, Vol. 6, n° 16, 9-37 (2010).

24 M.A. Blesa, Serie Grandes Temas Ambientales: Introducción, www.aargentinapciencias.org

25 J. Schnoor, *Environ. Sci. Technol.*, 2009, 43 (7), p 2192).

26 También el Banco Nacional de Datos Genéticos y la Fundación Sadosky.

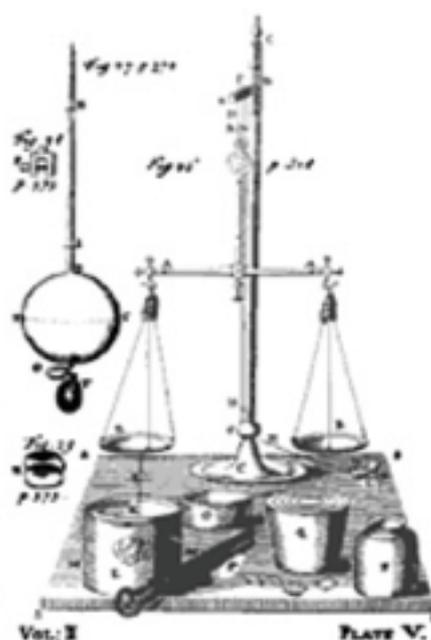
27 A. Herrera y L. Dughera, Elementos analíticos para la discusión del próximo plan nacional de Ciencia, Tecnología y Desarrollo, <http://palabrasclaves.wordpress.com/2009/04/11/regimen-tecnologico-nacional/>

28 <http://www.conicet.gov.ar/>

29 La actual GQ resultó de la fusión de los tradicionales Departamentos Química de Reactores, Química Analítica, y Fuentes Renovables y Uso Racional de Energía (de este último, sectores vinculados con la energía solar térmica y el monitoreo ambiental).

Los desafíos de la Química Analítica: la Quimiometría

Alejandro Olivieri, Instituto de Química de Rosario (IQUIR-CONICET), Suipacha 531, Rosario (2000)
olivieri@iquir-conicet.gov.ar



La balanza fue la herramienta esencial de los primeros químicos analíticos. A la izquierda, la imagen de una balanza analítica, publicada en 1477 por Thomas Norton en su libro *Ordinall of Alchemy*. Fuente:

<http://www.rexresearch.com/norton/norton.htm>

A la derecha, la balanza hidrostática de Robert Boyle, según se reproduce en el libro *History of Analytical Chemistry* de Ferenc Szabadvary, Gordon and Breach Science Publishers, 1960



Instrumentación analítica actual

A la izquierda, Equipo Agilent 1100 LC-QTOF para cromatografía líquida (LC) de ultra-alta resolución, con detección espectrométrica de masas (MS) basada en triple cuadrupolo y tiempo de vuelo (QTOF), recientemente instalado en el CCT-Rosario, y perteneciente a los institutos IQUIR (Instituto de Química de Rosario) e IBR (Instituto de Biología de Rosario). A la derecha, equipo Agilent de espectrometría de masas con fuente de plasma de acoplamiento inductivo (ICP-MS) operado conjuntamente por la Gerencia Química de CNEA y el Instituto de Investigación e Ingeniería Ambiental de la Universidad de San Martín, adquirido con fondos de ANPCyT e instalado en el Campus Miguelete de UNSAM

La Química Analítica se encuentra en los orígenes mismos de la Química. Los llamados assayers o testeadores desarrollaron métodos para la determinación de la pureza de metales mucho antes que la Teoría Atómico-Molecular fuera siquiera esbozada, ya en el siglo XV. No es intención de este trabajo realizar una descripción detallada de la situación actual de la Química Analítica. Existen una serie de temas que son de rigurosa actualidad:

- **Desarrollo de sensores específicos, en lo posible económicos y de rápida respuesta.**
- **Aplicaciones a la Química Ambiental, lo que incluye temas como sensado remoto, técnicas de muestreo, y métodos de análisis de conjuntos de datos abundantes.**
- **Aspectos legales de la Química Analítica: es cada vez más frecuente que deban resolverse conflictos técnicos en sede judicial, y ello implica que son necesarios laboratorios con capacidad de demostrar la calidad de sus resultados, a través de su trazabilidad, y bajo un sistema de garantía de la calidad**

De todos estos temas este artículo presenta algunas reflexiones preparadas por A. Olivieri sobre la Quimiometría, que trasciende las fronteras de la Química Analítica.

La quimiometría comprende, en términos generales, el desarrollo y aplicación de métodos matemáticos y estadísticos a la comprensión de fenómenos químicos. En particular, esta sub-disciplina ha tenido un impacto muy significativo en la química analítica, donde opera a través de tres actividades básicas: 1) la regresión o modelado cuantitativo de datos instrumentales, cuyo objeto principal es la cuantificación de analitos o predicción de propiedades macroscópicas en muestras complejas, y cuya manifestación más popular es la calibración multivariada, 2) la extracción de características relevantes de muestras u objetos a partir también de datos instrumentales multivariados, cuyo principal objetivo es la clasificación o discriminación de muestras como pertenecientes a dos o más clases, y 3) el diseño experimental y la optimización de experimentos, cuya meta es la obtención de las condiciones experimentales óptimas para llevar a cabo determinaciones analíticas.

Los métodos más difundidos de regresión multivariada, entre los que el ejemplo paradigmático es la regresión en cuadrados mínimos parciales, conocida por su sigla en inglés PLS (por partial least-squares), se desarrollaron en la década de 1960, debido a la necesidad de modelar datos espectroscópicos de infrarrojo cercano (conocidos por su sigla en inglés NIR, por near infrared) para de-

terminar, entre otras propiedades, contenido de aceite y proteína en semillas, octanaje en naftas, etc. Estas actividades resultaban de gran importancia para agilizar las operaciones analíticas en diversas industrias. Hoy en día la combinación NIR/PLS se aplica en forma rutinaria para determinaciones cuantitativas, control de calidad y seguimiento de procesos en diversas ramas de la industria: alimentaria, agropecuaria, farmacéutica, textil, papelera, petroquímica, etc. Sus características más salientes son la rapidez (lo que permite controles en línea y determinaciones en tiempo real) y la no invasividad (que posibilita mediciones cuantitativas en muestras intactas y en puntos primarios de producción). Merece destacarse, como aplicación de incomparable relevancia en el área de la salud, la determinación de glucosa en sangre de pacientes diabéticos mediante mediciones no invasivas con radiación NIR, es decir, sin tomar muestras del fluido biológico. Este desarrollo, aún en fase experimental pero ya en aplicación en algunos centros de salud en Estados Unidos, revolucionaría el control rutinario de la diabetes en el mundo.

Hoy la quimiometría está suficientemente madura como para haberse difundido en diferentes ramas de la química, no sólo la analítica, y ha pasado de la fase de desarrollo teórico que caracterizó los

años 1960-1990, a la fase de aplicación a una variedad creciente de áreas de interés. Esta tendencia puede observarse claramente en la dirección que están tomando las revistas líderes de la disciplina en el mundo: *Journal of Chemometrics* (Wiley) y especialmente, por su mayor impacto, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* (Elsevier) y *Journal of Chemical Information and Modeling* (American Chemical Society), en las que se observa una proporción significativa de trabajos que describen aplicaciones de estrategias quimiométricas conocidas a nuevos problemas, más que desarrollos de nuevas herramientas en sí mismas. Sin embargo, el horizonte investigativo continúa

expandiéndose: el interés académico actual se enfoca hacia modelos de calibración multivariada de estructura compleja, capaces de analizar datos instrumentales con varias dimensiones físicas. Un ejemplo típico son los datos matriciales obtenidos mediante cromatografía (líquida o gaseosa) con detección espectrométrica de masas: cada instrumento provee a los datos una dimensión. La estructura bidimensional resultante permite ventajas analíticas significativas, entre ellas, una mayor selectividad frente a la presencia de interferencias.

Determinaciones cuantitativas no invasivas, posibles gracias a la combinación de mediciones espectrales en el infrarrojo cercano y análisis quimiométrico: arriba, determinación simultánea de clorofila, nitrógeno y humedad en plantas intactas

(http://www.alibaba.com/product-gs/460211158/Portable_plant_nutrition_analyzer.html)



Abajo, medición continua de glucosa en sangre sin extracción del fluido biológico

(<http://www.diabetesnet.com/nod/285>)



La región del mundo con mayor desarrollo en quimiometría es Escandinavia, lo que quizás esté asociado al hecho fundacional del algoritmo PLS en Suecia por Stephan Wold en los años 1960, aunque también hay grupos fuertes en Bélgica, España, Estados Unidos y China. En Latinoamérica sobresale Brasil, con una tradición de trabajo en quimiometría y un importante número de grupos de investigación en diferentes universidades. El caso de la Universidad de Campinas en el es-

tado de San Pablo es ilustrativo de la clase de políticas de planificación que son frecuentes en nuestro país vecino. En los años 1980, varios becarios posdoctorales fueron ubicados en los laboratorios de investigación en quimiometría más prestigiosos del mundo, como los liderados por Desiree Massart en la Universidad Libre de Bruselas, Bélgica, y por Bruce Kowalski en la Universidad de Washington, Seattle, EEUU. Aquellos becarios externos brasileños son hoy profesores

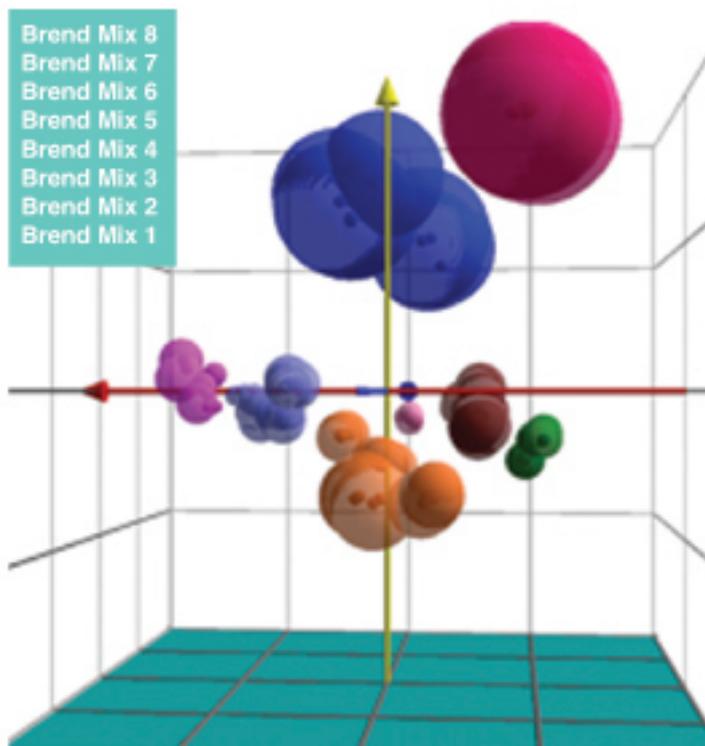
en la Universidad de Campinas, lideran grupos importantes de investigación, y han generado doctores, profesores e investigadores en la especialidad, que a su vez se han diseminado por todo Brasil.

En nuestro país, en cambio, este tipo de planificación es infrecuente. La quimiometría se ha desarrollado en Argentina de una manera relativamente caótica, dependiendo más de esfuerzos personales que de políticas institucionales. Si bien es creciente la tendencia a aprovechar las innumerables ventajas de la quimiometría entre químicos de todas las disciplinas, muy pocos grupos dedican hoy en día su trabajo a quimiometría básica. Estos últimos comenzaron su labor en años relativamente recientes (década de 1990), aunque han logrado en pocos años un cierto reconocimiento internacional, y continúan hoy en día con una generación de recursos humanos en el área que en el futuro puede ser fundamental para difundir y mantener el nivel de la disciplina en nuestro país.

