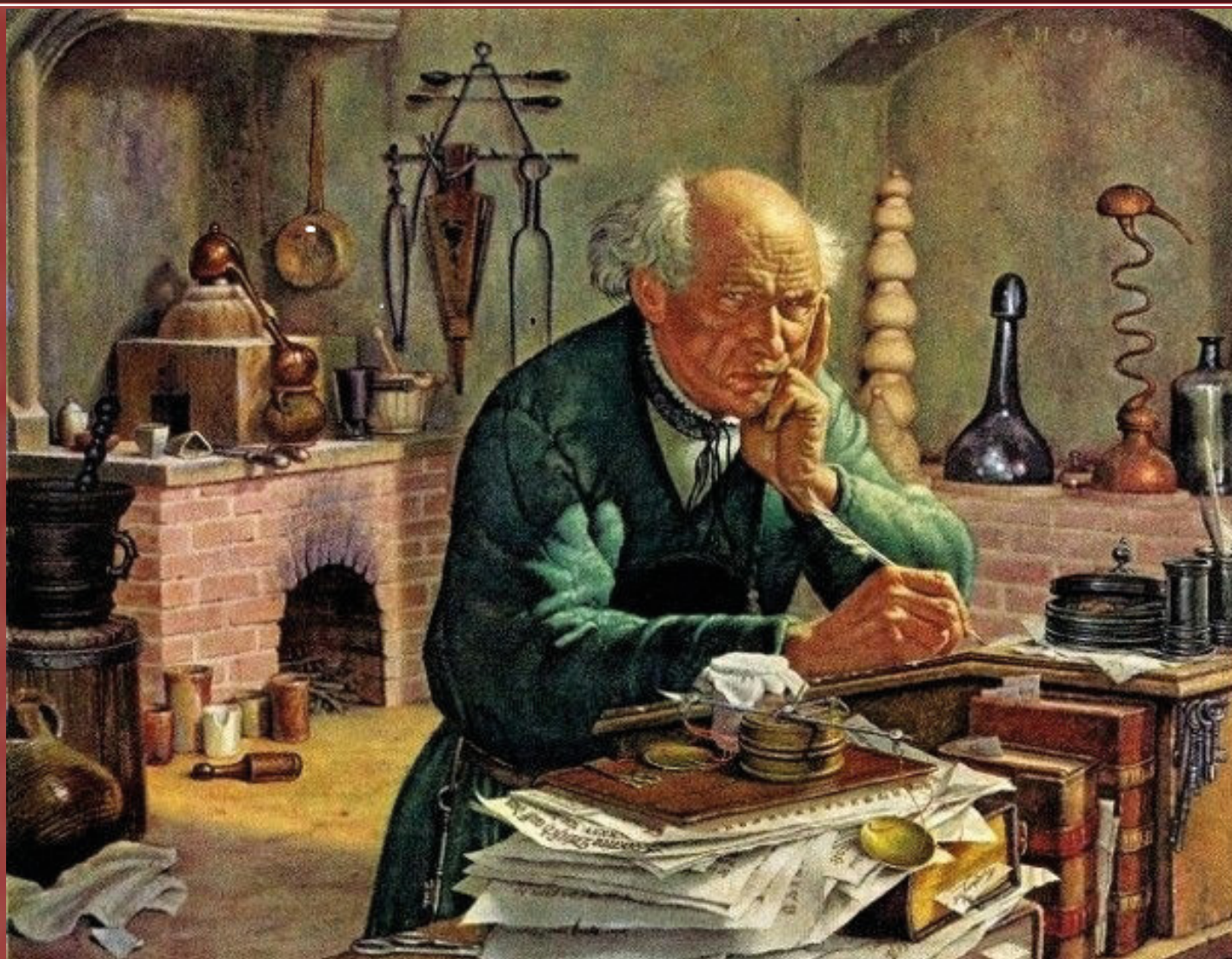


Ciencia e Investigación

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



HISTORIA DE LA QUÍMICA ORGÁNICA EN ARGENTINA

■ Juan E. Argüello, Alejandro M. Fracaroli y Miriam C. Strumia

LA QUÍMICA DEL SIGLO XXI

■ Miguel A. Blesa

QUÍMICA ANALÍTICA HOY: LEJOS DEL EMPIRISMO, Y HACIA UN EQUILIBRIO ENTRE ECOEFICIENCIA, FUNCIONALIDAD Y RENDIMIENTO

■ Alejandro C. Olivieri

Amigos y colaboradores de la AAPC



Contribuciones de años anteriores

HEXAGON



TOMO 73 N°4
2023

EDITOR RESPONSABLE

Asociación Argentina para el
Progreso de las Ciencias (AAPC)

COMITÉ EDITORIAL

Editor: Luis A. Quesada Allué

Editora Adjunta: Paula Regina
Alonso

Editores asociados

Dr. Gerardo Castro

Dra. Lidia Herrera

Dr. Roberto Mercader

Dra. Alicia Sarce

Dr. Juan R. de Xammar Oro

Dr. Norberto Zwirner

ASISTENCIA TÉCNICA

Gabriel Martín Gil (diagramación y
administración web)

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.

A partir de 2012 se publica en dos
series, Ciencia e Investigación
y Ciencia e Investigación Reseñas.

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

*Philippus Theophrastus Bombast
von Hohenheim llamado
Paracelso (1493-1551), el
alquimista y astrólogo suizo
precursor de la farmacología.*



SUMARIO

EDITORIAL

Un recorrido por las ramas de la química no biológica: la mirada de
algunos de los protagonistas en el país

Susana Hernández 3

ARTÍCULOS

Historia de la química orgánica en Argentina

Juan E. Argüello, Alejandro M. Fracaroli y Miriam C. Strumia5

La química del siglo XXI

Miguel A. Blesa 13

Química analítica hoy: lejos del empirismo, y hacia un equilibrio entre
ecoeficiencia, funcionalidad y rendimiento

Alejandro C. Olivieri 23

INSTRUCCIONES PARA AUTORES 31

*... 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

Asociación Argentina para el Progreso de las Ciencias

COLEGIADO DIRECTIVO

Presidente
Ester Susana Hernández

Vicepresidente
César Belinco

Secretaria
Alicia María Sarce

Prosecretaria
Ana María Puyó

Tesorero
Alberto Antonio Pochettino

Protesorera
Graciela Noemí Balerio

Miembros Titulares
Paula Alonso
Miguel Angel Blesa
Lidia Herrera
Mario A.J- Mariscotti
Ursula María Molter
Ernesto Podestá
Luis Alberto Quesada Allué
Fernando Stefani

Miembros Institucionales:
Asociación Argentina de Astronomía (AAA)
Gabriela Castelleti

Asociación Argentina de Investigación Físicoquímica (AAIFQ)
Florencia Fagalde

Sociedad Argentina de Genética (SAG)
Angela R. Solano

Miembros Fundadores
Bernardo A. Houssay – Juan Bacigalupo – Enrique Butty
Horacio Damianovich – Venancio Deulofeu – Pedro I. Elizalde
Lorenzo Parodi – Carlos A. Silva – Alfredo Sordelli – Juan C. Vignaux –
Adolfo T. Williams – Enrique V. Zappi

AAPC
Avenida Alvear 1711 – 4° Piso
(C1014AAE) Ciudad Autónoma de Buenos Aires – Argentina
www.aargentinapciencias.org

UN RECORRIDO POR LAS RAMAS DE LA QUÍMICA NO BIOLÓGICA: la mirada de algunos de los protagonistas en el País



Susana Hernández

Presidenta de la AAPC

E-mails: susana.hernandez46@gmail.com

Este número de la revista Ciencia e Investigación está destinado a presentar información actualizada sobre el pasado, presente y futuro de la química no biológica, en el mundo en general y en la Argentina en particular. En estos artículos se presta atención, y se invita a reflexionar, sobre las peripecias del desarrollo de estas disciplinas – química inorgánica, analítica, físico química, química de síntesis, química orgánica- desde los orígenes de la química como motor del conocimiento hasta nuestros días, y los grandes desafíos que ofrece el futuro. Así, Miguel Angel Blesa nos explica que desde los albores de esta ciencia, el análisis y la síntesis configuraron el corazón de la Química, y ello continúa siendo válido en la actualidad, si bien en el siglo XX la física fue sentando las bases teóricas de la Química y la Química Física se sumó a las ramas tradicionales que exploraban la síntesis (Química Inorgánica y Química Orgánica) y el análisis (Química Analítica). Este trabajo presenta un detallado informe sobre las capacidades y perspectivas de la síntesis química, centrando la atención en las 10 principales tecnologías emergentes identificadas en 2022 por la International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC), de profunda importancia para el desarrollo sustentable.

Alejandro Olivieri a su vez nos instruye de manera muy amena sobre la química analítica, que en simpáticas palabras del químico analítico norteamericano Charles Norwood Reilley por él citadas, “es lo que hacen los químicos analíticos”. Su artículo en este número de *CeI* describe de manera sencilla pero rigurosa las características principales de los métodos analíticos, deteniéndose en las cuestiones relacionadas con la ecoeficiencia y el respeto por el ambiente. En mayor detalle, se pasa revista a la química verde o sostenible, a la delicada y compleja búsqueda del equilibrio con los inevitables aspectos analíticos no-verdes, y a las dificultades inherentes a prestar el debido cuidado del ambiente sin violentar objetivos puramente analíticos, tales como la exactitud y el límite de detección.

El artículo de Juan E. Argüello, Alejandro M. Fracaroli y Miriam C. Strumia presenta una muy erudita historia del desarrollo de la química orgánica en el país, partiendo de los albores de la química como área de investigación,

sus líderes, y la emergencia de la QO en las distintas regiones, que abarcan toda la geografía nacional con foco en universidades nacionales e institutos de investigación. Sin duda los lectores reconocerán una pléyade de prohombres y promujeres de la disciplina, que ejercieron un destacado liderazgo.

En síntesis, gracias a estos trabajos, no puede cabernos duda de la relevancia de estas distintas disciplinas en el quehacer científico-tecnológico en genial, y especialmente, de su rol en el desarrollo independiente de nuestro país.

HISTORIA DE LA QUÍMICA ORGÁNICA EN ARGENTINA

Palabras clave: Química Orgánica, historia, centros de investigación.

Key words: Organic Chemistry, History of Chemistry, Research Centers.

Este artículo presenta el desarrollo de la Química Orgánica en nuestro país desde sus comienzos. Se muestra cómo la química orgánica se fue desprendiendo del incipiente desarrollo de la química en general a través de su identificación con el reino animal y vegetal, y así diferenciarse de la química inorgánica.

En los primeros años del siglo XIX, el interés por la química como disciplina tenía tres grandes problemas: el limitado acceso a publicaciones especializadas, la falta de producción local de conocimiento y la escasez de industrias. Sin embargo, con el correr de los años, la enseñanza de la química comenzó a impartirse en todos los ámbitos educativos recibiendo un gran impulso. Posteriormente, los químicos comenzaron su lucha para encontrar un espacio dedicado exclusivamente a la investigación. Los argumentos de persuasión eran interesar a las Universidades, al Estado y las industrias de la importancia que la investigación podía tener en el desarrollo futuro del país. Los resultados exitosos se vieron con la creación de los primeros institutos de investigaciones del país, de las asociaciones científicas y de los organismos dedicados a fomentar las políticas científicas.

También se presenta la iniciación y crecimiento de los diferentes centros de referencia de la Química Orgánica en el país: Buenos Aires, Bahía Blanca, Región de Cuyo, Córdoba, Río IV y Rosario.

This article introduces the development of organic chemistry in our country, since its beginnings. It shows how the organic chemistry area was gradually appearing from the general chemistry field, which was also in its early stages and differentiation between the animal and vegetal kingdoms, thus differing from the inorganic chemistry area.

During the XIX century's first years, the interest for chemistry as discipline had three big challenges: the limited access to international and specialized journals, the lack of locally developed knowledge, and the absence of local industry. However, with the time, chemistry started to be a subject thought at different levels of educational institutions, and this was a big bust for the discipline. Subsequently, chemists began their efforts to find a proper research environment, and where they could develop only scientific projects. Some of their strategies were attract the Universities, Government and Industries attention and make them see the importance that chemistry research could have in the country's development and the future of Argentina. The success of this strategy was evident with the creation of several Research Institutes throughout the country, the creation of different Scientific Societies and the advancement on scientific policies.

This article also presents creation and grow of diverse organic chemistry's reference national centers such as Buenos Aires, Bahía Blanca, Región de Cuyo, Córdoba, Río IV and Rosario.

■ LOS ALBORES DE LA QUÍMICA EN LA ARGENTINA

Si analizamos los escasos antecedentes que hay en Argentina de la historia de la química, podríamos decir que en nuestro país nos debemos remontar a los primeros años del siglo XIX. Por esos tiempos, la química se impartía con la intención de dar los conocimientos básicos de

esa ciencia en carreras como farmacia y medicina, tarea que comenzó en las Universidades (1,2). Por eso se dice, que los primeros químicos eran farmacéuticos o médicos. Entre ellos podemos mencionar a Miguel O'Gorman, Cosme Argerich y Manuel Moreno y Miguel Puiggari, Domingo Parodi y Pedro Arata, quienes fueron los responsables de las primeras investigaciones en química

y principalmente orientadas hacia la fitoquímica y a sus aplicaciones médicas (3).

En aquellos años, el interés por la química como disciplina tenía tres grandes problemas: el limitado acceso a publicaciones especializadas, la falta de producción local de conocimiento y la escasez de industrias. Si bien existían algunas

**Juan E. Argüello^{1,2},
Alejandro M. Fracaroli^{1,2},
Miriam C. Strumia^{1,3,*}**

¹Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Química Orgánica, Haya de la Torre y Medina Allende, Ciudad Universitaria, X5000HUA Córdoba, Argentina

²Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Instituto de Investigación en Físicoquímica de Córdoba (INFIQC), Ciudad Universitaria, X5000HUA Córdoba, Argentina e Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

³Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos y Química Aplicada (IPQA), Ciudad Universitaria, X5000HUA Córdoba, Argentina

*E-mail: mstrumia@unc.edu.ar

industrias locales, como el salado de carnes y cueros, la fabricación de grasas y jabones o las vitivinícolas de Cuyo, todas respondían a criterios empíricos y no científicos.

Sin embargo, con el correr de los años, la química empezó a diferenciarse de la farmacia y la medicina y su enseñanza comenzó a impartirse en otros ámbitos recibiendo un nuevo impulso. A partir de 1852, el curso de química se establece en los estudios preparatorios y se hace obligatorio en 1856. La industria local comienza a ser más importante y la química aplicada se hace cada vez más necesaria. Por lo tanto, el desarrollo urbano y la expansión de una economía agroexportadora, incentivó los estudios y la investigación química al servicio de esas funciones.