Las dificultades que enfrentan estos grupos son, no obstante, muy grandes: entre las principales pueden mencionarse el aislamiento internacional y

la falta de programas específicos para el financiamiento de este tipo de investigaciones, que deberían considerarse de vacancia en nuestro país. Cuando el mundo desarrollado está preguntándose hacia dónde va la quimiometría, como puede verificarse en la literatura internacional, cuando los principales investigadores en la disciplina se cuestionan si esta será finalmente absorbida por aquellas que le requieren sus principales aplicaciones (química ambiental, metabolómica y otras disciplinas ómicas, por ejemplo), nuestro país se encuentra posicionado respecto de la quimiometría, como sucede en otras áreas científicas, en un estado aún fundacional, intentando algunos grupos aislados hacerse camino en la difusión y desarrollo de la disciplina.

Que la quimiometría es necesaria para otras disciplinas de pleno desarrollo en Argentina se demuestra por la cantidad de cursos, seminarios, talleres y otras actividades de docencia y cooperación que son requeridas por los químicos en general a los pocos grupos con experiencia en el tema. Es evidente que en quimiometría tenemos décadas de atraso respecto no sólo de los países centrales, sino de nuestro vecino Brasil.



Una aplicación de técnicas de clasificación en la industria alimentaria, en este caso de la panificación: diagrama tridimensional de discriminación de diferentes muestras de pan, basado en mediciones espectrales en el infrarrojo cercano realizadas sobre pan intacto. Cada volumen de diferente color representa la ubicación, en un gráfico llamado de componentes principales, de muestras de pan pertenecientes a distintas clases (<http://www.nextgenfoodus.com/article/Using-near-infrared-spectroscopy-in-the-food-industry/>)

1. La metabolómica estudia sistemas biológicos complejos: los constituidos por todas las moléculas de los intermediarios metabólicos, metabolitos, hormonas y otras moléculas señal, y de los metabolitos secundarios, que pueden constituir un sistema biológico. En la metabolómica se analizan sistemas dinámicos, que cambian con el tiempo; por lo tanto su estudio requiere de mediciones seriadas en el tiempo
2. Otras disciplinas ómicas: la genómica (estudio integral del funcionamiento, el contenido, la evolución y el origen de los genomas), la proteómica (estudio a gran escala de las proteínas, en particular de su estructura y función) y la transcriptómica (estudio del nivel de expresión de genes, empleando técnicas que permiten analizar miles de moléculas de mRNA al mismo tiempo)



De Aristóteles a Noether: Una historia sobre la construcción de los conceptos de la Mecánica

Jorge N. Cornejo

Facultad de Ingeniería-Universidad de Buenos Aires-Gabinete de Desarrollo de Metodologías de la Enseñanza

jcornej@fi.uba.ar

Palabras clave:

historia, física, mecánica, Emmy Noether

Keywords:

history, physics, mechanics, Emmy Noether

Resumen

En el presente trabajo se narra la historia de la mecánica clásica, desde los lejanos días de Aristóteles hasta las contribuciones de Emmy Noether, a principios del siglo XX. Veremos cómo esta disciplina es el fruto de una larga y progresiva construcción, en la que mucho de lo que hoy damos por sentado y universalmente aceptado es, en realidad, la culminación de innumerables esfuerzos, tentativas, aciertos y errores. Destacaremos el aporte de Noether, como una suerte de "puente"

que puede establecer vínculos entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica, a menudo consideradas absolutamente incompatibles.

Abstract

This work tells the story of classical mechanics, since the distant days of Aristotle to the contributions of Emmy Noether, in the early twentieth century. We'll see how this discipline is the result of a long and progressive construction, in which much of what we now take for granted and universally accepted, is in fact the culmination of countless efforts, trials, successes and mistakes. Highlight the contribution of Noether, as a sort of "bridge" that can establish links between classical mechanics and quantum mechanics, often considered absolutely incompatible.

La historia de la ciencia en la enseñanza y el aprendizaje.

“La enseñanza de cualquier Ciencia es infecunda si no tiene carácter evolutivo, siguiendo las líneas generales de su desarrollo histórico” Julio Rey Pastor (1928).

Uno de los objetivos de los procesos de enseñanza y de aprendizaje consiste en comunicar a los jóvenes parte del conocimiento que la humanidad ha adquirido, en distintos campos, a lo largo de la historia. En el caso específico de la educación científica, otro propósito relevante es la presentación de “ejemplares”, utilizando la terminología de Kuhn (1962), que contribuyan a la iniciación de los estudiantes en los problemas y actividades característicos de la ciencia en cada período paradigmático particular. Ambos objetivos se realizan por distintas vías: a través de la palabra oral, a través de la imagen, del libro de texto, de las publicaciones de divulgación científica. En cualquier caso, aquello que se enseña y aquello que se aprende son constructos que se han generado y han evolucionado dentro y a través de los procesos y de los contextos históricos. Muchas veces se ha repetido que la ciencia no debe confundirse con una mera labor de aplicación técnica. La ciencia es parte de la cultura, y la contextualización histórica de las ideas científicas contribuye a situarlas dentro del marco cultural que les corresponde. En palabras de Boyer (1949): “La Ciencia es tanto un hábito de pensamiento como una forma de vida y las Matemáticas son tanto un aspecto de la Cultura como una colección de algoritmos”.

Según Hernández González y Prieto Pérez (2000) el estudio formalizado de los saberes científicos se enfrenta en la actualidad a tres inconvenientes principales:

a) La desconexión, que obliga al alumnado a tratar las distintas materias como si fueran unidades cerradas en sí mismas. El saber aparece así atomizado y compartimentalizado, sin otorgarle al alumno la posibilidad de acceder a una visión de conjunto. A partir de esta desconexión, el intelecto del estudiante se va organizando en parcelas autónomas, carentes de asociación y relación.

b) La tendencia a convertir las ciencias en saberes operativos. Esto trae como consecuencia que el alumno aprenda primariamente a operar y formular y sólo secundariamente a comprender, originando una mecanización cuyo resultado último es la pérdida del verdadero sentido del aprendizaje.

c) La historia de la ciencia, si bien no se enseña explícitamente, de alguna manera aflora durante el dictado de las asignaturas, pero en numerosas ocasiones lo hace en forma inconexa y errónea, transmitiéndose visiones deformadas de la ciencia y de los científicos.

De acuerdo con los citados autores, una de las estrategias posibles para enfrentar tales problemas es un enfoque de tipo historicista. Tal enfoque “fuerza necesariamente la convivencia de la filosofía, la física, la matemática, la química o la biología. De esta manera la mente se obliga a la interrelación, la universalidad y la apertura”. La historia de la ciencia no es meramente una narración de anécdotas o acontecimientos más o menos interesantes, sino una estrategia que persigue integrar y unificar los saberes que los alumnos deberían aprender en el curso de su educación científica.

En el presente trabajo vamos a ocuparnos de la historia de una disciplina científica en particular, la física y, dentro de ella, de una de sus ramas más antiguas: la mecánica. Una historia que, en virtud de su extensión, deberá quedar inevitablemente incompleta, y de la que deberemos excluir capítulos tan interesantes como aquellos referidos a la Teoría de la Relatividad. Pero una historia, sin embargo, rica en ideas, pensamiento e imaginación, y a través de la cual veremos que aquello que hoy enseñamos en las escuelas como nociones e ideas fundamentales de la mecánica es, en realidad, la progenie de siglos de discusiones, errores, esfuerzos y, finalmente, logros conceptuales.

La física y su historia

Solemos creer que la física no tiene historia. Pensamos que conceptos tales como masa, energía, fuerza, cantidad de movimiento, momento angu-

lar, etc., existieron siempre con los mismos nombres y definiciones que les atribuimos el día de hoy.

Sin embargo, la física, al igual que las demás disciplinas científicas, es algo que se construye en el tiempo. El tiempo ha dejado su huella en la forma en que hoy comprendemos, enseñamos y utilizamos las nociones físicas fundamentales. Podríamos imaginarnos cada concepto físico como una entidad que, inicialmente poco diferenciada, mezclada con otras entidades, mal definida y peor comprendida, va lentamente adquiriendo forma propia, definición precisa, propiedades específicas.

La historia de la física circula en dos sentidos opuestos. En primer lugar, es la historia de la manera en que sus conceptos adquirieron, en forma progresiva, individualidad. Por ejemplo, para la noción de energía ha sido esencial la separación paulatina de esta magnitud de la idea de fuerza, que desde el sentido común se le asemeja. En segundo pero no menos importante lugar, es la historia de cómo tales conceptos se entretrejieron en una trama unificada e interconectada; cómo, por ejemplo, la conservación de la energía se volvió algo inseparable de las leyes de la dinámica, en lugar de constituir un capítulo aparte.

Por una vía, entonces, los conceptos de diferencian, se individualizan, llegan a ser; por otra, se relacionan, vinculan y forman redes.

La mecánica clásica

Los conceptos centrales de la mecánica clásica fueron construidos y utilizados a partir de las épocas de Galileo Galilei (1564-1642) y de Isaac Newton (1642-1727). El gran físico y epistemólogo Ernst Mach (1838-1916), en su obra "Desarrollo histórico-crítico de la mecánica", analizó cómo se fueron definiendo los nombres (impulso, momento, cantidad de movimiento) con que se designaron tales conceptos, y encontró que los mismos fueron fijados mucho después de las épocas referidas. Y más tarde aún, se consolidaron en la mecánica los sistemas de unidades. Al respecto, algunos filósofos de la ciencia se han preguntado qué es lo que caracteriza la continuidad en el desarrollo histórico de una disciplina

científica si, como vemos, tal desarrollo está sembrado de cambios y transformaciones. El epistemólogo Stephen Toulmin, en 1961, respondió que dicha continuidad resulta del interés compartido por los profesionales de una misma comunidad científica ante un mismo tipo de problemas o por una "genealogía continua de problemas". En efecto, al estudiar la historia de la física advertimos la continuidad en el interés por la resolución de una serie de problemas típicos, "ejemplares", en el sentido de Kuhn. La caída de un cuerpo o el movimiento de un péndulo se cuentan entre los "ejemplares" más característicos.

Comencemos estudiando el origen de un término muy conocido: el momento o cantidad de movimiento.

Momento y movimiento

Una de las preocupaciones originales de la física ha sido la búsqueda de la causa del movimiento. "Quien comprende el movimiento comprende la Naturaleza", es una de tantas frases atribuidas a Aristóteles. De esta preocupación por la causa y la naturaleza del movimiento han surgido nociones tales como ímpetus, fuerza, momentum, etc.

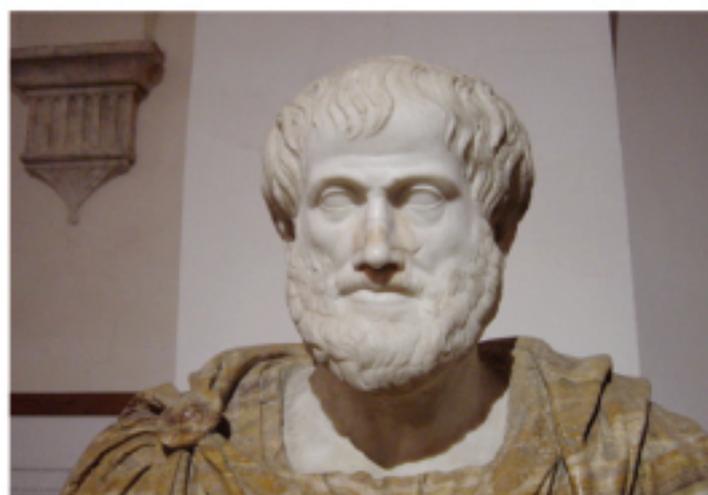


Figura 1. Busto de Aristóteles, copia romana del original en bronce de Lisipo.

Aristóteles creía que existían dos tipos de movimientos: los naturales y los forzados. Un movimiento natural (la caída de una piedra, el

movimiento orbital de la Luna, el ascenso de las llamas del fuego), era, según el filósofo griego, aquel en el que un elemento se dirigía espontáneamente hacia su "lugar natural", es decir, hacia la situación en el espacio que le fuera asignada en el esquema de las cosas.

El lugar natural del fuego, por ejemplo, se encontraba por encima del aire, por eso las llamas tienden a moverse hacia arriba.

Un movimiento forzado, por el contrario, se realizaba bajo alguna coacción exterior. Así, Aristóteles explicaba la caída de una roca diciendo que el lugar natural de las piedras es el centro de la Tierra, y hacia allí se dirigen naturalmente. Sin embargo, un ser humano puede forzar a una piedra a moverse hacia arriba, arrojándola con una cierta velocidad inicial. La piedra, después de ascender un trecho, retornará a su movimiento de caída "buscando" su lugar natural.

Aristóteles dividió el mundo en dos regiones: sublunar y supralunar. La primera, reino del cambio y la corrupción, comprendía la Tierra con su atmósfera, mientras que la segunda abarcaba el inmutable reino de los cielos, desde la Luna hasta la esfera de las estrellas fijas. El movimiento natural en el mundo sublunar era el rectilíneo, y en el supralunar, el circular uniforme.

Por ello, Aristóteles no podía explicar, entre otras cosas, el movimiento parabólico de una flecha. Una vez disparada, la flecha adquiría un movimiento natural y, por lo tanto, en algún momento debía presentar una trayectoria rectilínea. Aristóteles argumentaba que, en realidad, el movimiento de la flecha era forzado, porque su extremo desplazaba el aire hacia atrás y estas corrientes, a su vez, impulsaban la cola de la flecha.

Independientemente de esta y otras explicaciones alternativas, el movimiento parabólico de los proyectiles continuó siendo un misterio durante varios siglos. El paradigma aristotélico constituyó el esquema conceptual imperante en cuestiones de física y ciencia natural prácticamente durante toda la Edad Media, hasta que, hacia principios del siglo XVI, el pensamiento comenzó a experimentar algunos cambios interesantes. (ver Figura 2.)

Ockham, Buridan y Oresme

El primer intento de estudiar el movimiento con algún cuestionamiento de las ideas aristotélicas, se remonta a William Ockham (1285–1349) quien, al explicar el movimiento de una flecha, supuso que la misma transportaba una "carga" (ímpetu o impetus), que aseguraba la continuidad del movimiento.

Ockham afirmó que el movimiento de una flecha no podría jamás ser causado por el aire ubicado en su parte posterior, puesto que él había observado proyectiles moviéndose en sentido opuesto al del viento, y comparó el movimiento de una flecha con el de una piedra lanzada al aire con la mano. Esta última suministra a la piedra un "ímpetu" que le permite moverse hasta que algún agente externo se lo impida.

La construcción del concepto de ímpetu estuvo estrechamente relacionada con la elaboración de la noción de masa, atribuida al teólogo del siglo XIII Egidio Romano, discípulo de Tomás de Aquino (1225-1274). Egidio identificó la masa con la cantidad de materia, clarificando así las ideas confusas de peso y volumen que imperaban hasta esa época. La masa como cantidad de materia desempeñó un papel importante en las ideas de Jean Buridan (1295-1385), discípulo de Ockham. Para Buridan "la medida del ímpetu era el producto de la cantidad de materia por la rapidez" si bien parece que Buridan no distinguió con claridad entre los conceptos que hoy denominamos cantidad de movimiento y energía cinética (Boido, 1996). Nicolás Oresme (1320-1382), a su vez discípulo de Buridan, elaboró, inspirado por las ideas de su maestro, una concepción del Universo que actualmente podríamos definir como cuasi – mecánica, por supuesto que con las reservas debidas a toda transposición de conceptos modernos a ideas de otros tiempos. En el sistema de Oresme, el cosmos es un gran reloj celestial que, una vez puesto en movimiento por la divinidad, no necesita ninguna acción externa para funcionar eternamente. Sin embargo, las ideas de Oresme, con respecto al ímpetus, se encuentran más alejadas del pensamiento moderno que las de su maestro

Buridan, quien parece haber logrado alguna aproximación a la noción de inercia. Para Buridan, el *impetus* se corrompe o destruye sólo en presencia de resistencias externas, mientras que para Oresme se disipa con el tiempo, "como hace el calor de un objeto más caliente que el medio ambiente".

Galileo Galilei

Estas ideas alcanzaron eventualmente a Galileo Galilei. Galileo, en sus análisis del movimiento, trabajó con un concepto imperfectamente definido, que él llamaba "momento" o "*impetus*", y que parece haber sido algo así como el producto del peso por la velocidad. Esto se puede ejemplificar, con el Teorema 2, *Proposizione 2*, de la IV Jornada de los "Discursos y demostraciones sobre dos nuevas ciencias", donde Galileo dice: "Se un mobile si muove con moto composto di due equabili, l'uno orizzontale e l'altro perpendicolare, l'impeto o momento del movimento composto da ambedue sarà in potenza eguale ai due momenti dei primi moti", en el cual se observa el empleo de "*impetu*" y "momento" como sinónimos, en el sentido de medidas del movimiento. De acuerdo con Boido (1996), en el pensamiento galileano se superponen y confunden nociones de cantidad de movimiento y energía cinética, tal como ya habíamos advertido en la obra de Buridan.

Mach (1949) resumió estos hechos diciendo que Galileo habla de la fuerza de un cuerpo móvil y la llama a veces "momento", a veces "impulso" y a veces "energía". En efecto, en algunas oportunidades Galileo emplea el término "momento" para referirse a la "intensidad de una fuerza", en otras a lo que sería equivalente al momento de una fuerza en sentido moderno y, en otras a algo similar a la cantidad de movimiento, que suele traducirse como "intensidad de la velocidad". El desarrollo de los conceptos fundamentales de la física ha sido, por cierto, muy lento.

René Descartes

La conservación del *momentum* desempeñó un rol fundamental en el Universo mecanicista de René Descartes (1596-1650). Según Hecht (1987), el

momentum estaba relacionado con el producto de la cantidad de materia por la rapidez pero, para Descartes, la idea de la esencia de la materia no era la masa sino el volumen. Por consideraciones metafísicas, Descartes suponía que el *momentum* total del universo debía ser invariable, pero que, durante los choques, el de un cuerpo podía ser transferido a otro. De este modo, el análisis del movimiento consistía en comparar los momentos de las partículas antes y después del impacto, y de allí que no haya, en la concepción cartesiana, ninguna referencia a lo que hoy llamaríamos "fuerza".

Expresándonos en términos actuales, debemos aclarar que Descartes consideraba la velocidad como una magnitud escalar, siempre positiva. Por ello no pudo resolver el problema de la conservación de la cantidad de movimiento del sistema formado por dos cuerpos que interactúan durante un choque. Tal situación fue resuelta por Christian Huygens (1629-1695), quien advirtió que la velocidad y, por consiguiente, la cantidad de movimiento, podía ser tanto positiva como negativa. Las ideas de Descartes fueron combatidas por Gottfried Leibniz (1646-1716) en 1686, en un escrito aparecido en *Acta Eruditorum* con el título: "Breve demostración de un notable error de Descartes y otros, respecto de la ley natural según la cual, como ellos creen, el Creador trata de conservar siempre la misma cantidad de movimiento en la naturaleza, pero mediante la cual toda la ciencia de la mecánica se invalida". En este escrito Leibniz considera que la magnitud que se conserva es la *vis viva* (masa por el cuadrado de la velocidad), el embrión del que luego surgiría el concepto de energía cinética (Boido, 1996). En 1703, Huygens publicó un estudio sobre la mecánica del choque entre dos esferas, analizándolo desde el punto de vista de la conservación de ambas magnitudes: el *momentum* y la *vis viva*. Muchos científicos de la época aclamaron el estudio de Huygens, porque advirtieron que la aplicación conjunta de los dos principios resolvía numerosos problemas mecánicos. Sin embargo, la polémica iniciada por Leibniz no fue definitivamente resuelta hasta la aparición del "*Traité de Dynamique*" de Jean D'Alambert (1717-1783) en 1743.

Aquí vemos cómo se comienza a gestar el reconocimiento de la importancia de los teoremas de conservación, cómo va surgiendo, paulatinamente, la concepción de que, para resolver un determinado sistema mecánico, es fundamental conocer cuáles son las magnitudes dinámicas que en el mismo se conservan, es decir, permanecen constantes.

La Royal Society

En 1666 la Royal Society de Londres decidió estudiar los movimientos y colisiones de pequeñas porciones de materia, desde una perspectiva mecanicista. Esta investigación fue llevada a cabo independientemente por Huygens, el matemático John Wallis (1616-1703), que se ocupó de los aspectos teóricos del problema, y el arquitecto Christopher Wren (1632-1723), atraído por sus previos experimentos acerca de los choques perfectamente elásticos. Robert Hooke (1635-1703), también realizó algunos experimentos demostrativos sobre choques en las reuniones semanales de la Royal Society. Sus investigaciones fueron coincidentes y condujeron a la conclusión que la cantidad total de movimiento de un sistema aislado se conserva. Este enunciado, el primer teorema de conservación sólidamente establecido que registra la historia, fue publicado primeramente por Wallis en las *Philosophical Transactions* de 1668.

Isaac Newton cerró este capítulo de la historia de la mecánica con sus tres leyes del movimiento, a las que debemos sumar la Ley de Gravitación Universal. Resulta maravilloso advertir cómo tan larga historia de inspiraciones, errores, disputas, acuerdos, celos, etc., pueda resumirse finalmente en cuatro breves enunciados. Si alguna vez hemos dudado del genio de Newton, la reflexión sobre este hecho disipará definitivamente nuestras dudas.

Como vemos, la cantidad de movimiento, el momentum, desde sus orígenes hasta su formulación moderna ha seguido un camino poco menos que tortuoso, el que de ninguna manera puede considerarse un recorrido directo hacia la meta. Y en ese camino tortuoso hemos mencionado, en

más de una oportunidad, el término energía. A la historia de la energía, entonces, habremos ahora de referirnos. (ver Figura 5)

La historia de la energía

Cuando mencionamos las objeciones de Leibniz al modelo mecánico de Descartes surgió el concepto de fuerza viva, antecedente de lo que hoy conocemos como energía cinética, la energía asociada al movimiento. Leibniz introdujo los conceptos de fuerza viva y fuerza muerta, siendo esta última, en la concepción de este filósofo, aquella que se aplica a un cuerpo en reposo, y que no consigue ponerlo en movimiento.

En 1788, en su obra *Méchanique Analytique*, Jean L. Lagrange (1736-1813) enunció y formalizó matemáticamente el Teorema de Conservación de la Energía Mecánica, expresado en forma similar al planteamiento actual.