Otro acontecimiento muy significativo de esa época fue el nombramiento como Rector de la Universidad de Buenos Aires del Dr. Juan María Gutiérrez en 1861, quien dio un impulso notable a los estudios de ciencias naturales en general y de química en particular. Este movimiento también tuvo su impacto en con la llegada de Sarmiento a la presidencia en 1868, durante la cual se fundó la Academia Nacional de Ciencias con sede en Córdoba para promover el desarrollo de las ciencias naturales en esta parte del país y trajo varios investigadores de Alemania que se instalaron en esa ciudad. Posteriormente, se creó la Sociedad Científica Argentina, en 1872, con sede en Buenos Aires. El gran avance en el conocimiento en temas de química se da con la creación de la primera carrera exclusiva para la Química en Argentina, fundada en la entonces Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, de la Universidad de Buenos Aires (UBA), en 1896. Un año después, comenzaron los cursos del Doctorado en

Química en la misma Universidad, y el 26 de noviembre de 1901 egresaba el primer diplomado, el Dr. Enrique Herrero Ducloux. Al cumplirse los 50 años de ese acontecimiento y en un acto de homenaje al Dr. Ducloux, se declaró en Argentina el "Día nacional del químico". Enrique Ducloux tuvo un rol preponderante en el desarrollo de la química en la Universidad Nacional de la Plata (UNLP). En 1906 puso en marcha la Escuela de Química y Farmacia que posteriormente, en 1909 pasó a ser Facultad y fue elegido primer decano. El emblema de la Facultad, una hoja de roble, fue diseñado personalmente por Ducloux. En 1923, la Facultad de Química y Farmacia comenzó a expedir títulos de doctor.

Ya a comienzos del siglo XX, la química comenzó a diferenciarse en especialidades como la química orgánica (QO), inorgánica y analítica, y posteriormente, surgieron nuevas áreas como la fisicoquímica, la química biológica y la bioquímica. También la enseñanza se orientó en dos caminos diferentes: la enseñanza orientada a la formación de profesionales técnicos, ingenieros químicos, químicos e ingenieros industriales, y la que está orientada a la formación de académicos, investigadores y laboratoristas.

En 1912, se constituyó la Sociedad Química Argentina, siendo el Dr. Ducloux su primer presidente. Luego en 1920, la entidad tomó su actual denominación, Asociación Química Argentina (AQA).

■ LA INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA EN LA ARGENTINA: SURGIMIENTO DE LA QUÍMICA ORGÁNICA

Posteriormente, los químicos comenzaron su lucha para encontrar un espacio dedicado exclusivamente a la investigación. Los argumen-

tos de persuasión eran interesar a las Universidades, al Estado y las industrias de la importancia que la investigación podía tener en el desarrollo futuro del país. Los resultados exitosos se vieron con la creación de los primeros institutos de investigaciones del país, como por ejemplo el Instituto de Investigaciones Químicas de la Universidad Nacional de la Plata, en 1926 y el de Investigaciones Microquímicas de la Universidad Nacional del Litoral (UNL) en 1936. Paralelamente, la química comenzó a vincularse con el desarrollo industrial, y muy especialmente a la industria petrolera y en 1942, se crea el Laboratorio de Investigaciones de YPF.

A partir de los años 50, la química y la investigación fueron pilares muy importantes para el desarrollo industrial de nuestro país, donde comenzaba a gestarse el reemplazo del modelo agroexportador por el de la industrialización y la sustitución de las importaciones.

El gran impulso para la investigación en el área de la Química, se produce con la creación del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) en 1958, con la creación de la figura del profesor de tiempo completo en las Universidades y de la carrera del investigador en 1960. Desde ese momento, se multiplicarán los investigadores y las líneas de investigación en las diferentes áreas de la Química. Tiempos en que se destacan grandes investigadores que fueron reconocidos con Premios Nobel como Bernardo Houssay (1947), Luis F. Leloir (1970) y Cesar Milstein (1984).

Posteriormente, entre los años 1966 al 1975, vinieron épocas muy duras para el desarrollo científico tecnológico del país. Durante los años de la dictadura militar se inter-

vinieron las universidades públicas y se incrementó enormemente la persecución política e ideológica; muchos científicos e investigadores debieron exiliarse y otros, incluso, fueron detenidos y desaparecidos.

Por su parte, la QO siempre estuvo presente en el desarrollo de la Química en Argentina, ya que se acostumbraba a relacionarla con el reino animal y vegetal, y así diferenciarla de la química inorgánica. Se distinguen varias grandes escuelas en la creación de líneas de investigación en QO y en formación de discípulos, que nacen en Buenos Aires en la UBA y la UNLP, en la Universidad Nacional de Rosario (UNR), en la Universidad Nacional de Córdoba (UNC) y posteriormente en la UNR IV, en la Universidad Nacional del Sur en Bahía Blanca (UNS) y en la Universidad Nacional de San Luis (UNSL).

En 1879, Pedro Narciso Arata, quien dedicó sus estudios a la investigación en productos naturales de nuestro país, recibe el título de doctor en química de la UBA. Su aporte, en sus 42 años de trabajo, fue decisivo para el desarrollo de la química en Argentina y en especial de la investigación y enseñanza en la QO. Fue el autor de *Apuntes de Química*, publicado en 1893, que tuvo tres ediciones con un gran contenido en conceptos de QO, como isomería, estereoquímica, estructura molecular, experimentos de laboratorio, etc. Cronológicamente, el Dr. Luis Guglielmelli, quien recibió su título de doctor en Química en 1912, tuvo un rol preponderante en el desarrollo de la QO, quien a diferencia de Arata, se dedicó a la síntesis orgánica.

Posteriormente, aparecieron nuevos doctores en QO, grandes maestros, que fueron pilares importantes para el desarrollo de ese campo de

la ciencia, como es el caso de los Dres. Enrique Vicente Zappi (1914) y Venancio Deulofeu (tesis terminada en 1924 pero presentada en 1930). El Dr. Enrique V. Zappi realizó sus trabajos de investigación en la síntesis de un heterociclo conteniendo arsénico.

■ LA QUÍMICA ORGÁNICA EN BUENOS AIRES

Sin lugar a dudas, el Dr. Deulofeu fue un gran formador de formadores y cuyo trabajo de más de 60 años consolidó la QO no solo en Argentina y en especial en la UBA, sino también en Latinoamérica (4). En 1929, los trabajos desarrollados por Deulofeu y Sordelli permitieron producir la insulina en la Argentina. Luego de una estadía post-doctoral en Munich, bajo la dirección del profesor Heinrich Wieland, (premio Nobel de Química en 1927), Deulofeu regresó al país y realizó importantes contribuciones en el área de la química biológica, aunque mantenía su preferencia por la química QO, hasta que en 1939 fue nombrado Profesor Titular de QO en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la UBA (FCEN). Para ese entonces ya había comenzado a estudiar la química de las plantas argentinas y los componentes de venenos de serpientes y de sapos. Estos últimos estudios, permitieron realizar la primera publicación sobre venenos de sapos en la prestigiosa serie Zechmeister (*Progress in the Chemistry of Organic Natural Products*). Con más de 50 tesis dirigidas en una variedad de temas de QO, ha sido también el generador de distintos grupos y líneas de investigación, no solo en el Departamento de QO de la FCEFN, sino en otros centros de investigación del país. Su impronta no estuvo solo en el estudio de productos naturales, sino también en la química de hidratos de carbono, de los alcaloides y de los ácidos biliares.

Grandes discípulos surgieron durante esos años, como Pedro Cattaneo (1937), Andrés Stoppani (1945) y Jorge Brieux (1950).

El Dr. Pedro Cattaneo comenzó con las investigaciones en el estudio de la composición de alimentos, específicamente en la determinación de la composición de ácidos grasos de los aceites de semillas, frutos, bulbos y raíces comestibles de nuestro país. La importancia de los resultados en este campo lo acercó a la industria alimentaria, especialmente la industria aceitera y también a la implementación de normas y legislación alimentaria y nutrición. A lo largo de su extensa carrera como docente dirigió más de 100 tesis doctorales, muchas de ellas de becarios procedentes de países latinoamericanos.

Otros de los discípulos de Deulofeu, fue el Dr. Marcelo Vernengo, quien a su regreso de su estadía en la Universidad de Cambridge trabajando con Alexander Todd (premio Nobel en 1957), comenzó con la utilización de métodos espectroscópicos para dilucidar la estructura de moléculas orgánicas y, en particular, una técnica novedosa para la época que era la resonancia magnética nuclear (RMN).

Por otro lado, la Dra. Lederkremer, que había realizado su tesis doctoral con el Dr. Deferrari, colaborador del Dr. Deulofeu, tuvo que exiliarse en Brasil. A su regreso en 1965, se reincorporó al Departamento de QO y comenzó a formar un grupo de investigación trabajando en síntesis y reacciones químicas de azúcares y simultáneamente en el aislamiento y determinación de estructura de polisacáridos de hongos del sur del país. Sus investigaciones sentaron bases sólidas en la glicobiología y sus discípulos han consolidado grupos que desarro-

llan diversas líneas de investigación relacionadas con la química de los hidratos de carbono. Los distintos grupos del Departamento de QO de la FCEN de la UBA, que trabajan en temas relacionados con hidratos de carbono, integran hoy el Centro de Investigación en Hidratos de Carbono (CIHIDECAR).

El Dr. Alberto Cerezo, otro de los discípulos del Dr. Deulofeu, formó un grupo líder a nivel mundial especializado en polisacáridos, estudiando específicamente las algas del litoral marítimo argentino.

Continuando con el crecimiento de la QO y del semillero de discípulos del Dr. Deulofeu, están el Dr. Jorge F. Sproviero y la Dra. Inge Thiel. El Dr. Sproviero después de terminar su tesis comenzó su actividad en la empresa ALBA. Por su parte, la Dra. Thiel continuó con sus investigaciones en hidratos de carbono; luego, formando parte de CIHIDECAR. De este prestigioso centro también se formaron numerosos investigadores en otras facultades de la UBA, en la Universidad de la Patagonia SJB y en Brasil. De esta forma, se fue abriendo un abanico de nuevas líneas de investigación como la aplicación de la química al arte y a la conservación de nuestro patrimonio cultural.

Ya por el año 1965, se reincorporó el Dr. Eduardo Gros al Departamento de QO y fue pionero en estudios de biosíntesis de productos naturales y en el desarrollo de la química bioorgánica en nuestro país. Posteriormente, incursionó en temas de biocatálisis y en química medicinal cuando esta disciplina era aún inexistente en el país. A partir de esta escuela y con su ayuda se consolidaron los grupos de investigación en la FCFN-UBA, pero también grupos en otros puntos del país, principalmente en San Luis y Tucumán que siguen hasta la actualidad.

■ LA QUÍMICA ORGÁNICA EN BAHÍA BLANCA

La historia de la investigación científica en QO en Bahía Blanca se inició en el año 1959 en el Departamento de Química (DQ) de la Universidad Nacional del Sur (UNS). El comienzo de las investigaciones tuvo como precursor a un científico indio, el Dr. Aziz-Ur Rahman, y como protagonistas principales a la primera generación de tesis que se formaron bajo su dirección. (5)

En el año 1957 fue designado por concurso Director del Departamento de Química (DQ) el Dr. Alberto León Mario Lelong, Doctor con Diploma de Honor por la Universidad de Buenos Aires (UBA, 1942) y PhD por la Universidad de Washington (1952), Seattle, EEUU. El Dr. Lelong se abocó a la organización del DQ siguiendo los patrones de referencia de los países más avanzados. Con el objeto de impulsar la investigación en las distintas áreas del departamento, entre otras acciones abrió un llamado a concurso internacional para cubrir un cargo de Profesor Titular de QO. El concurso dio como resultado la incorporación al plantel docente del Departamento del Prof. Dr. Aziz-Ur Rahman a principios del año 1959.

El Profesor Rahman (1928-1973), nacido en India y posteriormente nacionalizado argentino, obtuvo el título de PhD por la Universidad de Aligarh (1954), India, y el de Doctor en Ciencias Naturales (1955) en el Instituto Max-Planck de Bioquímica de Tubinga, Alemania.

Cuando fue creado el DQ, la organización y el dictado de las asignaturas del área de QO estuvo a cargo del Dr. Miguel A. Medrano quien apoyó con entusiasmo la incorporación al plantel docente del Dr. Rahman. El tiempo demostró

que la llegada del Dr. Rahman fue el detonante que impulsó el desarrollo de la investigación no sólo en el DQ sino también en otros departamentos académicos de la UNS.

El Dr. Lelong entusiasmó a varios alumnos avanzados y ayudó al Dr. Rahman a armar el primer grupo de investigación en QO. Este grupo inicial constituido por Mercedes C. Cabaleiro, Héctor S. Gatica, y Alicia E. Gastaminza se reforzó con la llegada desde la India de dos profesionales, Mohamed Sami Kahn y Ausat Ali Kahn, que deseaban hacer su doctorado en la UNS. El grupo comenzó estudios que involucraron en un principio la obtención de bases de Schiff y de la posible relación entre el tipo e intensidad del color con la conjugación existente en dichas estructuras. Otro tema fue la síntesis de hidrocarburos aromáticos de núcleos condensados por reacciones de doble acilación. Fue de singular importancia el inicio de estudios de productos naturales en plantas autóctonas de la zona de Bahía Blanca. Ya dentro del nuevo milenio, la Asamblea de la UNS creó el Instituto de Química del Sur (INQUISUR) en el año 2007, y el 20 de marzo de 2009 el Directorio de CONICET lo estableció como Unidad Ejecutora de doble dependencia UNS-CO-NICET. El INIQO (primer instituto formado en Bahía Blanca) cesó institucionalmente y todo el personal de investigación equipamiento e instrumental analítico pasaron a integrar el Sector QO del INQUISUR.

■ LA QUÍMICA ORGÁNICA EN LA REGIÓN DE CUYO

En la provincia de San Luis, a comienzos del año 1947, se concreta sobre la base del Instituto del Profesorado, la creación de la Facultad de Ciencias de la Educación, dependiente de la Universidad Nacional de Cuyo. El 1 de febrero de 1949

se llama a concurso para cubrir un cargo de Profesor Titular para QO I, resultando primero en la terna el Dr. Antonio Tomás D'Arcangelo, quien, más tarde, se hace cargo de los cursos de QO II, hasta su jubilación. La primera Tesis de Doctorado en Química que dirigió fue la del Dr. Genaro Neme, trabajando en la fitoquímica del género *Larrea*. Luego se fueron incorporando a su grupo y completando su doctorado, los Doctores Oscar S. Giordano, Eduardo Guerreiro, Sohar Ruiz y Matías Nieto. El Profesor Juan Kavka se transformó en el referente del grupo en temas de espectroscopía. Además, se contaba con el invaluable apoyo de los Doctores Deulofeu y Gros, de la Facultad de Ciencias Exactas de la UBA.

Los discípulos del Dr. D'Arcangelo se fueron haciendo cargo con el tiempo de los variados proyectos centrados en la química y aplicaciones de los productos naturales de plantas, en particular de la Región de Cuyo. Así se fueron abriendo líneas como la de alcaloides en cactáceas; terpenos y flavonas en la familia Asteraceae y Labiatae y a finales de los 70 se comienza con las bases de cultivos "in vitro" y biotransformaciones. Paralelamente, los nuevos doctores que se generaban, a partir del grupo inicial, se fueron vinculando con otras áreas de la ciencia y se comenzaron trabajos interdisciplinarios con especialistas en Farmacología, Entomología e Histología; tanto locales como de otros centros universitarios. Las estancias pre y posdoctorales en laboratorios de excelencia en el exterior, dieron lugar a una mejor formación de los investigadores y esto permitió consolidar nuevas líneas de trabajo. La Universidad Nacional de San Luis fue creada el 10 de Mayo de 1973, desde entonces la modernización del equipamiento ha sido continua. Luego la creación del Instituto de In-

vestigaciones en Tecnología Química (INTEQUI-CONICET-UNSL) con la incorporación de varios de los docentes investigadores y becarios, afianzó la investigación y la búsqueda de una fuerte vinculación con el medio, en tareas de servicio y asesoramiento.

■ LA QUÍMICA ORGÁNICA EN CÓRDOBA

Mientras tanto en Córdoba se vivían tiempos intensos de reuniones entre docentes y estudiantes que acompañaron el inicio de la investigación química. En la Asamblea Universitaria del 28 de Abril de 1959 se aprobó la creación de la Facultad de Ciencias Químicas como un desprendimiento de la entonces Escuela de Farmacia y Bioquímica dependiente de la Facultad de Ciencias Médicas. En el mismo momento, el HCS resolvió crear el Instituto de Ciencias Químicas con dependencia del Rectorado hasta tanto se haga efectiva la organización de la Facultad, lo que se concretó en el año 1971. El Dr. Aníbal Sanguinetti trabajó arduamente en el fortalecimiento del Instituto y fue su director hasta 1964. Por ese entonces, el Instituto impartía los títulos de Bioquímica y de Farmacia y de Licenciado en Química. Dado que no se contaba con los Docentes necesarios para la enseñanza requerida por el título de Licenciado en Química se firmó un convenio con la Universidad de Buenos Aires, FCEFN, y los estudiantes, luego de terminar el segundo año en la UNC, debían cursar las materias del ciclo superior en la UBA. En el año 1962 se crea el primer departamento, el de Química Biológica con la dirección del Profesor Dr. Ranwel Caputto quien era Médico egresado de la UNC, y con gran experiencia en investigación adquirida en diversos prestigiosos laboratorios del país y del exterior. En esos tiempos era Director del

Departamento de Química Biológica en la Universidad de Oklahoma. El Dr. Caputto fue muy importante para el desarrollo de las Ciencias Químicas, y particularmente de la Química Biológica, en Córdoba. En los años siguientes se fueron incorporando investigadores argentinos que habían realizado su doctorado y volvían de su estancia pos doctoral en el exterior. Esto permitió fortalecer las diferentes áreas de investigación en Ciencias Químicas que trajo como consecuencia la creación de los departamentos de QO, Bioquímica Clínica, Farmacología, Físico Química y Farmacia. A mediados de la década del 60 en el departamento de QO, los Doctores Héctor Bertorello y Oscar Orio, comenzaron con las investigaciones en QO en Córdoba. El Dr. Bertorello, realizó su doctorado en la Universidad Nacional de La Plata bajo la dirección del Dr. Orfeo Orazi y luego, un pos doctorado con Beca de CONICET en Alemania bajo la Dirección del Premio Nobel de Química 1979 Prof. George Wittig comenzó con sus trabajos de investigación en mecanismos de reacción, en síntesis de compuestos organolíticos, y estudios de pirolisis de heterociclos. Más adelante su trabajo se orientó hacia la química de los polímeros. Por otra parte, el Dr. Orio, quien había trabajado en los laboratorios de Investigación de YPF, Florencio Varela, Buenos Aires, y realizado estudios pos doctorales en el *Istituto Superiore di Sanità*, Roma, Italia y en la Universidad Autónoma de México comenzó con los estudios en química organometálica y en catálisis heterogénea. El Dr. Hector Juliani, que fue el primer discípulo del Dr. Orio fue designado Profesor Adjunto del Departamento de Orgánica luego de finalizada su tesis doctoral dirigida por el Dr. Orio y comenzó con estudios en el área de los productos naturales. Los primeros discípulos de estos Profesores fueron consolidando las diferentes

líneas de investigación y dando una clara expansión al departamento. En la actualidad los investigadores de las distintas áreas de QO están agrupados en cuatro Institutos de Investigación de doble dependencia Conicet-UNC, IMBIV, INFIQC, ICYTAC e IPQA.

También en Córdoba, pero en el interior de la provincia, se crea en Mayo de 1971 la Universidad Nacional de Río Cuarto (UNRC) y en 1975 se crea el Departamento de Química y Física. Posteriormente, se comienza a trabajar en la organización de la carrera de Licenciatura en Química que permitió establecer las bases de lo que actualmente es el grupo de Físico-Química Orgánica y el mismo Departamento de Química y ya en el año 1976 se establece la Carrera de Doctorado en la Facultad de Ciencias Exactas. Esto permitió que se pudieran comenzar con la ejecución de trabajos de Tesis formalizados y el Dr. L. Sereno, aportando los conocimientos de Química Orgánica, consolidó el primer grupo de Electroquímica Orgánica del país. A partir del año 1982 el CONICET reconoció lo realizado

en el Departamento de Química y Física de la UNRC con la creación del Programa de Investigaciones Químicas Río Cuarto y actualmente, se encuentran consolidados 8 institutos de doble dependencia entre la UNRC y el CONICET.

■ LA QUÍMICA ORGÁNICA EN ROSARIO

En Rosario, el desarrollo de la QO y principalmente de la investigación en dicha área comenzó con la llegada del Dr. Edmundo Rúveda (6). En la UNR, el Departamento de QO de la Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas estaba a cargo del Dr. Héctor Badano, quien había organizado la enseñanza en QO para los estudiantes de Farmacia y Bioquímica. En el año 1980, se incorpora el Dr. Rúveda después de haber realizado una estancia de más de cinco años en el Instituto de Química de la Universidad Estadual de Campinas (UNICAMP), en Brasil, llegando a ocupar el cargo de Vice-director del instituto. En 1982, juntamente con el Dr. Manuel González Sierra y algunos estudiantes muy motivados, pusieron en marcha el

Instituto de Química Orgánica y de Síntesis (IQUIOS), como un Instituto de investigación dependiente de la UNR y el CONICET, ahora llamado IQIR.

Posteriormente, nuevas incorporaciones, como los Dres. Oreste Mascaretti y Luis Sala ampliaron la diversidad de los proyectos de investigación en síntesis de compuestos orgánicos.

Con la consolidación de los diferentes grupos de investigación en QO diseminados en diferentes puntos de nuestro país, en la década del 80, se crea la Sociedad Argentina de Investigaciones en QO (SAIQO) que se constituyó el 28 de noviembre de 1983, en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la UBA. Esto fue la idea de un grupo de importantes científicos de nuestro país que trabajaron activamente en la creación de esta Sociedad. Los objetivos trascendentes que se plantearon los miembros de la primera Comisión Provisoria, presidida por el Dr. Venancio Deulofeu, fueron tener una posición activa en el desarrollo y estímulo de la disciplina en Argentina.



Figura 1: XV Simposio Nacional de Química Orgánica. Mar del Plata, 6 al 8 de Noviembre de 2005.

En la actualidad la SAIQO reúne a más de 550 socios, en su mayoría docentes e investigadores de Universidades Nacionales y/o miembros de la Carrera de Investigador Científico de CONICET, becarios de entes de promoción científica y profesionales de la disciplina vinculados a la actividad industrial, en especial la industria farmacéutica. A partir del año 1999, se han incorporado investigadores de Venezuela, Chile y Uruguay que desarrollan actividades en sus respectivos países, fortaleciendo así los lazos con Latinoamérica. La presidencia de la SAIQO ha sido atendida con mucha dedicación por varios de los maestros de la QO nombrados precedentemente y que forjaron el desarrollo de la misma en sus diferentes centros de investi-

gación, provincias y universidades a las cuales pertenecían.

■ BIBLIOGRAFÍA

1) Daniel Coria, "La Química en Argentina: un esbozo de 200 años de historia". Invenio, vol. 19, núm. 37, noviembre, 2016, pp. 7-10. Universidad del Centro Educativo Latinoamericano. Rosario, Argentina

2) Lydia Galagovsky y col. "La Química en la Argentina", 1a ed. Asociación Química Argentina, 2011. 320 p. ISBN 978-987-99428-2-6

3) P. Kremer, G Mataran. "La constitución de la química como un saber diferenciado en Argentina". <https://www.unicen.edu.ar/con->

tent/la-constituci%C3%B3n-de-la-qu%C3%ADmica-como-un-saber-diferenciado-en-argentina

4) G. Burton, La Química Orgánica en Exactas, in "150 Años de Exactas", V.A. Ramos (Ed.). Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires and EU-DEBA, Buenos Aires, Argentina, pg. 143-165 (2016).

5) Basado en el artículo "La Química en Bahía Blanca", Alicia E. Gastaminza, Julio C. Podestá, en "La Química en Argentina" (Directora Lydia Galagovsky) 1ª Edición, Asociación Química Argentina, Buenos Aires, **2011**, Capítulo 13, p. 87-96. ISBN 978-987-99428-2-6.



Figura 2: XXI Simposio Nacional de Química Orgánica. Potrero de los Funes, San Luis, 8 al 11 de Noviembre de 2017.

6) Dr. Teodoro S. Kaufman, Dr. Manuel González Sierra y Dr. Edmundo A. Rúveda. "De IQUIOS a IQUIR. Los primeros treinta años de química en Rosario. Capítulo 14 del Libro "La Química en la Argentina". Página 97-102

■ AGRADECIMIENTOS

Agradecemos muy especialmente a los Profs. Rosa Erra-Balsells, Rita H. de Rossi, Julio Podestá, Juana Ches-

sa, Teodoro Kaufman, Rolando Spanevello, Carlos Tonn y Ma. Rosa Mazzieri por sus contribuciones a este artículo.

LA QUÍMICA DEL SIGLO XXI

Palabras clave: síntesis química - análisis químico - tecnologías emergentes.

Key words: chemical synthesis - chemical analysis - emergent technologies.

Desde sus inicios la Química se centró en el análisis de la materia que nos rodea y en el desarrollo de procedimientos de síntesis, ya sea de sustancias conocidas o de nuevas sustancias. Aunque también se desarrollaron armas de guerra, la síntesis de nuevas sustancias buscó principalmente obtener productos útiles para mejorar el bienestar de los seres humanos; sin embargo las sustancias sintetizadas en ciertos casos demostraron a la larga ser nocivas, y de allí se popularizó el (mal) uso del término "químico" para hacer alusión a sustancias muchas veces peligrosas. Sin embargo la habilidad de los químicos (término bien usado en este caso) para sintetizar moléculas y complejos ensamblajes moleculares sigue siendo la base del gran valor de la Química en el siglo XXI. Como ejemplo de eso, se discuten las diez tecnologías químicas que según la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC) se destacaron como emergentes en 2022. También discutimos la integración de la Química con otras ciencias en grandes paquetes (Ciencias Biomoleculares, de Materiales, y Ambientales)

■ Miguel A. Blesa

Escuela de Hábitat y Sostenibilidad, Universidad Nacional de San Martín

*E-mail: miblesa7@gmail.com

From the very beginning, Chemistry focused in the analysis of matter and in the synthesis of known and unknown substances. Leaving aside chemical warfare, in general the aim was to synthesize chemicals that were useful for mankind, although in some cases these chemicals showed later properties that made them dangerous. Chemist's skill to synthesize molecules and complex molecular arrays is still the basis of the importance of Chemistry in the XXI century. In this article we discuss the 10 top emerging chemical technologies identified by IUPAC in 2022 in order to illustrate this remarkable ability. We also discuss the integration of Chemistry with other sciences in great integrated packages (Biomolecular, Materials and Environmental Sciences).

■ EL NACIMIENTO DE LA QUÍMICA COMO DISCIPLINA CIENTÍFICA

Cada uno de nosotros, después de nacer y al ir creciendo, va reinventando el mundo, mundo que va desapareciendo después de que nosotros también nos vamos, para ser remplazado por otros mundos, los de los nuevos seres humanos. No debe extrañar entonces que las instituciones y todas las creaciones de los seres humanos vayan mutando permanentemente, en la medida en que están siendo albergadas por diferentes personas. Las disciplinas científicas, y entre ellas la Química, no escapa a esos cambios. La Química cambió –y mucho– a lo largo de su historia de más de tres siglos. .

Hagamos un poco –solo un poco– de historia antigua. Tratemos de establecer de qué forma fue sur-

giendo eso que ahora llamamos Química. Ubicar el nacimiento de una ciencia es sin duda un proceso de alta subjetividad. Las actividades que ahora vinculamos con las aplicaciones de la química se comenzaron a desarrollar en los albores de la humanidad: la cocción de alimentos, la metalurgia, la química medicinal son ejemplos de ello. Pero esas actividades no se reconocían como parte de algo llamado Química.

La Química toma el estatus de ciencia hacia fines del siglo XVIII muy especialmente con el advenimiento de la teoría atómico-molecular, y con los trabajos de Lavoisier de la conservación de la masa en las reacciones químicas y el establecimiento de un sistema de nomenclatura que puso orden en la descripción de las sustancias químicas conocidas. En la búsqueda de

entender cómo funciona el mundo material que nos rodea, cómo está compuesta la materia y cómo se transforma una forma material en otra, el *análisis* y la *síntesis* configuraron el corazón de la Química. Y esas actividades encontraron un corpus que las describía en la teoría atómico-molecular. Los químicos postularon que no había un único principio de conservación de la materia, sino tantos principios como elementos químicos – y la búsqueda de nuevos elementos fue en buena medida el santo grial de una etapa de la química que nació con la tabla periódica de Mendeléyev y otros. Hasta entrado el siglo XX los átomos no eran para muchos químicos entidades reales, sino un mero concepto que permitía ordenar el caos de la materia que nos rodea.