Sin embargo, el término energía, durante mucho tiempo, continuó utilizándose en forma muy confusa, aplicándose a todo tipo de magnitudes y confundiéndose repetidamente con la noción de fuerza. Fueron muy importantes las aportaciones del médico Julius R. Mayer (1814-1878), si bien este continuaba con el empleo incorrecto del término "fuerza". El vocablo "energía", con el significado preciso que se le asigna en la actualidad, fue acuñado por William G. Rankine (1820-1872) en 1855.

Tal fue el interés despertado por la energía y su conservación, que hubo un grupo de científicos decididos a organizar el cuerpo total de la física prescindiendo en forma absoluta del concepto newtoniano de fuerza. Se intentó entonces crear la "Energética", una especie de nueva ciencia, que contó entre sus promotores a figuras tan notables como lord Kelvin (1824-1907), Ernst Mach, Wilhelm Ostwald (1853-1932) y Heinrich Hertz (1857-1894).

El punto de partida de los energetistas era considerar que los únicos fenómenos apropiados para la investigación científica eran aquellos que se podían sentir y/o medir, e incluían en esta categoría

los cambios energéticos. Su postura epistemológica, por lo tanto, era definitivamente empirista. Para ellos, la noción de "fuerza" era un concepto de índole casi metafísica, sin el rango de magnitud observable.

Llevados por este principio de "visualización" los energetistas llegaron a negar la teoría atómica de la materia, alegando que los átomos no se pueden ver, ni medir lo que pasa entre ellos, sino sólo sus manifestaciones energéticas. Sin embargo, el descubrimiento del electrón efectuado por J.J. Thomson (1856-1940) terminó por consolidar definitivamente la concepción atomista de la materia, y las ideas energetistas dejaron de ser sostenidas por la mayoría de los científicos. Después de Newton.

A veces tenemos la impresión errónea de que la mecánica clásica terminó con la obra de Newton. Muy por el contrario, en las décadas y siglos que siguieron a la publicación de los Principia, se construyó un impresionante cuerpo de trabajo teórico, de índole esencialmente matemática, apoyado sobre los fundamentos newtonianos. Entre los científicos más destacados en este trabajo debemos mencionar a Euler (1707-1783), Laplace (1749-1827), Lagrange (1736-1813), Legendre (1752-1833), Gauss (1777-1855), Ostrogradski (1801-1861), Poisson (1781-1840), Hamilton (1805-1865) y Jacobi (1804-1851). Sus ideas reformularon progresivamente la mecánica de Newton y condujeron, finalmente, a una profunda visión unificadora. Para el gran matemático Roger Penrose, esta imagen, de corte definitivamente formal y matemático, es una indicación evidente de la existencia de una base matemática subyacente al Universo físico.

Esta cuerpo de "doctrina" científica se presenta en dos formas diferentes pero íntimamente relacionadas, cada una con sus propias virtudes, complicaciones y limitaciones, denominadas respectivamente lagrangiana y hamiltoniana.

Consideremos un sistema clásico conformado por un número N de partículas individuales. En cierto instante de tiempo, tales partículas se encontrarán

en determinadas posiciones del espacio. Como este último tiene tres dimensiones, harán falta $3N$ coordenadas, llamadas coordenadas generalizadas, para describir la posición de todo el sistema de N partículas. Para cada coordenada generalizada espacial, existirá una velocidad correspondiente, dada por la variación temporal de dicha coordenada. Tenemos entonces un espacio abstracto de $6N$ dimensiones: $3N$ para las posiciones de las partículas y $3N$ para sus velocidades. En la imagen lagrangiana se trabaja con este espacio $6N$ -dimensional, denominado espacio de las fases o espacio de las configuraciones. El lagrangiano del sistema es una función que dependerá, en general, de este conjunto de $6N$ coordenadas. Dicho lagrangiano, a pesar de su definición esencialmente matemática, se puede interpretar físicamente como la diferencia entre la energía cinética y la energía potencial del sistema de partículas bajo consideración. Las ecuaciones de Euler-Lagrange, que trabajan con la variación del lagrangiano respecto del tiempo y de ambos conjuntos de coordenadas generalizadas (las posiciones y las velocidades), codifican todo el comportamiento del sistema de partículas, interpretado en términos newtonianos (clásicos).

En la imagen hamiltoniana, el espacio de las configuraciones se construye, en lugar de con las posiciones y las velocidades, con las posiciones y los momentos de las partículas del sistema. Esta imagen posee gran belleza matemática y una notable potencia física para describir en forma sintética y unificada el modelo newtoniano de la realidad. Sin embargo, hay todavía más.

Como todos sabemos, la visión clásica (galileano-newtoniana) de la física ha sido superada, a partir de las primeras décadas del siglo XX, por la mecánica cuántica y la física relativista. La imagen hamiltoniana, siendo una reformulación de la mecánica de Newton, ha sufrido el mismo destino, y los hechos del mundo cuántico (microscópico) contradicen muchas de sus predicciones. Sin embargo, la visión hamiltoniana es como un camino hacia la mecánica cuántica. El formalismo hamiltoniano, si bien forma parte de y responde a los principios generales de la mecánica clásica, anticipa el formalismo cuántico. Volveremos sobre esta relación entre las mecánicas clásica y cuántica.

tica cuando hagamos referencia al Teorema de Noether.

Los teoremas de conservación y la segunda Ley de Newton. Un error "didáctico" bastante habitual es presentar las tres leyes dinámicas de Newton y los teoremas de conservación como si fuesen dos capítulos de la física absolutamente separados e independientes uno del otro. Esto es enteramente incorrecto, y este error contribuye a comunicar una imagen del cuerpo de la mecánica compuesta por una colección de fragmentos separados, carentes de armonía entre sí. No debe minimizarse la importancia de este tipo de errores, porque invierten la misma historia de la mecánica, que ha consistido en un permanente esfuerzo de articulación, coordinación y armonización entre sus partes. De hecho, la mecánica clásica es una sola y sus distintos capítulos presentan gran armonía y fuertes vínculos unos con otros.

Con un poco de trabajo matemático los teoremas de conservación de la cantidad de movimiento, la energía y el momento cinético pueden deducirse a partir de la 2ª Ley de Newton, habitualmente denominada "Principio de Masa". De hecho, tales teoremas son diferentes formas de expresar el referido principio. Uno no puede menos que maravillarse ante la potencia explicativa y predictiva de este principio, que, en forma simplificada, afirma que la suma de todas las fuerzas que actúan sobre un cuerpo es igual al producto de su masa por su aceleración. La 2ª Ley de Newton es una caja de maravillas: al abrirla esa simple fórmula se transforma en todo un nuevo capítulo de la física.

La historia de los teoremas de conservación no concluyó con el enunciado preciso de los mismos. ¿Existía alguna significación más profunda para estos teoremas? ¿Estaban relacionados, de alguna forma, con la estructura íntima del espacio y del tiempo? ¿Cuál era la relación existente entre las simetrías de las leyes de la física y los teoremas de conservación?

La respuesta a estas preguntas no fue dada por un físico, sino por una matemática: Emmy Noether (1882-1935).

Emmy Noether

Emmy (Amalia) Noether nació en Erlangen, Alemania, hija de Ida Amalia Kaufmann y del matemático Max Noether, quien fue, junto con Bernard Riemann (1826-1866), uno de los fundadores de la geometría algebraica del siglo XIX.

Emmy tuvo como profesores a tres de los más grandes matemáticos de todos los tiempos: David Hilbert (1862-1943), Félix Klein (1849-1925) y Hermann Minkowski (1864-1909). Con el teorema que lleva su nombre, Noether demostró poseer una formación de gran solidez y profundidad no sólo en matemática, sino también en física. La época en la que vivió Noether fue, desde el punto de vista científico, simplemente apasionante. Los inicios del siglo XX conocieron una revisión radical tanto de la matemática como de la física teórica. Fue la época que vio el nacimiento de la mecánica cuántica, la época de las discusiones entre Einstein y Bohr, la época de los acalorados debates sobre la causalidad y la casualidad, sobre el determinismo y la probabilidad, cuando se puso definitivamente en duda la mecánica clásica y el antiguo edificio de la física, edificado sobre el hasta entonces sólido cimiento de las leyes de Newton, comenzó a experimentar sacudones desde sus propias bases. Emmy Noether no fue ajena a esta situación de revolución; sin embargo, como veremos más adelante, su teorema de alguna manera implica una conciliación (quizás temporal e inestable) entre la antigua mecánica clásica y la nueva mecánica cuántica, estableciendo algunos inesperados puntos de contacto entre ambas. Noether demostró "su" teorema en 1915.

Comenzó estudiando las simetrías continuas. Estas son simetrías desarrolladas según transformaciones que se pueden variar continuamente, como las rotaciones. Por ejemplo, la simetría de una esfera se mantiene frente a pequeñas rotaciones arbitrarias, a diferencia de la simetría discreta de un copo de nieve, que sólo es simétrico según rotaciones de múltiplos de 60 grados. El resultado que Noether obtuvo fue impresionante. Demostró que a cada simetría continua de

las leyes de la física corresponde una ley de conservación, y viceversa. Según el Teorema de Noether, la simetría de traslación de las leyes físicas corresponde a la conservación del momentum o cantidad de movimiento; la simetría respecto a traslaciones temporales conduce a la ley de conservación de la energía, y la simetría según las rotaciones conduce a la conservación del momentum angular. En realidad, su validez es mucho más general, y de él pueden deducirse la ley de conservación de la carga eléctrica, la del número total de bariones en un sistema y muchas más.

El Teorema de Noether fundió las simetrías y las leyes de conservación: esos dos grandes pilares de la física no son más que diferentes facetas de la misma propiedad fundamental. Se transformó así en el vínculo más profundo y directo entre la dinámica (las fuerzas, el movimiento y las leyes fundamentales de la Naturaleza) y el abstracto mundo de las simetrías. Además de permitir aplicaciones físicas prácticas, el teorema de Noether constituye una explicación de por qué existen leyes de conservación y magnitudes físicas que no cambian a lo largo de la evolución temporal de un sistema.

Aquí tenemos un hecho paradójico. En la actualidad, es posible que muchos matemáticos hayan oído hablar del Teorema de Noether, pero pocos son conscientes de su carácter fundamental para la física teórica. Por su parte, la mayoría de los físicos valora y aplica el teorema, pero sabe poco de la obra de Noether y, posiblemente, creen que era física y no matemática.

Esto nos indica que los mundos habitados por los físicos teóricos y los matemáticos suelen ser independientes y funcionar casi como dos universos paralelos. Pero cuando ambos mundos convergen, la creación, el logro y el avance de la ciencia son un resultado casi inevitable.

En nuestra opinión, no existe oposición o dicotomía entre la física como ciencia experimental y la física matemática. La matemática no es solamente el lenguaje predilecto de la física, sino que es algo

que le resulta intrínsecamente inseparable. Sean conscientes de ello o no, en todos los físicos existe un cierto rasgo platónico, en el sentido de la creencia en que la Naturaleza es una gran obra matemática. La conocida frase de Galileo Galilei: "El Universo es un libro escrito en lenguaje matemático. Sus caracteres son triángulos, cruces, círculos y otras figuras geométricas, sin cuyo conocimiento se pierde el hombre en un oscuro laberinto", es en realidad una creencia presente, consciente o inconscientemente, en el espíritu de la mayoría de los físicos. Cuando un físico utiliza la matemática sólo para operar, sólo como un instrumento de cálculo, está perdiendo la oportunidad de alcanzar una comprensión más profunda de la trama sutil del Universo. Cuando la matemática es vista como la forma misma en que existe la Naturaleza, profundidades antes insospechadas se vuelven manifiestas.

Las simetrías

La demostración formal del teorema de Noether es muy compleja y no nos interesa ocuparnos de ella aquí. Sin embargo, creemos necesario hablar acerca de un concepto matemático (geométrico) que le es fundamental: las simetrías.

La simetría es una propiedad universal tanto en la vida corriente como en la física teórica. Para el Premio Nobel de Física León Lederman: "las propias leyes físicas están básicamente definidas por principios de simetría" (Lederman y Hill, 2006). Por su parte, Roger Penrose, después de plantear el hecho que un objeto completamente simétrico, como un cuadrado o una esfera perfectos, sólo tiene existencia ideal ("platónica"), y que tales objetos, cuando se presentan en la naturaleza, siempre tienen algún grado, aunque sea mínimo, de irregularidad, y su simetría es sólo aproximada, afirma que: "Pese a todo y, curiosamente, según las teorías físicas de gran éxito del siglo XX, todas las interacciones físicas, incluida la gravedad, actúan de acuerdo con una idea que, estrictamente hablando, depende de forma crucial de ciertas estructuras físicas que poseen una simetría que, en un nivel de descripción fundamental, es necesariamente exacta" (Penrose, 2006). Es decir, si bien

en el mundo natural las simetrías exactas aparecen poco o nada, y la Naturaleza es el reino de las simetrías aproximadas, subyacente a los fenómenos físicos parece existir una estructura lógico-matemática altamente simétrica, que determina la forma y las características de tales fenómenos.

Algunos podrán pensar que tal estructura es intrínseca a la trama del Universo, y que el mundo de las formas geométricas perfectas existe en realidad, sobre y más allá de la materia, al estilo del mundo de las ideas de Platón. Otros podrán opinar que tal estructura matemática es sólo un artificio útil ideado por el ser humano para explicar los fenómenos, y que no existe más allá de nuestras mentes. Los unos y los otros, sin embargo y pese a sus profundas diferencias en la concepción filosófica de la realidad, coincidirán en que la matemática en general, y las simetrías en particular, se han revelado como un instrumento poderosísimo para explicar y predecir el comportamiento de la Naturaleza.

Las variables conjugadas en la Mecánica Cuántica

Expresiones tales como "Principio de Incertidumbre" o "Relación de Incerteza" han hecho correr mucha, muchísima tinta, a veces de la buena y a veces del disparate. Lo cierto es que tales expresiones han ingresado al lenguaje cotidiano y hoy las podemos escuchar en boca no sólo de científicos sino hasta de políticos y economistas.

Sin entrar en las eternas (y hasta ahora estériles) discusiones acerca de si el Principio de Incertidumbre de Heisenberg implica el libre albedrío humano y otras cuestiones similares, intentemos dar una explicación muy simplificada de dicho principio.

En Mecánica Cuántica existen pares de variables que se denominan conjugadas. Entre ellas tenemos la posición y la cantidad de movimiento; la energía y el tiempo, el momento cinético y la posición angular. Cada par de variables conjugadas se encuentran vinculadas por una relación llamada de incerteza, incertidumbre o indeterminación. Tomemos, por ejemplo, la posición y la cantidad de movimiento. La relación de incerteza afirma

que ambas magnitudes no pueden medirse simultáneamente con una precisión absoluta. Digamos que conseguimos medir la velocidad (y, por lo tanto, la cantidad de movimiento) de un electrón, con una precisión del 100 %. Entonces, según el Principio de Incertidumbre, nuestra precisión en la medición de la posición del electrón será nula, o, en otras palabras, nuestra incerteza en la posición será del 100 %.

La misma situación ocurre para otros pares de variables conjugadas, por ejemplo, la energía y el tiempo. Si conocemos con absoluta precisión el instante de tiempo en que ocurre un cierto fenómeno, entonces nuestra incerteza en la cantidad de energía involucrada en el mismo, es infinita. De hecho, esto permite explicar ciertos fenómenos cuánticos en los que el principio de conservación de la energía parece no cumplirse.

Lo interesante es comparar esto con el Teorema de Noether. Si recordamos, el teorema decía, entre otras cosas, que si existe alguna simetría de traslación espacial, se conserva la cantidad de movimiento, y si existe una simetría temporal, se conserva la energía del sistema. En otras palabras, Noether relaciona, trabajando desde el contexto clásico, las variables conjugadas de la mecánica cuántica.

¿Son, entonces, absolutamente inconmensurables la mecánica clásica y la cuántica? Noether parece decir que no, y que a través de su Teorema podemos encontrar puntos de contacto. Este tópico todavía hoy no se comprende perfectamente, pero, en nuestra opinión, amerita la realización de profundas reflexiones filosóficas.

Palabras finales

Haciendo gala de su propia naturaleza, que la ha caracterizado como una disciplina con vastas aplicaciones técnicas, creemos haber puesto de manifiesto en este trabajo que la mecánica es una ciencia que se construye.

Se construye a través de imágenes físicas, de nociones matemáticas, de teoría, definiciones y experimentación. Y se construye también a través de

la interpretación. Hoy, podemos considerar que el edificio de la mecánica clásica está terminado, pero su interpretación todavía ofrece desafíos al pensamiento: el teorema de Noether así lo comprueba. Vaya nuestro reconocimiento, por lo tanto, a todos aquellos hombres y mujeres que, por la vía de la teoría, de la experimentación y de la interpretación construyeron y aún construyen este edificio sobre el que se asienta gran parte de la civilización moderna.

Leyendas de las figuras

Figura 1. Busto de Aristóteles, copia romana del original en bronce de Lisipo

Figura 2. Según Aristóteles, el palo de golf le imprime a la pelota un movimiento que, inicialmente, es forzado, por lo que se desvía de la línea recta y la trayectoria adopta forma parabólica. Pero el Gran Estagirita no podía explicar por qué la pelota, una vez en el aire, continúa moviéndose en una parábola, en lugar de adoptar la "natural" trayectoria rectilínea

Figura 3. Se atribuye a Ockham la formulación del famoso principio de la "navaja", según el cual, si dos teorías diferentes tienen las mismas consecuencias, debe preferirse de las dos la que sea más sencilla, donde la sencillez se "mide" por el número de entidades invocadas por la teoría para formular sus explicaciones

Figura 4. Galileo Galilei

Figura 5. Isaac Newton

Figura 6. Una esfera posee todas las simetrías de rotación, mientras que un copo de nieve, dada su simetría hexagonal, sólo es simétrico frente a rotaciones de ángulos que sean múltiplos de 60°

Figura 7. Emmy Noether



Figura 1.



Figura 2.



Figura 3.



Figura 4.



Figura 5.

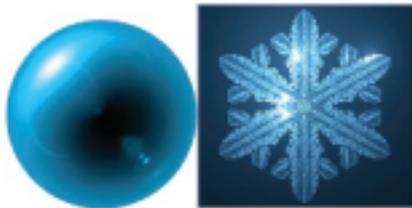


Figura 6.



Figura 7.

BIBLIOGRAFÍA

Boido, G. Noticias del Planeta Tierra: Galileo Galilei y la Revolución Científica, Buenos Aires, A-Z Editora (1996)

Boyer, C.B. The History of the Calculus and its conceptual developments, New York, Dover (1949)

Hecht, E. Física en perspectiva, Barcelona, Addison-Wesley Iberoamericana (1987)

Hernández González, M. y Prieto Pérez, J.L. Un currículo para el estudio de la historia de la ciencia en secundaria (la experiencia del seminario Orotava de historia de la ciencia), Enseñanza de las Ciencias, Vol. 18, N° 1, 105-112 (2000)

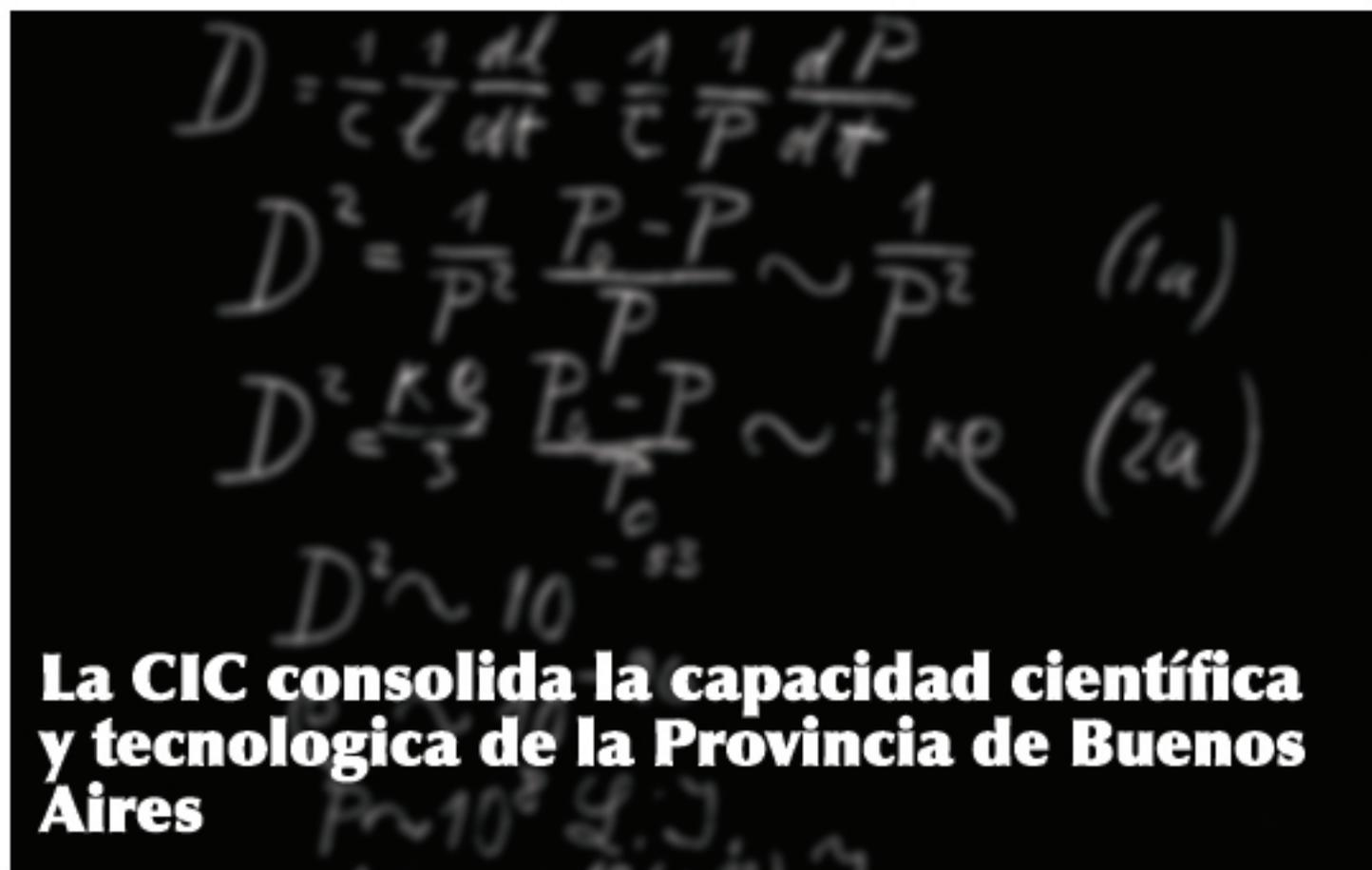
Kuhn, T.S. La estructura de las revoluciones científicas, Ciudad de México, Fondo de Cultura Económica, (1962, primera edición en español en 1971)

Lederman, L. y Hill, C. La simetría y la belleza del Universo, Barcelona, Tusquets Editores (2006)

Mach, E. Desarrollo Histórico - Crítico de la Mecánica, Espasa-Calpe, Buenos Aires (1949). Título original: Die Mechanik in ihrer Entwicklung historisch-kritisch dargestellt (1883)

Penrose, R. El camino a la realidad, Barcelona, Debate (2006)

Rey Pastor, J. Cosmografía, Buenos Aires, Editorial El Ateneo (1928). Toulmin, S. y Feigl, H. El legado del positivismo lógico, Valencia, Teorema (1981)



La CIC consolida la capacidad científica y tecnológica de la Provincia de Buenos Aires



Ministerio de la
Producción

Buenos Aires
LA PROVINCIA

Desde su fundación en 1956, la CIC ha promovido la expansión de la actividad científica procurando orientar las investigaciones en vínculo directo con el desarrollo sostenido del aparato productivo provincial.