Hay un famoso librito de divulgación de Einstein e Infeld, *La física aventura del pensamiento*. Podría

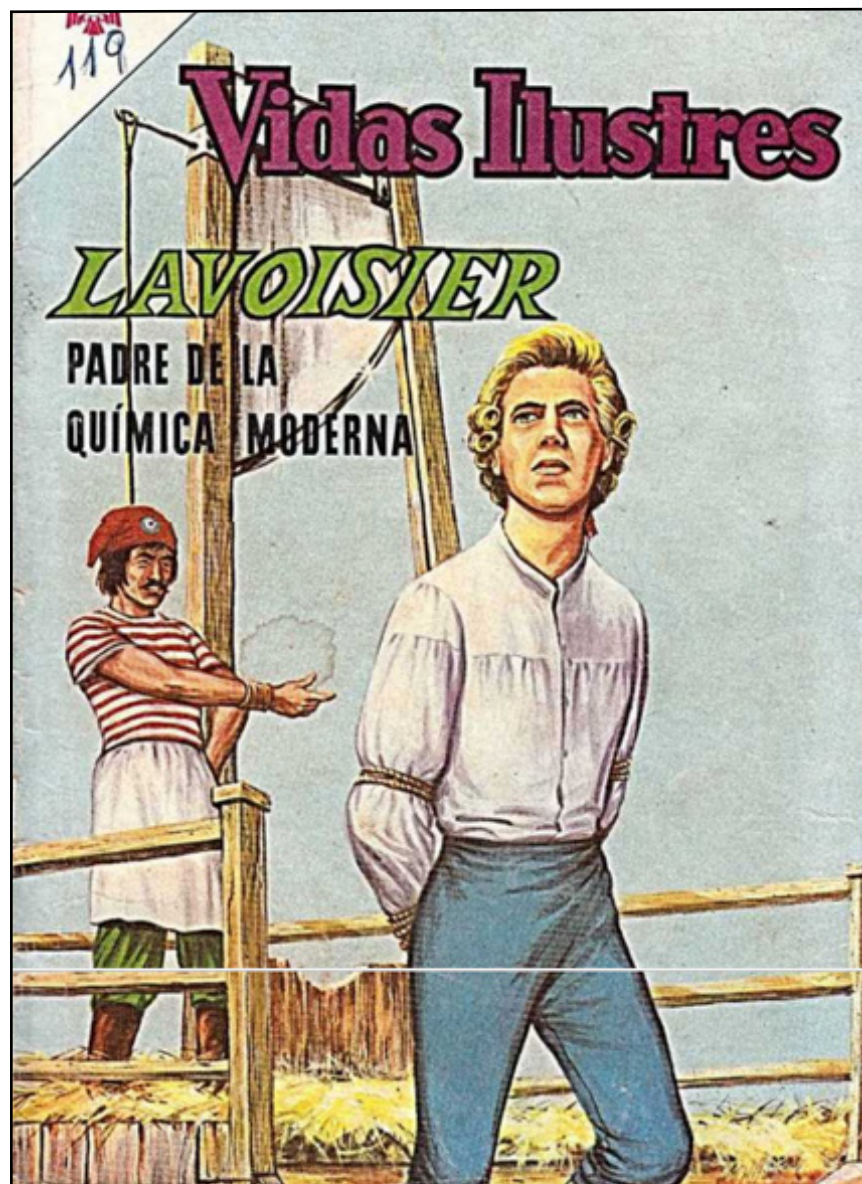
mentonar también el libro de Courant y Robbins *Qué es la matemática*, que también describe a esa ciencia

como una aventura del pensamiento; la magia y encanto de las matemáticas aparentemente también fue propuesta por Stephen Hawking.

La química siempre fue más pedestre, aunque no menos pretenciosa, como lo ilustra el título de algún libro de texto de Química General (ver Figura 3).

La química se desarrolló siempre atendiendo a las necesidades de las sociedades —de la producción industrial, de la farmacología, incluso del comercio y las finanzas. Como ciencia, átomos y moléculas eran su territorio, la tabla periódica su plan estratégico.

El volumen que fue tomando la Química causó la creación de subdivisiones. La primera fue la Química Mineral, la Química Inorgánica, que se arrogó el estudio de las combinaciones químicas de todos los



Una Cabeza Inmortal

ANTONIO Lorenzo Lavoisier, el ilustre científico francés llamado con justicia "padre de la química moderna", fue y sigue siendo un valioso ejemplo para todos aquellos que se deciden a seguir el difícil camino de la ciencia. Devoto de su profesión...

La Convención Revolucionaria dispuso que todos los recaudadores fueran arrestados, y la gloria de los grandes descubrimientos hechos por Lavoisier no bastaron para protegerlo. El 8 de mayo de 1794 fue condenado a muerte, y el sábado...

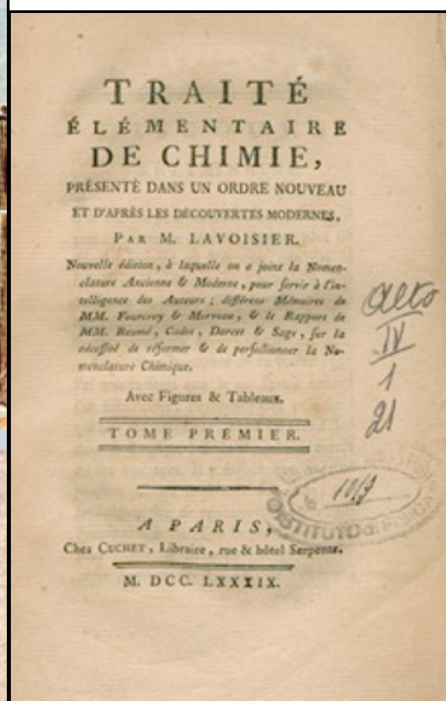


Figura 1: Antoine-Laurent de Lavoisier (1743-1798) fue un químico francés que escribió un célebre libro de texto *Traité élémentaire de Chimie*. Entre sus muchos logros sentó las bases de la nomenclatura química, del concepto de elemento químico y de la conservación de la materia en las transformaciones químicas. Como ilustra la figura, tomada y recortada de un opúsculo para jóvenes, murió guillotinado (por acusaciones vinculadas con su trabajo como recaudador de impuestos).

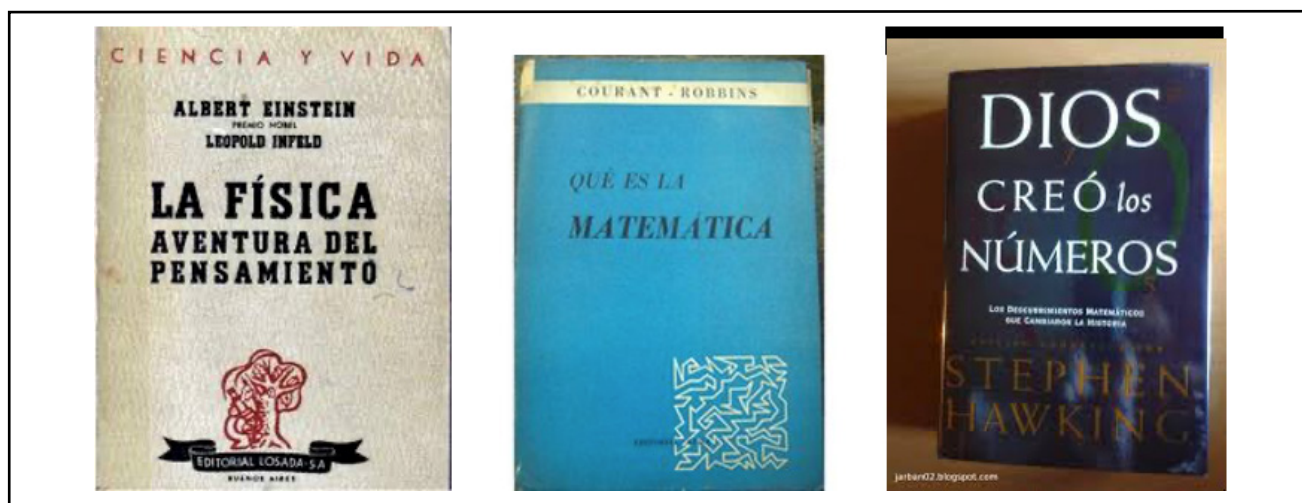


Figura 2: Portada de libros icónicos sobre la fascinación de las ciencias.

átomos de la tabla periódica. Pero... la química del carbono se mostró tan rica y tan variada, y además parecía entroncarse con los seres vivos, que pronto se transformó en otra rama, la Química Orgánica. Las Químicas Inorgánica y Orgánica se entregaron de lleno a la tarea de sintetizar sustancias, a veces nuevas, a veces ya existentes en la naturaleza, por medios eficientes. Y por supuesto, estaba también la omnipresente Química Analítica, la otra cara de la química de síntesis que exploraban la Inorgánica y la Orgánica.

La interacción de la radiación electromagnética con la materia fue el caballo de Troya con el que en los albores del siglo XX los físicos se metieron en el territorio, hasta entonces bastante cercado, de la química. Es cierto que Pasteur (1822-1895) había explorado el tema de la interacción con luz polarizada en sus estudios de las formas del tartrato de sodio y amonio; y que la emisión de luz había sido usada para caracterizar elementos químicos—el químico Robert Bunsen (1811-1899) y el físico Gustav Kirchhoff (1824-1887) descubrieron el cesio y el rubidio por el color de su emisión luminosa en

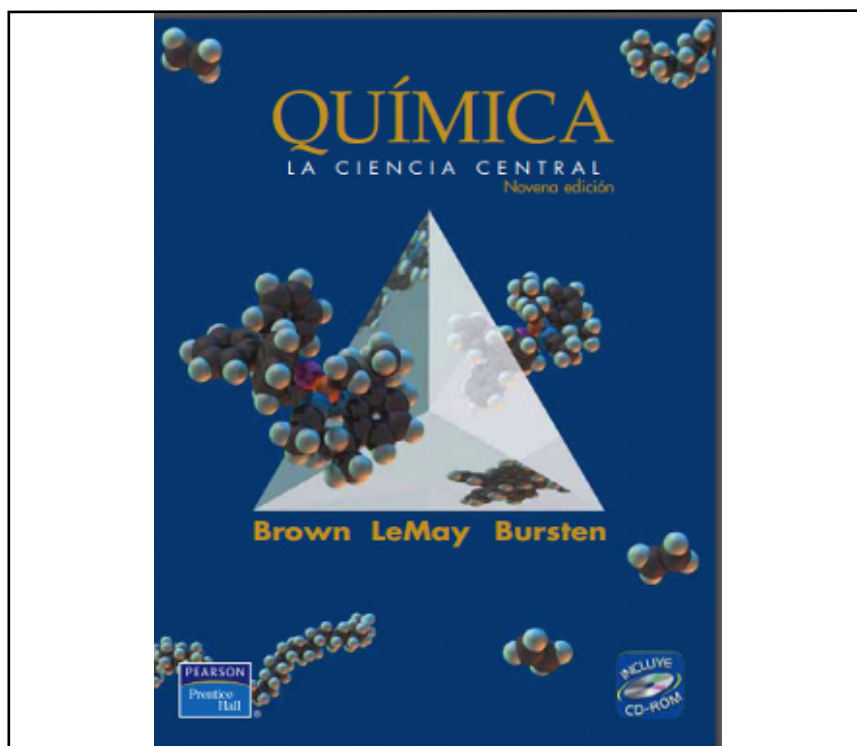


Figura 3: Portada del libro de Theodore L. Brown, H. Eugene LeMay Jr y Bruce E. Bursten, *Química La Ciencia Central*.

«No hay sabios que gustosamente no colocaran la ciencia de la que se ocupan en el centro de todas las ciencias, casi en la misma forma que los hombres primitivos se colocaban en el centro del mundo, persuadidos de que el universo había sido creado por ellos. Las profesiones de muchos de estos sabios, examinándose filosóficamente, encontrarían, posiblemente, incluso, además del amor propio, causas de peso suficiente para su justificación»

Discours préliminaire de l'Encyclopedie, París 1929, pág. 61

llama. Pero la gran explosión vino con el advenimiento de radiaciones de longitud de onda más corta que la luz, electromagnéticas como los rayos X o de partículas, como los electrones de alta energía.

Los átomos se transformaron en realidad, y la Física fue sentando las bases teóricas de la Química. Ello contribuyó al progreso de una interdisciplina, la Química Física o Fisicoquímica, que con el tiempo se fue transformando en la base fundamental de toda la Química. Por esos avatares del destino, Química Física y Química Inorgánica quedaron unidas inextricablemente; la Química Orgánica mantuvo cierta –no mucha– distancia. La clasificación en Fisicoquímica, Química Analítica, Química Inorgánica y Química Orgánica pierde vigencia aceleradamente en el siglo XXI.

■ ¿QUÉ HACEN LOS QUÍMICOS HASTA LOS COMIENZOS DEL SIGLO XXI?

Como decía Walter White, el químico protagonista de la serie *Breaking Bad*, “We have to cook” (ver Figura 4 y https://youtu.be/dNRELzU_Ibl), aunque por supuesto no lo que cocina White.

Sin duda nuestro territorio es el de transformar la materia que nos rodea para generar nuevas formas materiales de interés. La historia del desarrollo de la química está íntimamente ligada al desarrollo de nuevos métodos de síntesis de sustancias importantes. Centrándonos en la Química Inorgánica, la industria química pesada tuvo sus comienzos con los procesos Leblanc y Solvay, para sintetizar carbonato de sodio y con el método de las cámaras de plomo para sintetizar ácido sulfúrico. El proceso cloro álcali para sintetizar cloro e hidróxido de sodio y el proceso Haber-Bosch para sintetizar amoníaco son más recientes – este último se remonta a los comienzos

del siglo XX. La Química Orgánica de síntesis también se desarrolló aceleradamente a partir de la síntesis de colorantes –anilina– por William H. Perkin (1838-1907), hasta el desarrollo de la industria petroquímica en el siglo XX. Y continúa aun hoy con el desarrollo de nuevos procesos más eficientes, como la química click.¹

La síntesis de nuevas sustancias químicas alcanzó madurez durante el siglo XX, y trajo aparejada grandes éxitos para la química, que desarrolló sofisticados procedimientos para sintetizar todo tipo de moléculas.

Algunas de esas moléculas son las que generaron una imagen negativa de la química –las dioxinas, los bifenilos policlorados, etc., por no mencionar las sustancias desarrolladas para la guerra química Y para peor ahora para la prensa esas sustancias son ¡los químicos!² El autor de estas líneas es (o lo era) un químico (mala palabra) que se dedicó a la energía nuclear (peor aún), que para expiar sus culpas se



Figura 4: Walter White en *Breaking Bad*. Lo que “cocina” Walter White es clorhidrato de metanfetamina (conocida en la jerga en inglés como *crystal meth*)

reconvirtió en químico ambiental (lo que no es ninguna garantía). En mi defensa, puedo recordar que la química no es más que una herramienta que usan los seres humanos para sintetizar productos cuyo uso puede o no ser beneficioso para la humanidad. Es más, a medida que avanzamos en

nuestros conocimientos muchas veces sintetizamos *sustancias maravillosas* en ese momento que pueden ser luego *los malos de la película*. Tal es el caso, entre muchos otros, del DDT, que permitió la erradicación del paludismo y de las mangas de langosta en la Argentina hacia 1950, y que ahora

está incluido en *la docena sucia*, los compuestos prohibidos o regulados por el Convenio de Estocolmo de 1972 porque no son biodegradables, se acumulan en la cadena trófica y tienen mucho impacto negativo sobre la salud de personas y seres vivos en general.

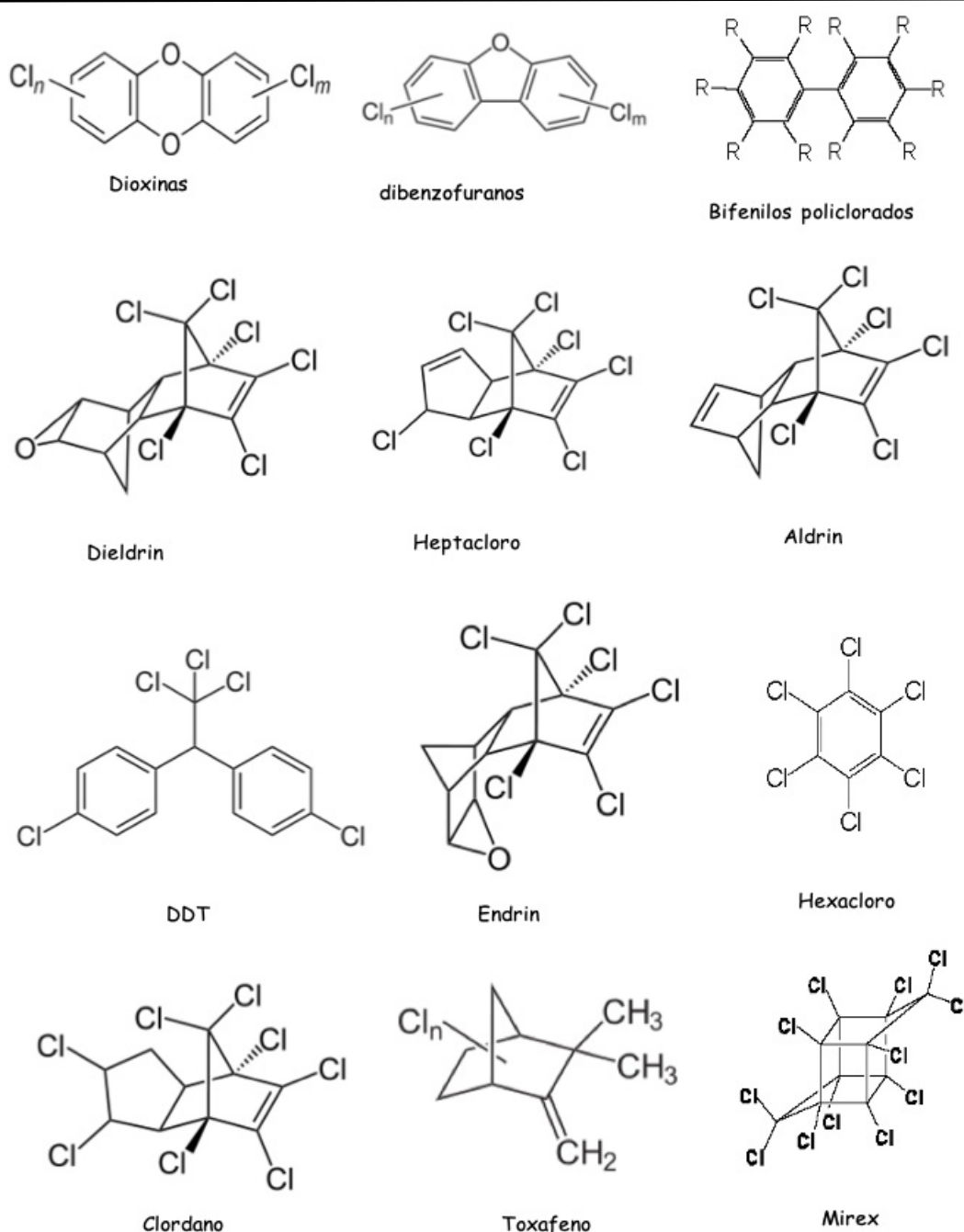


Figura 5: La docena sucia. En la actualidad los anexos del Convenio de Estocolmo incluyen más de 20 compuestos.

Pero también se sintetizó moléculas maravillosas, como el sildenafil (Figura 6), o encontró sustitutos a sustancias que se tornaron peligrosas, como los freones que afectaban la capa de ozono estratosférico. En definitiva los químicos pueden ser más bien parte de la solución que del problema.

En la actualidad la síntesis de nuevas moléculas es una actividad que está lejos de ser *una aventura del pensamiento*. Suele ser más bien un gran emprendimiento en el que los recursos financieros y la estructura empresarial juegan un papel crucial. Desarrollar un nuevo fármaco comienza típicamente en la computadora, con el uso de *Big-Data*, ensayos de preselección de alto rendimiento en el laboratorio, y luego enfrenta las etapas más complicadas y onerosas, que solo empresas poderosas pueden encarar. Complejidades similares se presentan si se busca desarrollar por ejemplo una batería de sodio (ver más abajo).

■ ¿QUÉ SINTETIZARÁN LOS QUÍMICOS EN EL FUTURO?

La nueva síntesis química no descansa únicamente en el concepto de molécula. Solo en los gases ideales hay moléculas aisladas. Los átomos que forman parte de la molécula están fuertemente ligados entre sí, por enlaces químicos; dos moléculas vecinas interactúan poco y nada en un gas ideal. En cambio en la materia condensada no hay moléculas aisladas; hay interacciones de todo tipo, como uniones químicas, uniones de hidrógeno, fuerzas de van der Waals, etc. todas ellas centrales en la determinación de la arquitectura de la materia y sus propiedades.

Y ahora sí estamos en la química del siglo XXI. Se sintetizan materiales complejos formados por interacción de sustancias más simples, con estructuras extendidas y una

arquitectura también compleja. Por ejemplo, se sintetizan nanomateriales autoensamblados, en los que los diversos componentes del material se van organizando guiados por las fuerzas atractivas y repulsivas entre los componentes. Los electrodos de las baterías de litio, las membranas de las celdas de combustible, son

ejemplo de materiales complejos sintetizados actualmente.

¿Para qué sirven las habilidades de los químicos en el siglo XXI? IUPAC propuso en 2022 cuales eran las 10 principales tecnologías emergentes en Química. Se las muestra en la Figura 8.

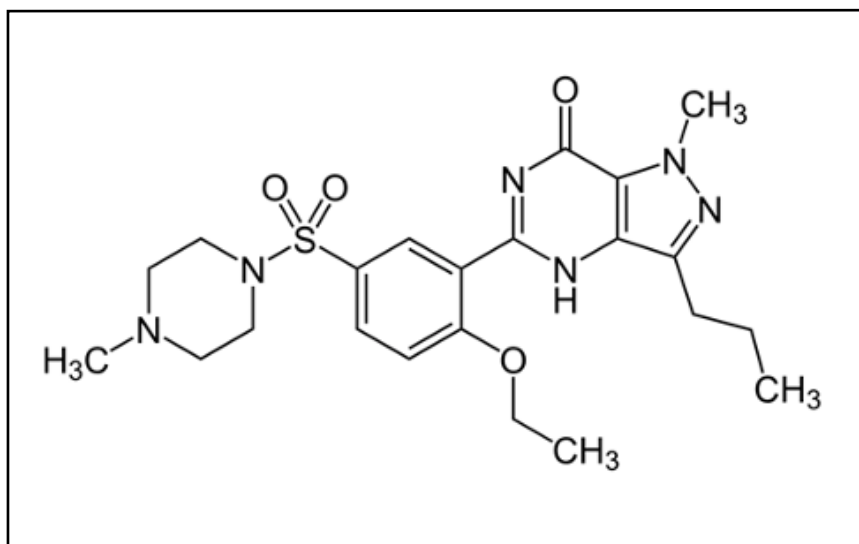


Figura 6: Sildenafil. Las personas interesadas pueden buscar los usos del sildenafil.

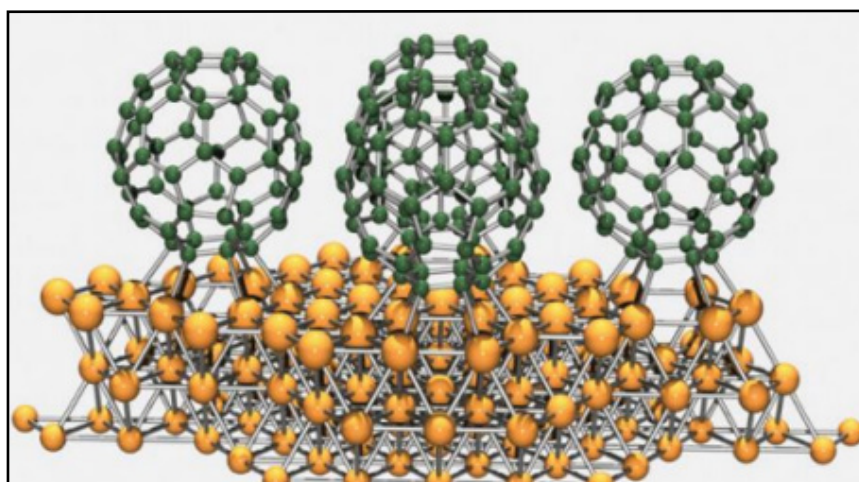


Figura 7: Pelotas de fullereno (C_{60}) unidos a la superficie 111 de oro. Tomado de Torrelles, X., Pedio, M., Cepek, C. y Felici, R. (2012). $(2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}) R30^\circ$ induced selfassembly ordering by C_{60} on a $Au(111)$ surface: X-ray diffraction structure analysis. *Physical Review B*, 86(7), (2012), 075461.

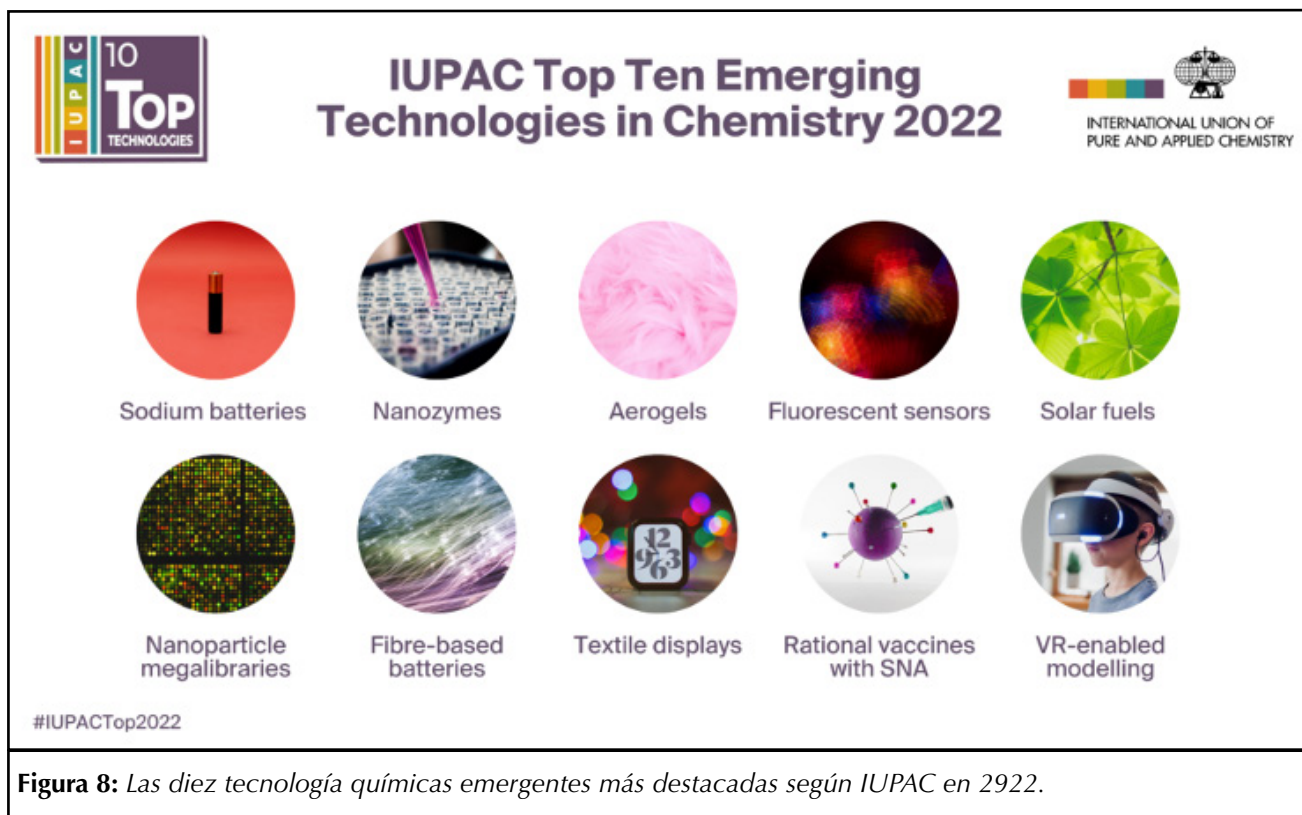


Figura 8: Las diez tecnología químicas emergentes más destacadas según IUPAC en 2022.

Esta lista deja afuera muchas áreas de alta relevancia que hacen los químicos en la actualidad, pero bien puede servir para ilustrar los desafíos actuales de la Química.

En general, ninguna de estas tecnologías está madura, y es necesario todavía desarrollarlas para que puedan alcanzar una etapa competitiva. Seguramente no todas serán realmente exitosas, pero sus potencialidades son tan importantes que valen la pena los esfuerzos por elaborarlás. La lista incluye:

Baterías de sodio: El desarrollo de nuevas baterías capaces de almacenar la energía solar o la eólica es constante. Las baterías de ion sodio funcionan con los mismos principios fundamentales que las baterías de ion litio. El cátodo contiene sodio intercalado en una matriz inorgánica, y su pasaje al electrolito permite la generación de la corriente eléctrica.

El sodio es mucho más abundante y fácil de obtener que el litio, así que si se desarrollan adecuadamente, estas baterías podrán desplazar a las de ion litio. Las baterías de ion sodio tienen otras ventajas adicionales; por ejemplo menor riesgo de inflamabilidad. Además, el cátodo de las de ion litio se basa en óxidos de cobalto (LiCoO_2 o compuestos similares en los que el cobalto está parcialmente sustituido por manganeso y níquel) y la provisión de cobalto es tan crítica como la de litio.³ Sin embargo, las baterías de ion litio tienen alta estabilidad (*shelf life*) alta densidad de carga, y soportan muchos ciclos de carga y descarga, lo que hasta ahora no se ha conseguido con las de sodio.

Nanozimas: Conceptualmente son nanopartículas que pueden presentar propiedades enzimáticas, aunque muchas veces se incluye en el grupo a nanopartículas que no funcionan

realmente como enzimas. Las nanopartículas pueden ser muy diversas, basadas en metales, del tipo de arquitectura metal-orgánica (MOFs, por *metal organic frameworks*) o de sustancias no metálicas. En su uso como catalizadores que reemplazan a las enzimas es muy difícil alcanzar la especificidad y los números de recambio (*turnover number*) de las enzimas naturales; sin embargo, pueden tener una serie de ventajas: las enzimas naturales pierden actividad fácilmente por cambios de temperatura, pH u otras condiciones y son difíciles de almacenar y por contraposición las nanozimas pueden almacenarse por tiempos prolongados y pueden operar en un amplio rango de pH y temperatura. Sus posibles usos son muy extensos y van más allá de la catálisis de reacciones específicas: pueden ser antioxidantes, antibacterias, biosensores, agentes terapéuticos, etc.