La CIC consolida la capacidad científica y tecnológica de la Provincia de Buenos Aires. Desde su fundación en 1956, la CIC ha promovido la expansión de la actividad científica procurando orientar las investigaciones en vínculo directo con el desarrollo sostenido del aparato productivo provincial.

Que la Provincia de Buenos Aires cuente con un faro científico que hoy nuclea 240 investigadores, 260 profesionales de apoyo y 350 becarios -150

estudiantes y 200 doctorandos- diseminados por los 25 centros de investigación en todas las universidades nacionales situadas en su territorio, no es un dato menor.

Desde sus inicios, hace casi 55 años, la Comisión de Investigaciones Científicas (CIC) siempre mantuvo como lema el progreso constante de todos sus estratos, porque la herramienta que constituye su razón de ser no es otra cosa que la ciencia como herramienta para resolver los problemas de la sociedad, con todo lo que ello implica.

No es de extrañar, entonces, que la CIC forme, desde el 2010, parte de la estructura del Ministerio de la Producción, porque el leit motiv de su trabajo tiene que ver con la transferencia de conocimiento a aquellos estratos que lo requieran vinculado a los intereses productivos de la Provincia.

Esta concepción ya afloraba en primer plano en el decreto N°21.996 del 5 de diciembre de 1956, bajo el cual se formalizó la creación de la primera institución de este tipo en Argentina (un año después surgiría el CONICET) y que establecía expresamente que “tendrá a su cargo estudiar, orientar y coordinar la labor vinculada a la experimentación, aprovechamiento y aplicación de los conocimientos científicos que interesen a la gestión del Estado provincial”.

La transmisión de conocimientos científicos específicos resulta clave para el desarrollo intelectual de cualquier población, algo que en la CIC siempre fue un estandarte. Incorporar a la ciencia en el corazón de la educación es el paso necesario para transformar al conocimiento científico en un lenguaje que pueda ser hablado por el grueso de la sociedad. Porque para qué sirve la ciencia si no es para mejorar la calidad de vida de los seres humanos.

Dos etapas de un desarrollo sostenido

De una primera etapa fundacional, en la que germinaron las primeras líneas de investigación, la CIC pasó a una segunda etapa tras la promulgación de una nueva ley orgánica el 17 de abril de 1968. Desde ese entonces, se puede hablar de una expansión de la actividad científica procurando orientar las investigaciones en vínculo directo con el desarrollo sostenido del aparato productivo provincial. Manteniendo a los investigadores, a su vez, en contacto directo con organismos científicos nacionales e internacionales de diversas ramas, con convenios de trabajo de diverso tipo. La generación de conocimiento y aplicación efectiva al desarrollo social y productivo de la región son dos tópicos fundamentales dentro de la CIC.

Ciencia aplicada

A través de sus centros propios la Comisión mantiene las herramientas científicas al servicio de la producción, la educación y la innovación. Por ese motivo ha suscripto diferentes convenios con otros polos científicos tecnológicos y universidades públicas nacionales. Un ejemplo es el Centro de Investigación de Tecnología del Cuero (CITEC) que funciona a raíz de un convenio con el Instituto Nacional de Tecnología Industrial (INTI), y desde allí se asesora tanto a pymes curtidoras y de manufacturas del cuero, como también a dependencias gubernamentales para un adecuado control de la instalación de curtiembres y de calidad de cueros y calzados y se brindan talleres y cursos de para los que inician en el oficio de la talabartería.

Otros centros de investigación

Otro ejemplo a destacar es el Centro de Investigación y Desarrollo en Tecnología de Pinturas (CIDEPINT), que asesora a los gobiernos y a las empresas concesionarias sobre problemas de corrosión de materiales en contacto con medios agresivos y su aplicación a puentes, edificios, diques, instalaciones industriales y navales. Lo mismo el Centro de Investigaciones Ópticas (CIOP) que con sus investigaciones en el terreno de la óptica, para asesorar a entes públicos y privados de producción de bienes y servicios. De gran relevancia es la tarea del Instituto de Hidrología en Llanuras (IHLLA), que hace más de 20 años trabaja en la capacitación de los diferentes estamentos técnicos de los municipios.

Por otro lado, la educación como motor del trabajo científico repercute en cada ámbito vinculado con la CIC. Por ejemplo, desde el Centro de Estudios en Rehabilitación Nutricional y Desarrollo Infantil (CEREN) se asesora a comedores escolares y barriales, guarderías y hospitales, en el diseño, implementación y evolución de programas y servicios alimentarios, brindando cursos a profesionales, técnicos y agentes comunitarios en alimentación, crecimiento y desarrollo.

Además, los investigadores de la CIC ejercen a diario una labor docente junto a sus pares y discípulos, formando a los científicos que los sucederán en el futuro y que continuarán con líneas similares de investigación. Todo enmarcado en líneas centrales que apuntan a la consolidación de una capacidad científica-tecnológica competitiva a nivel internacional y a la incorporación de conocimiento en el sector productivo provincial.

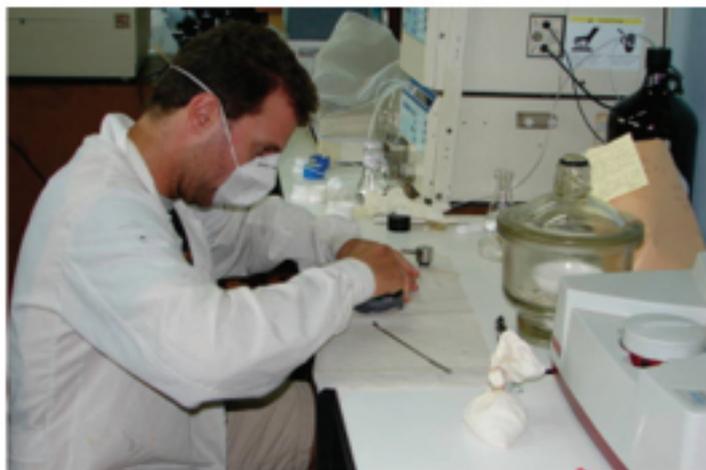
El presente es el futuro

En este 2011 el presupuesto duplicó los recursos destinados a varios programas que se manejan desde la CIC. Entre ellos, el Programa de Modernización Tecnológica (PMT) que en 3 años de trabajo, a través de 40 Unidades Ejecutoras, se realizó el diagnóstico tecnológico de 3240 empresas y se implementaron proyectos en 1485 PYMES.

Además, a través del Programa de Apoyo a Incubadoras, Parques y Polos Tecnológicos se destinaron recursos a la formación de emprendedores, que preparó a 5 millones de pesos, contra los 2.500.000 de pesos de 2010 período en el que se formaron a 850 docentes en emprendedorismo y se conformaron 16 nodos con 40 municipios y 198 instituciones locales. Con ellos se formaron y asistieron a 1550 emprendedores.

También se dispondrá de 2,5 millones de pesos más en subsidios, que permiten la convocatoria para proyectos de investigación de interés público, donde se acercan el demandante y los investigadores.

Este crecimiento del presupuesto también posibilita la creación de nuevas direcciones, lo que jerarquiza el trabajo en general. Es un logro muy grande y un mensaje del gobernador Daniel Scioli.



Situado en los terrenos de la calle 526 entre 10 y 11, en el barrio platense de Tolosa, el edificio de la CIC empezó a construirse a fines de 1965, con una estructura que contemplaba un subsuelo, más tres plantas para la instalación de los laboratorios. El organismo tenía la imperiosa necesidad de contar con un edificio propio para un mejor desenvolvimiento de todos sus equipos científicos.

El incremento del trabajo en cada centro de investigación permitió la consolidación de un proceso de expansión arquitectónico que significó la construcción de nuevos edificios destinados a cada uno de los laboratorios. Algunos quedaron aledaños al edificio principal y otros se construyeron en el campus que la institución posee en la localidad de Gonnet. La sede original hoy está ocupada en su totalidad por oficinas administrativas

Generación de contenidos para TV • Servicios Integrales de Producción Audiovisual
Estudios y Móviles HD • Doblaje y Subtitulado • OnLine 2k/4k • Motion Graphics • VFX
Character Animation 2D/3D • Buenos Aires • São Paulo • México DF • Madrid.

NonStop



MediaProCom



LASOCIEDADPOST




Queremos agradecer a quienes nos brindan su confianza un año más.



www.nonstoptv.tv • www.mediaprocom.tv • www.lasp.com.ar

FUNDACIÓN BUNGE Y BORN



FUNDACIÓN BUNGE Y BORN

Apoyando la investigación desde 1963

> BECAS POSDOCTORALES
PREMIO FUNDACIÓN BUNGE Y BORN
Cierre de inscripción: 25 de noviembre 2011



La Fundación Bunge y Born anuncia el segundo concurso de sus becas posdoctorales, dirigidas a jóvenes científicos, para que puedan realizar y completar sus trabajos posdoctorales en universidades y/o centros de investigación de la Argentina. Los proyectos deberán contar con el aval de los científicos que obtuvieron el Premio Fundación Bunge y Born o el Premio Estímulo a Jóvenes Científicos y podrán ser propuestos en las siguientes disciplinas.

MEDICINA, AGRONOMÍA, QUÍMICA, INGENIERÍA, VETERINARIA, BIOLOGÍA BIOQUÍMICA, CIENCIAS DEL AMBIENTE, ARQUEOLOGÍA, GEOLOGÍA, FÍSICA

Información disponible para poder concursar en nuestra web: <http://www.fundacionbyb.org/>
Por consultas llamar al teléfono 4318-6600 ó 4318-6613 o escriba al mail: mbalmaceda@fundacionbyb.org



Dirección Nacional de Relaciones Internacionales

Boletín de octubre
2011

Área de Cooperación Internacional con Empresas

- 1 - Segunda Convocatoria ANR Internacional de FONTAR / Página 2
- 2 - Miniforo CYTED-IBEROEKA "Innovaciones en Química"- Barcelona, España / Página 2
- 3 - Seminario de Oportunidades de Ventas a las Agencias, Fondos y Programas de la Organización de las Naciones Unidas / Página 3
- 4 - Misión Comercial Multisectorial / Página 3
- 5 - Encuentro Empresarial de Oportunidades de Negocios, Comercio e Inversiones entre Argentina, Portugal y Angola / Página 4
- 6 - Tercera Ronda de Negocios Internacionales de la Industria Eléctrica, Electrónica y Luminotécnica BIEL LIGHT + BUILDING BUENOS AIRES 2011 / Página 4
- 7 - Segundo Foro Iberoamericano para el Impulso de la Banda Ancha / Página 4
- 8 - Curso "Mercado de Crudos y Productos en Argentina, Logística del Transporte" / Página 5
- 9 - Cursos del Instituto Argentino del Petróleo y del Gas / Página 5