Aerogeles: son dispersiones coloidales de aire en una matriz sólida, con la peculiaridad de que más del 99% de la masa del material es aire. La fase sólida puede ser muy variada: óxidos metálicos, polímeros orgánicos, carbono, etc. Son extremadamente livianos (su densidad puede ser sólo tres veces mayor que la del aire) y muy buenos aislantes térmicos. No debe sorprender entonces que se hayan desarrollado originalmente para la industria aero-espacial y más tarde como aislantes térmicos en múltiples aplicaciones. Sin embargo, los materiales prometen mucho más: su porosidad, su alta superficie específica y la posibilidad de dotar a la superficie de propiedades químicas específicas (derivatizándola), los hace excelentes materiales para su uso en descontaminación de aire y de agua, en el desarrollo de sensores específicos y catalizadores. Incluso la NASA considera su uso para la construcción de invernaderos en Marte. Su biocompatibilidad ofrece también promesa en aplicaciones biomédicas, como biosensores, o para liberación controlada de drogas. Como es el caso de las otras tecnologías, todavía hay problemas de estabilidad y de costes.

Sensores de fluorescencia: En su versión más simple, un sensor de fluorescencia está formado por partículas (incluso nanopartículas) que contiene moléculas fluorescentes, cuya fluorescencia es alterada por la interacción con las moléculas de la sustancia que se desea analizar. Es una técnica analítica muy sensible y específica. En la actualidad, se desarrollan sensores de fluorescencia en forma de películas, en cuya superficie se adsorbe la(s) sustancia(s) fluorescente(s). Son sensores de pequeño tamaño y su versatilidad los hace ideales para análisis ambiental, como marcadores biológicos y en otras aplicaciones. Por ejemplo, se visualiza una red de monitoreo

ambiental interconectada en tiempo real a través de la Internet de las cosas (IoT).

Combustibles solares: Se puede almacenar la energía solar sintetizando combustibles a partir de la misma. La fotosíntesis es el ejemplo de la naturaleza que guía muchos intentos: las plantas con clorofila sintetizan biomasa (combustible) usando la luz solar. Hay intentos de lograr la fotosíntesis artificial, pero también se buscan métodos eficientes para la fotólisis directa de sustancias que generen combustibles. Los combustibles solares más típicos son el hidrógeno, el amoníaco y compuestos orgánicos obtenidos por reducción solar de dióxido de carbono. Se busca intensamente la fotólisis del agua para generar hidrógeno (además de oxígeno). También es posible concentrar la luz solar para alcanzar altas temperaturas y llevar a cabo reacciones químicas que producen combustibles. Más indirectamente, se pueden obtener combustible solar por vía electroquímica, alimentando una celda electroquímica con electricidad proveniente de paneles solares.

Megabibliotecas de nanopartículas: Es una nueva herramienta para la búsqueda de nuevos materiales, que va más allá de los ya clásicos ensayos de preselección (*screening*). Es una técnica litográfica que permite depositar millones de nanopartículas de composición y tamaño variable sobre un sustrato. Esas nanopartículas son después usadas como nanoreactores, por ejemplo en reacciones catalíticas. Se puede identificar muy eficientemente cuáles son la composición, la estructura y el tamaño más adecuados para una determinada reacción química.

Baterías basadas en fibras: A diferencia de las baterías tradicionales, estas baterías se construyen con ca-

bles metálicos entrelazados como electrodos, y con un electrolito adecuado, todo sellado con un material adecuado. Son prácticamente unidimensionales y se pueden construir de varios metros de largo. Estas baterías pueden incorporarse a textiles, ya que son lavables y por lo tanto útiles para sensado de funciones corporales. También pueden usarse para fabricar artefactos electrónicos altamente flexibles.

Visores textiles: Los visores LED (*displays*) textiles tradicionales son visores rígidos insertados en textiles. Ahora comenzaron a desarrollarse visores flexibles basados en fibras de LED, ya sea orgánicos o poliméricos, incorporados con naturalidad en el tejido. Se están realizando muchos esfuerzos por optimizar estos últimos. De lograrse, se producirá una verdadera revolución en la transmisión de información.

Vacunas racionales con ácidos nucleicos esféricos (SNA): Los SNA son nanopartículas de oro u otro material recubiertas con cadenas de ácidos nucleicos. En esa arquitectura se puede controlar las posiciones de las moléculas de adyuvante y de antígeno, optimizando la respuesta inmune, no solo frente a agentes patógenos sino también en terapias oncológicas.

Modelado aumentado por realidad virtual (VR): En una sala de realidad virtual, el químico interactúa con las moléculas, cambiando con sus manos las posiciones de los átomos, reemplazando grupos funcionales, etc. y la computadora va calculando en tiempo real las propiedades de las moléculas que se van creando. Es un procedimiento que perfecciona las herramientas que brindan la dinámica molecular y la química computacional.

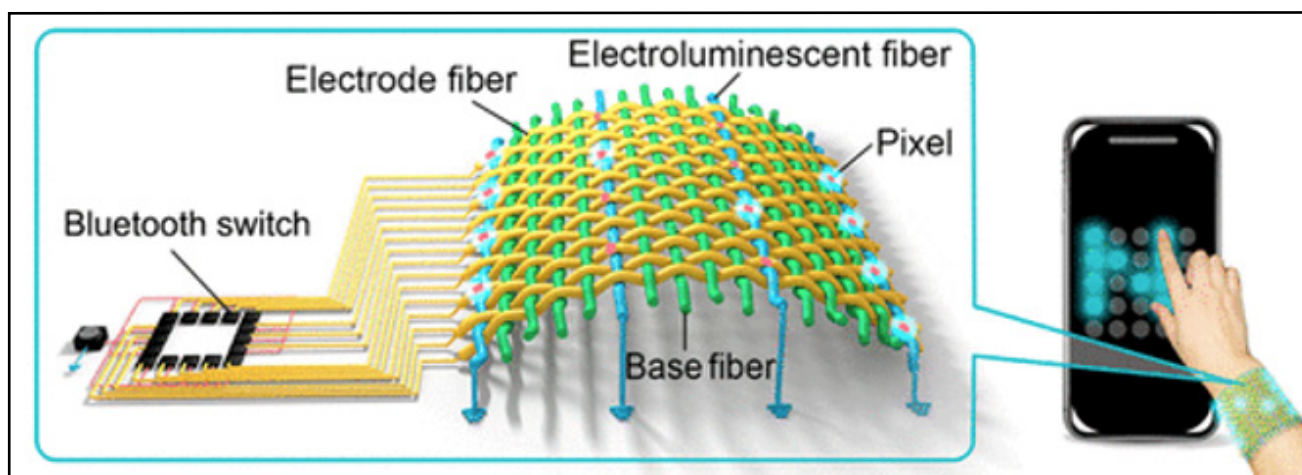


Figura 9: Un visor textil. Tomado de Mi y col. 2021.

Todas estas tecnologías buscan novedosos métodos o productos de síntesis química para diversas aplicaciones, incluyendo nuevos sensores específicos para el análisis de la materia. De nuevo, síntesis y análisis resumen la tarea de los químicos del siglo XXI. Y lo que se fabrica son complejos artefactos compuestos de moléculas y estructuras extendidas, en las que operan enlaces químicos, fuerzas de adsorción, y todo tipo de interacciones fuertes y débiles.

La gran revolución tecnológica que estamos presenciando en la actualidad, como parte del llamado Cambio Global (Climático y Social) lleva a organizar a la investigación científica alrededor de grandes desafíos o preguntas, para enfrentar los cuales se requieren habitualmente más de una disciplina científica. Ejemplos de grandes desafíos actuales son la Transición Energética, el Cambio Climático, la Inteligencia Artificial, el Sistema Tierra,⁴ el funcionamiento del cerebro y el del sistema inmunológico, etc.

La Química como ciencia está llamada a jugar un papel central en este panorama. Pero la Química “desnuda”, centrada en sí misma,

está perdiendo protagonismo rápidamente.

Se avizora claramente el surgimiento de grandes paquetes científicos en los cuales la Química es central, pero integrada con otras disciplinas: Las Ciencias de los Materiales; las Ciencias Biomoleculares; las Ciencias Ambientales. Si bien esta clasificación no está libre de ambigüedades,⁵ representa claramente las tendencias actuales. Podemos pensar que la química de hecho está ingresando de manera penetrante en otras disciplinas, y en las nacientes formas de hacer ciencia y tecnología. La formación universitaria parece estar evolucionando en la misma dirección, y es urgente repensar qué ofertas deben diseñarse para atraer a las vocaciones químicas.

■ AGRADECIMIENTOS

Por muchas discusiones e intercambios de ideas, a Sara A. Bilmes y a Galo Soler Illia.

■ BIBLIOGRAFÍA

Ai Y., Hu Z-N., Liang X., Sun H., Xin H., y Liang Q. (2021) *Recent Advances in Nanozymes* :

From Matters to Bioapplications. Advanced Functional Materials. Diciembre 2021. <https://doi.org/10.1002/adfm.202110432>

Blesa M.A. (2020) *La industria química y la contaminación: HISTORIA DEL AZUFRE Y DEL ÁCIDO SULFÚRICO*. Industria y Química 2020, número 370, págs. 25-32.

Blesa, M.A. *La industria química pesada y la contaminación: Evolución de la producción de soda Solvay*. En Sección Grandes Temas Ambientales, AAPC. <https://aargentinapciencias.org/grandes-temas-ambientales/la-industria-quimica-pesada-y-la-contaminacion-evolucion-de-la-produccion-de-soda-solvay/>

Choi HW, Shin DW, Yang J, Lee G, Figueiredo S, Sinopoli S, Ullrich K, Jovančić P, Marrani A. (2022) Smart textile lighting/display system with multifunctional fibre devices for large scale smart home and IoT applications. *Nature communications*, 13, 814, <https://doi.org/10.1038/s41467-022-28459-6>.

Gomollón-Bel, F. (2022) IUPAC Top Ten Emerging Technologies in Chemistry 2022. *Chemistry International*, vol. 44, no. 4, pp. 4-13. <https://doi.org/10.1515/ci2022-0402>.

Hanbing M., Leni Z., Xiaoxiao T., Pengtao X., Xingyi L., Tianzhi L. y Xingyu J. (2021). Electroluminescent Fabric Woven by Ulstretchable Fibers for Arbitrarily Controllable Pattern Display, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 13, 9, 11260– 11267.

Kluender E.J., Hedrick J.L., Brown K.A. y Mirkin C.A. (2018). *Catalyst discovery through megalleries of nanomaterials*. *PNAS* **116** (1), 40-45.

Shuya W., Shuya W., Lei Q., Gokay Y. y C.A. Mirkin (2019). Rational vaccinology with spherical nucleic acids. *PNAS* **116** (21) 10473-10481.

Young-Ho S. y col. (2021) J. *Electrochem. Soc.* **168** (1) 017502

■ NOTAS

1. La química click es un concepto que busca guiar la forma de encontrar maneras más eficientes para sintetizar moléculas complejas. Usualmente se basa en la idea de ensamblar unidades pequeñas, fragmentos de la molécula buscada. La química click se inspira en buena medida en la idea de imitar a la naturaleza.

2. En inglés, quien practica la Química es un chemist, y las sustancias químicas son chemicals; últimamente se puso de moda la desafortunada práctica de traducir ambas palabras como químico(s).

3. Se calcula que habrá un fuerte incremento en la demanda de cobalto en los próximos años. En la actualidad cerca del 70% del cobalto es extraído en la República Democrática de Congo.

4. La Ciencia del Sistema Tierra comprende a la química, la física, la biología, las matemáticas y las ciencias aplicadas trascendiendo los confines disciplinares para tratar a la Tierra como un sistema integrado y busca una comprensión más profunda de las interacciones físicas, químicas, biológicas y humanas que determinan los estados pasado, presente y futuro de la Tierra. La Ciencia del Sistema Tierra provee las bases físicas para comprender el mundo en el que vivimos y sobre el cual la humanidad busca alcanzar sustentabilidad (tomado de <https://serc.carleton.edu/introgeo/earthsystem/nutshell/index.html>, traducción libre propia)

5. Muchos de los ejemplos dados en las diez tecnologías emergentes de 2022 de IUPAC tienen simultáneamente aspectos de nanotecnología, de ciencias biomoleculares y/o de aplicaciones ambientales.

QUÍMICA ANALÍTICA HOY: lejos del empirismo, y hacia un equilibrio entre ecoeficiencia, funcionalidad y rendimiento

Palabras clave: métodos analíticos - cuidado del ambiente.

Key words: *analytical methods -environmental preservation .*

En el presente artículo se discuten algunos aspectos actuales de la química analítica. Por un lado, se resalta la necesidad de otorgar a la disciplina un enfoque teórico, que complemente las mediciones instrumentales de laboratorio o campo. En particular, las aproximaciones teóricas están dirigidas a la comprensión detallada de los procesos de detección y al tratamiento matemático de la ingente información provista por los instrumentos modernos. Por el otro, se destaca la tendencia creciente a desarrollar protocolos analíticos amigables con el ambiente, siguiendo los principios de la química analítica verde. Estos últimos, sin embargo, deben balancearse con otras cuestiones relevantes, relacionadas con la funcionalidad y aplicabilidad de los métodos.



Alejandro C. Olivieri

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario, Instituto de Química Rosario (IQUIR-CONICET), Suipacha 531, Rosario (2000), Argentina

E-mail: olivieri@iquir-conicet.gov.ar

In this article, some current aspects of analytical chemistry are discussed. On one hand, focus is directed to the need of providing the discipline with a theoretical approach, complementing laboratory of field instrumental measurements. In particular, the theoretical approaches are aimed at the detailed understanding of detection processes and the mathematical treatment of the enormous amount of information furnished by modern instruments. On the other, there is a growing trend to develop environmentally friendly analytical protocols, following the principles of green analytical chemistry. The latter, however, must be balanced with other relevant issues, related to the functionality and applicability of the methods.

La química analítica ha sido definida de diferentes maneras, algunas contradictorias entre sí o no totalmente consistentes, otras mostrando una cierta crisis de identidad de la disciplina, originadas en su intersección con actividades de la química física, la estadística y la ciencia de la computación, entre otras. Un poco en broma, el químico analítico norteamericano Charles Norwood Reilley (1925-1981), reconocido profesor e investigador de la Universidad de Carolina del Norte, decía que “la química analítica es lo que hacen los químicos analíticos”. Resulta interesante resaltar que Reilley

imprimió a sus investigaciones analíticas una impronta radicalmente diferente de la desarrollada en décadas anteriores por sus colegas. En opinión de muchos investigadores, hacia mediados del siglo pasado la importancia de la disciplina se había debilitado debido al carácter eminentemente empírico de las investigaciones. Reilly promovió un menor uso del empirismo, buscando y exigiendo una comprensión más básica de los procesos de medición y detección. En la actualidad, esta misma tendencia se reconoce en las investigaciones modernas en química analítica, en las que el avance en

los desarrollos experimentales debe siempre complementarse con profundos conocimientos teóricos.

Por otro lado, se ha tomado conciencia de la necesidad de impulsar la sostenibilidad ambiental de los procesos analíticos, en consonancia con la búsqueda de una mayor ecoeficiencia de todos los procesos químicos. En este sentido, es importante revisar en qué se basan las metodologías analíticas, cuál es su potencial impacto ambiental, y en qué aspectos aquellas pueden modificarse para cumplir con la responsabilidad social del cuidado

del ambiente. En principio, cuestiones relevantes a considerar serían el uso y descarte de sustancias tóxicas, aunque también es importante tener en cuenta el consumo energético, el tiempo que lleva el análisis y la seguridad en las operaciones analíticas.

A continuación, se describirán en forma sencilla las características principales de los métodos analíticos, con énfasis en los aspectos relacionados con su ecoeficiencia.

■ MÉTODOS ANALÍTICOS

En términos generales, el análisis químico clásico es un proceso que involucra dos etapas bien definidas. En una primera fase, se calibra un modelo matemático que relaciona las señales instrumentales con las concentraciones de un analito puro en un conjunto de estándares, estimando la pendiente y ordenada al origen de una recta de regresión. A continuación, se cuantifica el analito en muestras desconocidas, interpolando su señal en la recta de calibrado. Este enfoque clásico o univariado requiere que el analito sea la única fuente productora de la señal.

Existen herramientas instrumentales altamente selectivas que no demandan intervenciones adicionales para eliminar o enmascarar el efecto de los interferentes, como las espectroscopías atómicas o las mediciones mediante electrodos selectivos basados en plataformas de reconocimiento. Aun en estos casos, sin embargo, el análisis de muestras complejas de origen industrial, biológico, biomédico, alimentario, etc., involucra procesos de pre-tratamiento muestral, cuyo objeto es "limpiar" la muestra de componentes que podrían perjudicar el análisis. Estas etapas previas al análisis propiamente dicho pueden requerir

del uso y descarte de reactivos auxiliares, e incrementar los tiempos operativos, reduciendo la eficiencia de los protocolos al disminuir el número de muestras que pueden procesarse por unidad de tiempo.

Por otra parte, las técnicas espectroscópicas moleculares (absorción UV-visible o infrarroja, fluorescencia, etc.), no son, en general, suficientemente selectivas, y precisan una etapa previa de tratamiento de la muestra. El objetivo que se persigue en esta fase es que solo el analito produzca una señal medible, ya sea: (1) eliminando todas las interferencias antes del análisis (extracción, enmascaramiento, destilación), (2) haciendo reaccionar al analito en forma específica para que solo su producto genere señal, (3) separando físicamente el analito de los interferentes. En este caso, la simplicidad que ofrece el análisis clásico mediante la recta de calibrado se ve opacada por el uso de reactivos auxiliares potencialmente tóxicos, el incremento en los tiempos de análisis y un mayor consumo energético, es decir, aspectos que atentan contra la ecoeficiencia de los protocolos.

Un enfoque radicalmente diferente consiste en acoplar las medidas espectroscópicas, que son solo parcialmente selectivas, con la calibración multivariada. De este modo, se puede suplir la falta de selectividad de las técnicas instrumentales con el aporte de la quimiometría, introduciendo una selectividad de origen matemático que permite, en muchos casos, la determinación simultánea de varios analitos de interés en muestras complejas, sin tratamiento muestral previo o separación física de los interferentes. La calibración multivariada fue introducida en la década de 1960 para el análisis no invasivo de propiedades de semillas mediante espectros en el infrarrojo cercano, debido princi-

palmente a la notable labor del Ingeniero Agrónomo norteamericano Karl Howard Norris (1921-2019), cuando desarrollaba sus tareas en el Departamento de Agricultura de los Estados Unidos. En el transcurso de las siguientes décadas, la disciplina ha sido objeto de incontables progresos, tanto teóricos como experimentales, hasta llegar a un desarrollo maduro, que se demuestra en la actualidad por la amplitud de las aplicaciones analíticas en las que participa, y su éxito en el análisis de muestras de gran complejidad. Evitar etapas de pre-procesamiento de las muestras, analizar varios analitos en forma simultánea, y emplear medidas ópticas que son menos invasivas y fácilmente automatizables conlleva un notable enriquecimiento de los métodos analíticos de cara al objetivo de proteger el ambiente.

En el caso de las técnicas separativas como la cromatografía o la electroforesis capilar, debido a su poder de resolución, el analito llega a un dispositivo de detección habiendo sido separado de los restantes componentes de la muestra, de modo que aquel es la única fuente de señal. En principio, no sería preciso incorporar actividades adicionales para incrementar la selectividad. No obstante, las herramientas quimiométricas están siendo aplicadas también a la cromatografía. ¿Qué podría aportar la calibración multivariada a una técnica analítica intrínsecamente muy selectiva? La respuesta es que, si se modifican los protocolos cromatográficos de modo que ya no se requiera resolución a línea de base, o se eliminan los pre-tratamientos muestrales dirigidos a evitar la presencia de señales de fondo, la quimiometría puede realizar un aporte significativo. Sin embargo, ¿por qué un analista querría implementar un análisis anticromatográfico, forzando a los componentes de la muestra a coeluir, o

permitiendo que una señal de fondo aparezca en el detector, superpuesta con la del analito? Respuesta: para desarrollar métodos cromatográficos más simples (por ejemplo, empleando el modo isocrático), más rápidos y, tal vez lo más importante, más ecoeficientes. En este último sentido, un menor uso y descarte de solventes orgánicos tóxicos, un menor tiempo de análisis y un menor consumo energético son altamente deseables en el contexto de la sostenibilidad de la química analítica.

■ LA QUÍMICA ANALÍTICA VERDE

La primera mención a una nueva manera de encarar las actividades químicas, incorporando el respeto por el ambiente, data de 1978¹. La química verde o sostenible, derivada de aquellas consideraciones, pretende diseñar procesos químicos que reduzcan o eliminen productos nocivos para las personas o para el ambiente. Sus bases se pueden resumir en 12 principios, aplicables a todas las ramas de la química. De un modo más específico, centrado en la disciplina de la química analítica, se ha ido desarrollando desde hace más de 20 años el concepto de Química Analítica Verde (GAC, por *green analytical chemistry*). Consta también de 12 principios, adaptados de los enunciados para la química verde, y presentados en la literatura por Agnieszka Gałuszka (Universidad Jan Kochanowski, Kielce, Polonia) y colaboradores² (Figura 1). Se listan a continuación los detalles de estos principios.

1. Aplicar técnicas analíticas directas para evitar el tratamiento de la muestra.
2. Reducir el tamaño y el número de muestras.
3. Realizar mediciones *in situ*.

4. Integrar los procesos y operaciones analíticas para ahorrar energía y reducir el uso de reactivos.
5. Seleccionar métodos automatizados y miniaturizados.
6. Evitar la derivatización.
7. Evitar la generación de un gran volumen de residuos y garantizar su adecuada gestión.
8. Seleccionar métodos para multi-analitos frente a los que determinan un analito a la vez.
9. Minimizar el consumo de energía.
10. Emplear reactivos obtenidos de fuentes renovables.

11. Eliminar o reemplazar reactivos tóxicos.
12. Aumentar la seguridad del operador.

Junto con las definiciones anteriores, se desarrollaron varios esquemas numéricos para cuantificar el “verdor” de un determinado método analítico. Uno de los más recientes lleva la divertida sigla AGREE (por Analytical GREENness), y emplea un algoritmo simple que expresa el verdor de modo cuantitativo en una escala que va de 0 a 1, produciendo al mismo tiempo un pictograma que refiere directamente a las 12 reglas de la GAC³. La Figura 2 presenta un ejemplo típico de un pictograma AGREE. En este caso particular, los ítems corresponden a la determinación de un principio activo en un fármaco comercial mediante cromatografía.



Figura 1: Agnieszka Gałuszka (Universidad Jan Kochanowski, Kielce, Polonia). Imagen recuperada de <https://kielce.tvp.pl/57343673/debiut-w-naukowej-elicie-prof-agnieszka-galuszka-czlonkiem-pan>. Visitada el 6 de mayo de 2023.

tografía en capa delgada de alto rendimiento (HPTLC)⁴. Es evidente que el proceso menos favorable es el indicado con el número 7, correspondiente a la generación de residuos, aun cuando los autores realizaron un esfuerzo importante para reducir la toxicidad de la fase móvil, empleando mezclas de baja toxicidad, como etanol y agua.

Merece destacarse que la editorial Elsevier cuenta, desde 2021, con la revista especializada *Green Analytical Chemistry* (Figura 3). Su objetivo, tomado de la página oficial [sciencedirect.com/journal/green-analytical-chemistry](https://www.sciencedirect.com/journal/green-analytical-chemistry), es la publicación de trabajos que apunten a: (1) minimizar o eliminar el uso de sustancias tóxicas o la generación de desechos, (2) emplear métodos de análisis cualitativos simples o de respuesta binaria (sí / no), (3) diseñar protocolos que eviten el procesamiento de grandes cantidades de muestras, como las que se requieren para el estudio cuantitativo completo en grandes laboratorios, y (4) reemplazar metodologías complejas de laboratorio por otras que permitan análisis *in situ* o *in vivo*.

■ EQUILIBRIO CON ASPECTOS ANALÍTICOS NO-VERDES

Desde el punto de vista de la conciencia social, es evidente que los químicos analíticos deben respetar los principios de la GAC. Sin embargo, un análisis intuitivo muestra que dichos principios deben cumplirse siempre y cuando no colisionen con objetivos puramente analíticos, entre los que podrían mencionarse la exactitud y el límite de detección. En otras palabras, de poco valdría desarrollar un método ecoeficiente, si no es capaz de detectar vestigios de analitos (ejemplos: micronutrientes en alimentos, contaminantes ambientales, humedad en productos liofilizados, etc.), es decir, si su ca-

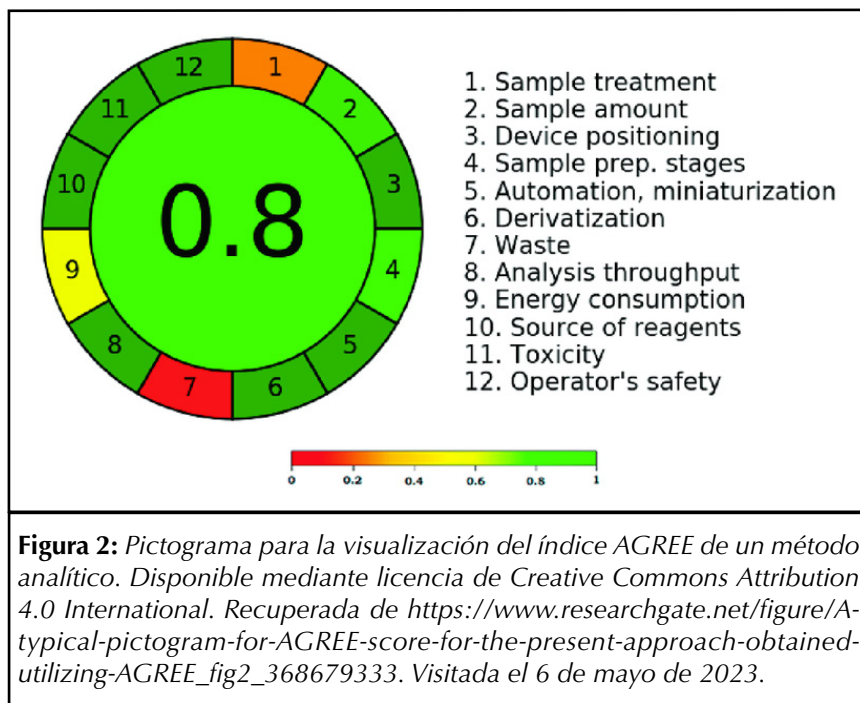


Figura 2: Pictograma para la visualización del índice AGREE de un método analítico. Disponible mediante licencia de Creative Commons Attribution 4.0 International. Recuperada de https://www.researchgate.net/figure/Atypical-pictogram-for-AGREE-score-for-the-present-approach-obtained-utilizing-AGREE_fig2_368679333. Visitada el 6 de mayo de 2023.

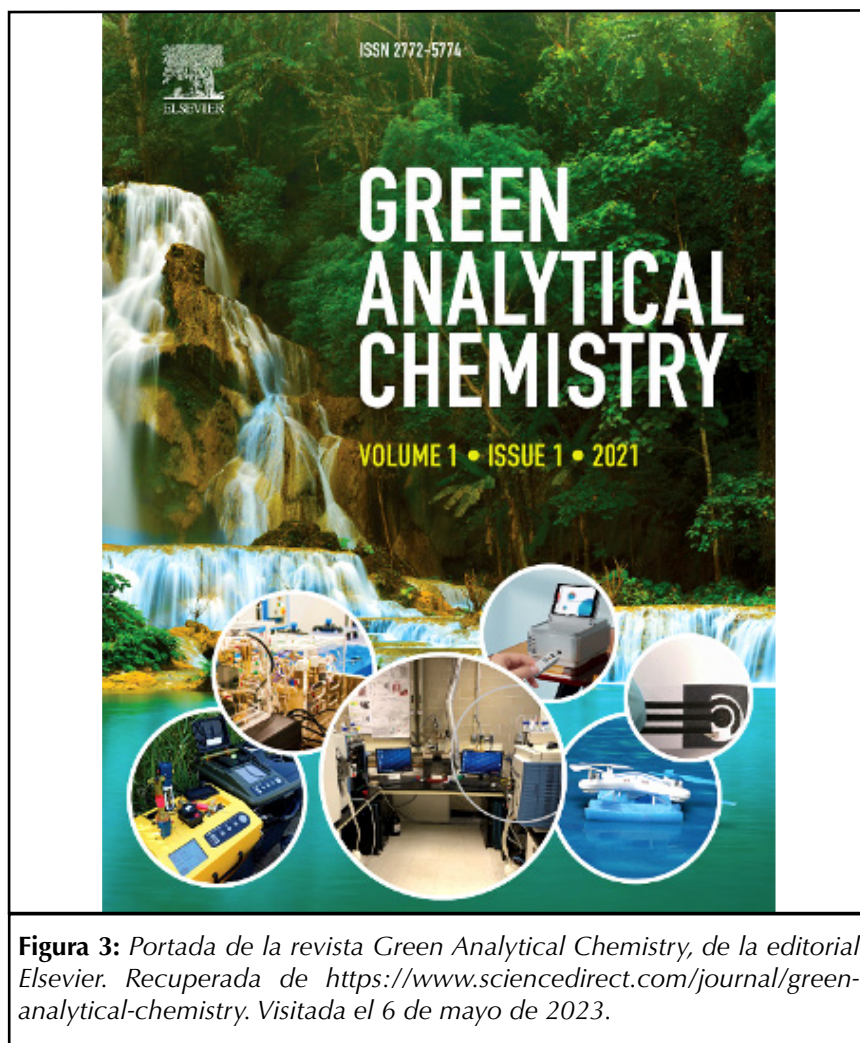


Figura 3: Portada de la revista *Green Analytical Chemistry*, de la editorial Elsevier. Recuperada de <https://www.sciencedirect.com/journal/green-analytical-chemistry>. Visitada el 6 de mayo de 2023.

pacidad de detección no es adecuada para el propósito buscado.