Instrucciones para autores

Ciencia e Investigación

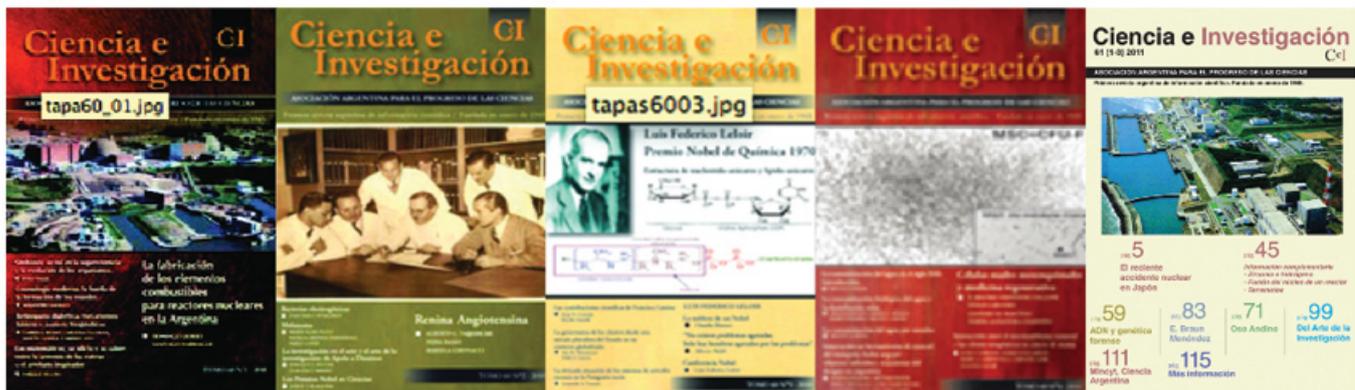
Ciencia e Investigación, órgano de difusión de la asociación Argentina para el Progreso de las Ciencias (AAPC) difunde en forma electrónica temas de divulgación científica y tecnológica destinada a educadores, estudiantes universitarios, profesionales y público en general. La temática abarcada por sus artículos es amplia y va desde temas básicos hasta bibliográficos: actividades desarrolladas por científicos y tecnólogos, reuniones nacionales e internacionales, entrevistas, historia de las ciencias, crónicas de actualidad, biografías y comentarios bibliográficos.

Desde el año 2009 la revista tiene difusión on line (www.aargentinapciencias.org)

Presentación del trabajo

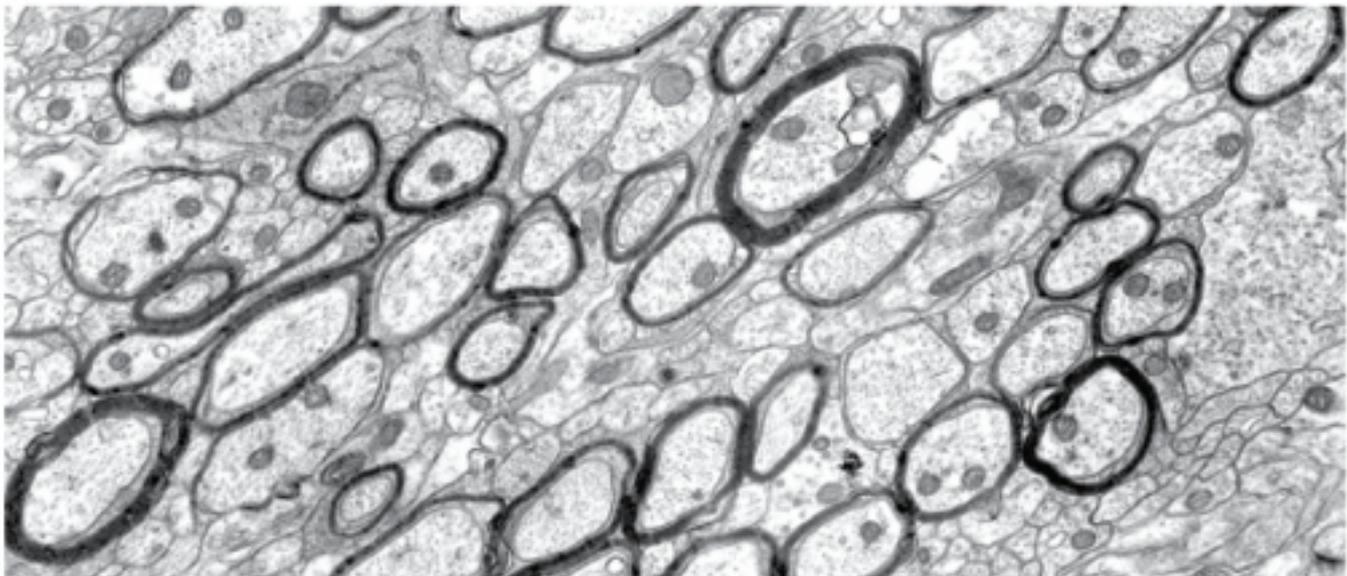
El artículo deberá presentarse en un CD cuyos caracteres no excedan 10.000 caracteres, letra Time New Roman tamaño 12, simple espacio, deberá incluir el Título del trabajo, Nombre del/los autor/res, Institución a que pertenece/n y lugar de trabajo, incluyendo correo electrónico.

Deberá contener tres palabras claves en castellano y en inglés, un resumen del trabajo en castellano y otro en inglés, con un máximo de 250 caracteres. El artículo incluirá figuras con sus leyendas, tablas, esquemas y bibliografía. Otros artículos relacionados con actividades científicas, bibliografías, historia de la ciencia, crónicas o notas de actualidad, etc. no deberán excederse de 6.000 palabras.



**PREMIO FUNDACION RENE BARON
EN CIENCIAS MEDICAS AÑO 2012**

ENFERMEDADES AUTOINMUNES DEL SISTEMA NERVIOSO



Axones con y sin mielina—Microscopio electrónico por Camino Ferrás. Lab. de Terapias Regenerativas y Protección de Sistema Nervioso, FJL, Bs.As.

LLAMADO A CONCURSO: 22 DE AGOSTO DE 2011 AL 1º DE ABRIL 2012

GALARDÓN: \$ 360.000

INFORMES: DIRECCIÓN DE ASUNTOS ACADÉMICOS DE LA

ACADEMIA NACIONAL DE MEDICINA

**AVDA. LAS HERAS 3092 (1425) CAPITAL HORARIO 9 A 14 HORAS TEL/FAX 3805-8176 Y TEL: 4808-9059
E-MAIL: ASUNTOSACADEMICOS@ANM.EDU.AR WWW.ACAMEDBAI.ORG.AR**

CONVOCATORIA PARA LA PARTICIPACIÓN DE JÓVENES INVESTIGADORES AL WORKSHOP “FRONTERAS EN BIOCIENCIAS” ORGANIZADO ENTRE MINCYT-SOCIEDAD MAX PLANCK

Fri, 3 Feb 2012 12:23:47 -0300

DNRRII-MINCYT <dirinfo@mincyt.gov.ar>

<dri@mincyt.gov.ar>

Hasta el **5 de marzo de 2012** se encuentra abierta la convocatoria para la presentación de postulaciones para candidaturas para participar del **Workshop “Fronteras en Biociencias”**, organizado por el Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva de la República Argentina (MINCYT) a través de su Dirección Nacional de Relaciones Internacionales (DNRI); la Sociedad Max Planck de Alemania, a través del Instituto en Biomedicina de Buenos Aires –Instituto Partner de la Sociedad Max Planck; y la Embajada de Alemania en Argentina.

[*Se adjunta el programa académico del seminario y bases junto al formulario de inscripción](#)

Requisitos:

1. Deberán ser jóvenes investigadores que se encuentren realizando sus estudios de doctorado.
2. Estar realizando sus estudios y residiendo en el interior del país.
3. Realizar el doctorado en el área de las Ciencias biológicas y/o biomédicas.

Una Comisión de expertos será la encargada de evaluar las postulaciones teniendo en cuenta la calidad científica, el perfil de los candidatos y la temática de investigación.

En caso de ser seleccionados, los postulantes deberán presentar un póster de su trabajo de investigación para su discusión con los expositores.

Beneficios:

Los candidatos seleccionados serán beneficiados con el pasaje a Buenos Aires.

El alojamiento en dicha ciudad y la participación en todas las actividades del Workshop.

Cronograma:

Cierre: 5 de marzo de 2012.

Evaluación: del 6 de marzo al 15 de marzo de 2012.

Selección final: 16 de marzo de 2012.

Los postulantes deberán enviar el formulario adjunto en forma electrónica antes de **5 de marzo de 2012 a las 16 horas**.

A Julia Rubio:
jrubio@mincyt.gov.ar

(La presentación tendrá validez en el momento en que el candidato reciba la confirmación de la Dirección Nacional de Relaciones Internacionales, confirmando la recepción de la documentación correspondiente).



BOLETIN DE LA DIRECCION NACIONAL DE RELACIONES INTERNACIONALES

NOVEDADES DE COOPERACIÓN INTERNACIONAL BOLETÍN DE LA DIRECCIÓN NACIONAL DE RELACIONES INTERNACIONALES

Cooperación Bilateral

• Programa de cooperación científico -tecnológico-MINCYT-ECOS 2012

Abierto desde el 15 de diciembre de 2011 al 15 de abril de 2012 para la presentación de proyectos de investigación conjunta entre grupos de Argentina y Francia, en el marco del Programa de Cooperación que desarrollan el Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva y ECOS de Francia.

Este llamado abarca la investigación científica en todos los campos del conocimiento. Bases y formulario en www.mincyt.gov.ar

• Convocatoria MATH-AmSud - 2012

Abierta hasta el 15 de mayo de 2012. Las bases y formularios de la convocatoria están disponibles en <http://www.mathamsud.org/es/content/convocatorias>

• Convocatoria STIC-AmSud 2012

Abierta hasta el 15 de mayo de 2012. Las bases y formularios de las convocatorias están disponibles también en <http://www.sticamsud.org/pt-br/content/convocatorias>

• Convocatoria Synchrotron 2012

Abierta hasta el 15 de febrero de 2012. Bases y condiciones: <http://www.synchrotron-soleil.fr/Recherche/SUN>

Consultas por proyectos:

Lic. Eugenia Godoy/megodoy@mincyt.gov.ar

Probitec - Convocatoria para la realización de Escuelas en 2012 y 2013

El PROBITEC recibe propuestas para la realización de una escuela a realizarse en el primer semestre del 2012 y una escuela a realizarse en el primer semestre del 2013, en Argentina, sobre temáticas relacionadas al área de células madre.

La convocatoria estará abierta desde el **2 de enero hasta el 31 de marzo de 2012.**

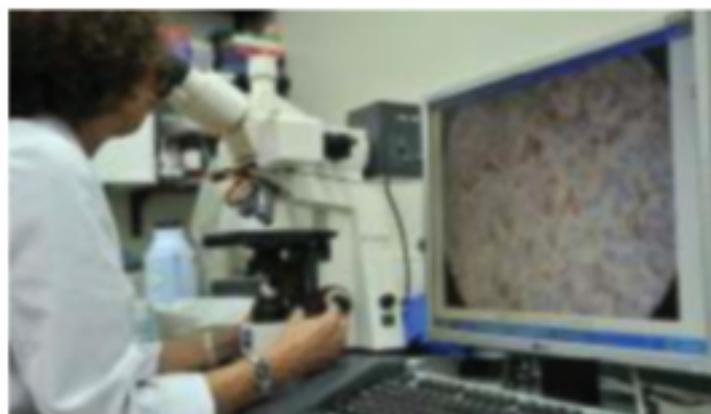
Más información: www.mincyt.gov.ar
Consultas: probitec@mincyt.gov.ar

BOLETIN DE LA DIRECCION NACIONAL DE RELACIONES INTERNACIONALES

Boletín de la dirección nacional de relaciones internacionales**Funcionarios argentinos asesoraron a sus pares peruanos en la creación de un futuro Ministerio de Ciencia**

La directora nacional de Relaciones Internacionales del Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva, Ing. Agueda Menvielle y el Presidente de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, Dr. Armando Bertranou, se reunieron con funcionarios del Perú para asesorarlos en la creación de una nueva estructura científico-tecnológica y compartir la experiencia del Ministerio argentino.

Durante su visita a Lima, la Ing. Menvielle y el Dr. Bertranou mantuvieron varias reuniones con miembros de la Comisión Consultiva en Ciencia, Tecnología e Innovación del Ministerio de Educación de Perú, la cual fue creada por el presidente Ollanta Humala para proponer una serie de reformas del sistema científico peruano tendientes a mejorar y jerarquizar el área en el país.



Los funcionarios que la conforman se mostraron particularmente interesados en la experiencia argentina de creación del Ministerio de Ciencia y en las políticas de financiamiento focalizado en áreas estratégicas. Asimismo se interiorizaron acerca del

funcionamiento del Programa RAICES y las distintas herramientas de vinculación y repatriación de investigadores residentes en el exterior.

La Comisión Consultiva en Ciencia, Tecnología e Innovación es presidida por la Dra. Gisela Orjeda, una científica peruana especialista en genómica que fue repatriada recientemente por el presidente Humala. También son parte de la comisión el titular del Consejo Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación Tecnológica (CONCyTEC), Víctor Carranza, y otros investigadores, profesores universitarios y especialistas en innovación y propiedad intelectual.

Los funcionarios argentinos también mantuvieron un encuentro con el congresista Pedro Spadaro, presidente de la Comisión de Ciencia y Tecnología del Congreso Peruano. Estuvieron acompañados por el embajador de la Argentina en Perú, Daño Alessandro.

Luego de las reuniones, la Ing. Agueda Menvielle calificó la visita como altamente positiva y destacó que "existe una voluntad política de la Argentina de jerarquizar las relaciones con América Latina en materia científico-tecnológica y poder transferir el ejemplo exitoso de nuestro país a otros países de la región." Por su parte el presidente de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, Dr. Armando Bertranou, resaltó el interés de los funcionarios peruanos en "conocer la experiencia del Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva en la integración del conocimiento a la producción con el objetivo de convertir a la ciencia en motor del desarrollo económico, así como también en la manera de llevar a cabo esta integración con instrumentos económico financieros como los de la Agencia".

Argentina y Perú mantienen una estrecha cooperación científico-tecnológica y llevan adelante dos programas binacionales en las áreas de energías renovables y uso sustentable de la biodiversidad.

Asimismo la Argentina ha asesorado a científicos y funcionarios peruanos en la participación de proyectos de investigación financiados por la Unión Europea (a través del 7º Programa Marco) y la creación de líneas de financiamiento propias como las que lleva adelante la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica. Durante su visita a Perú, la directora nacional de Relaciones Internacionales, Ing. Menvielle, también concurre a la reunión del Comité del estatuto y del reglamento del Programa CYTED.

Convocatoria CYTED 2012

El Programa Iberoamericano de Ciencia y Tecnología para el Desarrollo (Programa CYTED) abre su Convocatoria pública y anual de Acciones CYTED, que permanecerá abierta desde el 1 de febrero hasta el 3 de abril a las 17 horas (hora de Madrid). Para solicitar una propuesta se deberá cumplimentar el formulario on-line habilitado en la página Web de CYTED.

Asimismo, todos los documentos relativos a la Convocatoria se encuentran disponibles en la Web del Programa (dentro del apartado "CYTED investigación Convocatoria 2012"). Más información: www.cytcd.org

Boletín de la dirección nacional de relaciones internacionales

Con el fin de promover las acciones Marie Curie del Séptimo Programa Marco de la UE; el 1 de enero de 2012 comenzó la ejecución del Proyecto People Network +, que tiene como único socio latinoamericano al Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva de Argentina.

Dicho proyecto apunta a fortalecer el potencial humano en las áreas de investigación y tecnología en Europa, estimulando a los jóvenes a inclinarse hacia la investigación, alentando a los investigadores europeos a permanecer en Europa y atrayendo a Europa a los mejores investigadores de todo el mundo. La dimensión internacional es bien tratada por las Acciones Marie Curie (MCA), proporcionando una serie de oportunidades para los

investigadores de terceros países y organizaciones que colaboren con sus homólogos europeos. Mientras que los investigadores de la UE y las organizaciones de investigación suelen ser conscientes de las oportunidades ofrecidas por la gente, hay todavía una necesidad de gran promoción de los MCAs a las comunidades científicas de terceros países.

People Network + se centrará en el intercambio de buenas prácticas y cooperaciones transnacionales, mediante el fortalecimiento de una cooperación más estrecha entre los Puntos de Contacto Nacionales del Programa PERSONAS.

PeopleNetwork + facilitará la mejora de la calidad de los servicios de los NCP a través y fuera de Europa en el área de movilidad y servirá para incrementar la transparencia de las becas de la UE y las oportunidades de capacitación para garantizar el acceso igualitario.

El Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva, a través del Instituto de Biomedicina de Buenos Aires que funcionará en el Polo Científico Tecnológico, integrará la primera Red de Institutos de investigaciones en biomedicina para abordar en forma coordinada el estudio de aspectos biológicos, epidemiológicos y sociológicos de enfermedades degenerativas de la región.

También formarán parte de la iniciativa la Fundación Oswaldo Cruz, de Brasil; el Laboratorio Central de Salud Pública del Ministerio de Salud (LCSP) y centros asociados, de Paraguay; y el Institut Pasteur de Montevideo (IP Montevideo), de Uruguay.

La red estará financiada por el Fondo de Convergencia Estructural del MERCOSUR (FOCEM), instrumento del bloque para la reducción de las asimetrías regionales y representará la primera experiencia de integración de los Estados miembros del MERCOSUR en ciencia, tecnología e innovación. A través del financiamiento de este proyecto, llamado "Investigación, educación y biotecnología aplicada a la salud", se llevarán adelante investigaciones coordinadas entre los diferentes centros

utilizando las fortalezas y las experiencias en las distintas etapas de investigación de cada institución participante. Se estudiarán males como el Alzheimer y el Parkinson; enfermedades metabólicas como la diabetes, la obesidad o disfunciones cardiovasculares; patologías neurológicas como la demencia y psiquiátricas como la depresión; inmunológicas, con énfasis en las parasitarias como el Chagas; y genéticas u oncológicas como la distrofia muscular y el cáncer de mama. El objetivo final será colocar a la biotecnología al servicio de la salud de la población.

Para Argentina, el FOCEM dispuso que USD 1.728.086 sean destinados a la adquisición del equipamiento investigación científica en el Instituto de Biomedicina de Buenos Aires, el instituto de investigación partner de la Sociedad Max Planck que funcionará en el Polo Científico y Tecnológico. Este monto también financiará la compra de material para la realización de actividades de investigación científica, el dictado de un curso de posgrado y gastos de movilidad de los participantes en los distintos laboratorios para el trabajo experimental. Por su parte, nuestro país invertirá USD 646.850 para material de consumo, mantenimiento de equipos y construcción de laboratorios.

Conferencia anual de IAESTE

Del 20 al 27 de enero se celebró la 65o Conferencia anual del programa de intercambio de estudiantes IAESTE en la ciudad de Skopje, República de Macedonia. Durante el encuentro se llevaron a cabo 50 intercambios con diferentes países como Alemania, Austria, Holanda, Reino Unido, Italia, España, Brasil, Colombia y Ecuador, entre otros. Esto posibilitará que 50 estudiantes argentinos completen su formación profesional con una experiencia práctica en el exterior. Asimismo estudiantes extranjeros vendrán a nuestro país a realizar actividades similares.

Crearán la primera Red de investigación en biomedicina del MERCOSUR.

Más información: www.iaeste.mincyt.gov.ar



Novedades de cooperación internacional. Dirección nacional de relaciones internacionales ministerio de ciencia, tecnología e innovación productiva. Becas

El Instituto de Ciencia y Tecnología MASDAR -Institute of Science and Technology- ofrece becas a 10 estudiantes argentinos para la realización de posgrados en su institución. Las condiciones para recibir las inscripciones es que los interesados posean carreras de grado relevantes y afines en ciencias de ingeniería, computación e información, con un mínimo de promedio de entre 8 y 9 puntos, puntaje de 155 en el test GRE, y 91 para el Toefl en su versión IBT.

Los estudiantes que califiquen y sean aprobados para participar de este programa, recibirán una beca completa. Asimismo, no solamente recibirán su título de parte de MASDAR, sino también tendrán la posibilidad de recibir una certificación extra de parte del MIT (Massachusetts Institute of Technology). Debe resaltarse la importancia que los cursos de referencia podrán tener para la capacitación de recursos humanos provenientes de nuestro país. En tal sentido, se agradecerá favorecer la difusión de la presente información entre las instituciones que esa Dirección estime corresponder.

Más información: www.masdar.ac.ae

Otros eventos de interés

Av. Córdoba 831, 4 to. piso (C1054AAH) Buenos

Aires, Argentina. Tel: (+54 11) 4891-8470 al 73
 Fax: (+54 11) 4891-8460
 Email: dirinfo@mincyt.gov.ar www.mincyt.gov.ar

Eulasur workshop copenhagen starting-up and managing companies in the field of materials and nanomaterials

These aims are all in focus at the work-shop in Copenhagen, Denmark on March. 14th to 16th 2012. In this second EULASUT work-shop we will build contacts, confidence and trust between the researchers and economic and social stakeholders. The project potentials will be expressed through three themes:

Starting-up and managing companies in the field of Materials and Nano-structured materials
 Social, political and human aspects of nano-technologies
 Collaboration and projects for the future

Más información:

www.icmab.es/ews2012/index.html

ICRI 2012

The forthcoming International Conference on Research Infrastructures (ICRI 2012) will take place in Copenhagen, Denmark on 21-23 March 2012, under the auspices of the Danish Presidency of the European Council. ICRI 2012 is co-organized by the Danish Ministry of Science, Innovation and Higher Education and the European Commission.

This will be the seventh major Conference on Research Infrastructures, and for the first time the Conference will address an international audience.

Más información: www.icri2012.dk

Embryology: Concepts & Techniques in Modern Developmental Biology

Course Date: June 4 - July 17, 2012 This course, held each summer at the Marine Biological Lab at Woods Hole, is an intensive six-week laboratory and lecture course for graduate students, postdoctoral fellows, and senior researchers who seek a broad view of the modern issues of developmental biology and the experimental approaches used to address these ongoing questions.

Más información: www.mblembryology.org

II SHIALC

Simposio de Historia de la Informática en América Latina y el Caribe XXXVIII CLEI-Medellín/Colombia 1 al 5 de octubre de 2012.

Serán bienvenidas las contribuciones provenientes de las más diversas áreas de conocimiento y de diferentes prácticas profesionales, ya que el SHIALC es un evento interdisciplinario dedicado no sólo a la historia de los artefactos y de los procesos de la informática, sino también a las relaciones entre informática y política, economía, trabajo, universidad, educación, cambio social, negocios, medio ambiente, políticas públicas, ciencia y tecnología, cultura, artes y humanidades.

Los trabajos podrán estar escritos en castellano, portugués o inglés, y deben ser enviados hasta el 15 de mayo de 2012, en formato PDF, a través del sitio del CLEI 2012 (www.clei2012.org)