Resulta notable que recién en 2021 se haya implementado un esquema numérico extendido, poniendo en perspectiva los principios verdes con otros aspectos complementarios de importancia, considerados “no-verdes”. Fue presentado por Paweł Mateusz Nowak y Renata Wietecha-Postuszny, ambos de la Universidad Jagielloniana, Cracovia, Polonia, y Janusz Pawliszyn (Universidad de Waterloo, Ontario, Canadá)⁵ (Figura 4). Este último autor recibió la Medalla Talanta en 2019 por sus numerosas contribuciones y por su trabajo pionero en microextracción en fase sólida, y en el mismo año fue considerado entre las diez personas más influyentes en química analítica en todo el mundo.

Para mantener los principios extendidos en el número tradicional de 12, los autores redujeron en primer lugar los principios de la GAC

expuestos anteriormente a cuatro:

G1. Toxicidad de los reactivos: menor toxicidad de los reactivos utilizados y proporción máxima de reactivos y materiales biodegradables o renovables.

G2. Número y cantidad de reactivos y residuos: menor consumo de reactivos y producción de residuos (independientemente de lo tóxicos que sean).

G3. Energía: menor consumo de electricidad u otros servicios, prefiriendo métodos *in situ*, automatizados y de alto rendimiento para ahorrar energía.

G4. Impactos directos: evitar la exposición de los seres humanos a factores nocivos y el uso de animales y/o modificaciones genéticas.

A continuación, definieron dos juegos adicionales de cuatro princi-

pios: los “rojos” y los “azules”, que caracterizan respectivamente la eficiencia analítica y los aspectos prácticos y económicos. Con estos ocho principios adicionales, propusieron un esquema numérico para calificar los métodos analíticos, basado en estos nuevos 12 principios. Dado que la escala contiene proporciones de rojo, verde y azul (la escala RGB por *red*, *green* and *blue*), el resultado final se califica en términos de su blancura. Un método blanco presentaría un buen balance entre los tres aspectos complementarios de eficiencia analítica, sostenibilidad ambiental y funcionalidad práctica.

Específicamente, los cuatro principios rojos que califican la eficiencia del análisis, serían los siguientes:

R1. Ámbito de aplicación: el rango de aplicabilidad analítica debe ser lo más amplio posible, expresado en número de analitos determinados simultáneamente, rango de linealidad, compatibilidad con



Figura 4: Imagen de Janusz Pawliszyn (Universidad de Waterloo, Ontario, Canadá), uno de los químicos analíticos más influyentes en la actualidad. Recuperada de <https://uwaterloo.ca/chemistry/news/janusz-pawliszyn-takes-home-2019-talanta-medal>. Visitada el 6 de mayo de 2023.

- diversos tipos de muestras y resistencia a la presencia de interferencias potenciales.
- R2. Capacidad de detección: deben buscarse los menores límites de detección y cuantificación posibles.
- R3. Precisión: debe perseguirse la mejor precisión posible, expresada en la repetibilidad y reproducibilidad de los resultados.
- R4. Exactitud: deben buscarse errores relativos mínimos y recuperaciones lo más cercanas posible al 100%.
- Finalmente, formularon los cuatro principios azules, relativos a la funcionalidad de los protocolos, como sigue:
- B1. Relación costo-eficiencia: debe buscarse la mejor relación posible (el costo total del análisis debe tener en cuenta los instrumentos, los materiales, los medios y el personal).
- B2. Eficiencia de tiempo: debe ser máxima, insumiendo el menor tiempo total de análisis, incluido el desarrollo del método y todas las etapas del flujo de trabajo analítico.
- B3. Requisitos prácticos: deben ser mínimos, incluyendo la cantidad de muestra utilizada, el acceso a equipos avanzados, la calificación del personal y la infraestructura de laboratorio.
- B4. Simplicidad operativa: debe buscarse el nivel más alto posible de miniaturización, integración, automatización (en línea) y portabilidad (*in situ*).
- Para evaluar la blancura de un determinado método analítico, los autores desarrollaron el algoritmo RGB12, asignando valores en una escala de 0 a 100% a cada ítem rojo, verde y azul, y promediando luego dichos valores. Pueden consultarse los detalles específicos de cómo se asignan los porcentajes en la referencia original [5], en la que se ilustran varios casos a modo de ejemplo. La Figura 5 muestra tres posibles resultados: uno insatisfactorio (izquierda), uno apropiado (centro) y un tercero con características intermedias (derecha).

■ APORTES DE LA QUIMIOMETRÍA A LA WAC

Las contribuciones del uso de modelos quimiométricos a la WAC se cuentan, en principio, dentro de las regiones verde y azul de la escala

RGB. Al construir modelos de calibración con espectros, como los de infrarrojo cercano (NIR) o Raman, no hay necesidad de separar los analitos de las interferencias, y las mediciones se pueden llevar a cabo sin disolver o moler la muestra. Puede simplemente apuntarse un espectrómetro NIR portátil del tamaño de un teléfono inteligente a una muestra para proporcionar resultados analíticos útiles en cuestión de segundos. Ejemplos que hoy son rutinarios en muchos laboratorios industriales pueden parecer capítulos de un libro de ciencia ficción: los contenidos de grasa, proteína, humedad y almidón se pueden medir en semillas oleaginosas intactas, simultáneamente, en forma casi instantánea y sin el uso de solventes orgánicos o reactivos auxiliares. Más allá de la determinación de analitos individuales, con estas herramientas pueden evaluarse, sin intervención humana alguna, propiedades globales de muestras de composición compleja, como las características organolépticas de alimentos (vino, café, cerveza, carne, aceite de oliva), el octanaje, densidad y temperatura de destilación de combustibles, y las propiedades físicas de materiales de interés industrial (madera, textiles)⁶.

Las cámaras hiper-espectrales han introducido una nueva dimen-

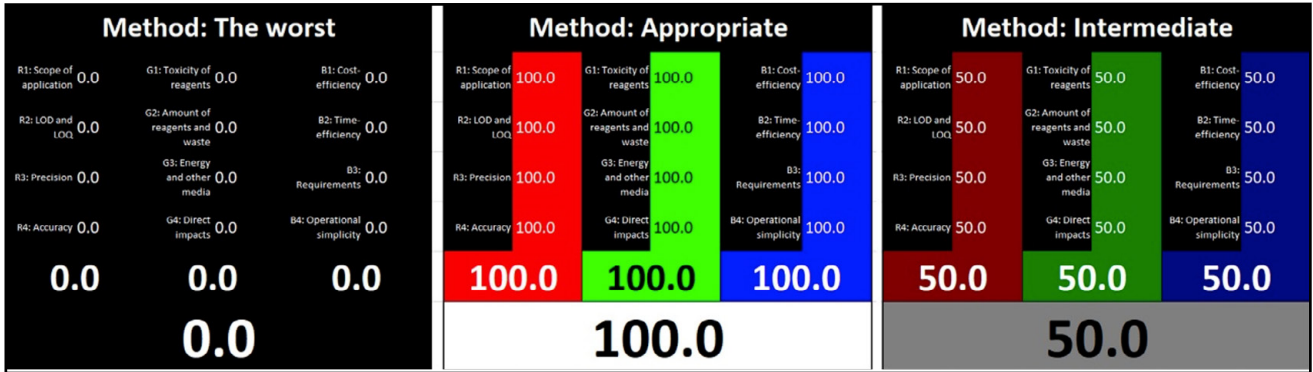


Figura 5: Visualización de los resultados de evaluación de tres métodos según el algoritmo RGB12. Reproducida con permiso de la ref. [5], Elsevier, 2021.

sión en este escenario: la espacial. En la actualidad es posible medir un espectro en cada píxel de la superficie de un dado material, y organizar los datos en una tabla con estructura espectro-espacial. El procesamiento quimiométrico de estos datos permite, entre otras cosas, monitorear la distribución espacial de especies químicas sobre la superficie. Las aplicaciones de estas técnicas incluyen el estudio de la homogeneidad de productos farmacéuticos en tabletas sólidas o pellets, la distribución de clorofila y otros componentes vegetales en campos de cultivo, etc., todos realizados en forma remota, no invasiva y automática. El enfoque no se limita al procesamiento digital de espectros. Otras señales instrumentales están entrando lentamente en la escena analítica, ya sea óptica (fluorescencia, descomposición inducida por láser, resonancia magnética nuclear) o eléctrica (conjuntos de sensores, espectroscopía de impedancia, voltamperometría).

A pesar de sus grandes ventajas, la calibración multivariada no es necesariamente la panacea analítica. La sensibilidad espectral infrarroja es bastante baja, por lo que detectar vestigios de analitos no es una tarea fácil, y las señales de algunos analitos son difícilmente medibles (por ejemplo, elementos metálicos). Estas consideraciones implican que muchos desarrollos multivariados pueden no presentar características positivas en los aspectos rojos de la WAC, especialmente en cuanto a la detectabilidad de los analitos. Respecto de los componentes macroscópicos, sin embargo, estos inconvenientes están ausentes, lo que explica la creciente incorporación de métodos ópticos combinados con quimiometría en muchos laboratorios industriales de control, tanto de los procesos operativos como de la calidad final de los productos.

Un paso más hacia la mejora de las operaciones analíticas, también aportado por la quimiometría, consiste en medir tablas de datos para cada muestra en lugar de vectores espectrales. Esta información puede registrarse convenientemente mediante cromatógrafos con detección espectral o espectrofluorómetros capaces de medir matrices de excitación-emisión de luminiscencia. Se los llama "datos de segundo orden" en atención a las dos direcciones o modos de una matriz o tabla de datos, y alternativamente "datos de tres vías o de tres modos", cuando el foco se dirige al objeto tridimensional que puede construirse con las matrices de un conjunto de muestras. Solo como ejemplo, mediante la medición de datos de segundo orden es posible cuantificar analitos en muestras complejas a partir de unos pocos estándares de analito puro, evitando la preparación de un gran número de muestras de calibrado. El modelo separará matemáticamente la contribución del analito de las de las interferencias, permitiendo su cuantificación, una propiedad conocida como la "ventaja de segundo orden"⁷. La popularización de la versión analítica multi-modo implicaría ventajas adicionales en la búsqueda de la ecoeficiencia. Disminuirían en forma significativa el número de muestras necesarias para la construcción de los modelos de calibración, la cantidad de reactivos requeridos para implementar las técnicas de referencia durante la etapa de calibrado, el tiempo de los análisis, el consumo de energía y el costo final. En otras palabras, constituiría un paso más hacia el aumento de la blancura pregonado por la WAC.

En principio, puede aumentarse indefinidamente el número de modos de los datos instrumentales, aunque se han descrito pocos desarrollos que procesan información de orden superior a dos (o de más de

tres modos). Los estudios analíticos multi-modo de mayor orden están todavía en su infancia respecto de posibles ventajas analíticas. Desde la perspectiva teórica, se continúa con las investigaciones destinadas a esclarecer los aspectos conflictivos de los diversos modelos matemáticos que se emplean para el procesamiento de estos datos complejos. En este y otros campos de la investigación en química analítica, se ha impuesto la consigna generalizada respecto de la necesidad de una comprensión profunda de los procesos de detección, así como de las características y propiedades de la información que se mide con los instrumentos modernos. Es común discutir si el tipo de datos multidimensionales que genera un dado instrumento se considera bilineal o trilineal, características cruciales a la hora de seleccionar el modelo que los representa y el algoritmo más adecuado para su procesamiento. Solo en calidad de ejemplos, hoy se aplican modelos matemáticos y criterios estadísticos para calcular en forma rigurosa los límites de detección, se recurre a las ecuaciones que explican el comportamiento electroquímico de los sistemas para desarrollar métodos de cuantificación, y se proponen determinaciones analíticas absolutas que no necesitan calibración a partir de ecuaciones de la óptica. La visión clásica de la química analítica como una disciplina puramente empírica pertenece definitivamente al pasado.

■ CONCLUSIONES

En las últimas décadas, la química analítica ha sido testigo de avances extraordinarios en el terreno de la instrumentación, que han producido logros impresionantes, como el análisis de materiales de composición compleja de manera remota, no invasiva y automatizada. Los límites de detección se han reducido drás-

ticamente, al punto que con ciertas técnicas hoy es posible detectar moléculas y aun átomos individuales. Junto con esta evolución hacia metodologías instrumentales cada vez más potentes, se ha profundizado la necesidad de desarrollar modelos teóricos para la comprensión detallada de los fenómenos involucrados en el proceso de detección, complementando las actividades puramente empíricas, tal como lo pregonara Charles Reilley hace más de medio siglo. Al mismo tiempo, se exige a la química analítica una mayor ecoeficiencia en sus protocolos, encontrando un balance adecuado entre el respeto por el ambiente, las propiedades analíticas clásicas y la practicidad operativa.

■ REFERENCIAS

1. T.A. Kletz, What you don't have, can't leak, *Chem. Ind.* (1978) 287-292.
2. A. Gałuszka, Z. Migaszewski, J. Namiesnik, The 12 principles of green analytical chemistry and the SIGNIFICANCE mnemonic of green analytical practices, *Trends Anal. Chem.* 50 (2013) 78-84.
3. F. Pena-Pereira, W. Wojnowski, M. Tobiszewski, AGREE-analytical GREENness metric approach and software, *Anal. Chem.* 92 (2020) 10076-10082.
4. M.H. Alqarni, F. Shakeel, A.I. Foudah, T.M. Aljarba, W.A. Mahdi, F.M. Abdel Bar, S. Alshehri, P. Alam, A validated, stability-indicating, eco-friendly HPTLC method for the determination of cinnarizine, *Separations* 10 (2023) 138.
5. P.M. Nowak, R. Wietecha-Posłuszny, J. Pawliszyn, White Analytical Chemistry: An approach to reconcile the principles of Green Analytical Chemistry and functionality, *Trends Anal. Chem.* 138 (2021) 116223.
6. C. Pasquini, Near infrared spectroscopy: A mature analytical technique with new perspectives – A review, *Anal. Chim. Acta* 1026 (2018) 8-36.
7. A.C. Olivieri, G.M. Escandar, Practical three-way calibration, Elsevier, Waltham, EEUU, 2014.

INSTRUCCIONES PARA LOS AUTORES

Revista CIENCIA E INVESTIGACION

Ciencia e Investigación, órgano de difusión de la Asociación Argentina para el Progreso de las Ciencias (AAPC), es una revista de divulgación científica y tecnológica destinada al mundo académico, a educadores, estudiantes universitarios, profesionales y público educado en general. La temática abarcada por sus artículos es amplia y va desde el tratamiento accesible de temas de investigación básica y tecnológica, hasta comentarios analíticos y/o bibliográficos, sin restricción de ciencias o tecnologías. En principio, se excluyen artículos de investigación puntual y originales, que son objeto de revistas especializadas. Desde el año 2009 la revista tiene difusión en versión on line (www.aargentinapciencias.org)

Las contribuciones centrales de temas básicos y tecnológicos son habitualmente solicitadas por los Editores y, en la mayoría de los casos, agrupadas en números temáticos coordinados por los Editores o Editores invitados. Los miembros de la AAPC, y eventualmente otros del ambiente académico, pueden sugerir temas de interés general o someter un artículo de especial relevancia para eventual publicación en un número temático. También se puede proponer a los Editores o a cualquiera de los miembros del Comité Editorial, la evaluación para su eventual publicación de notas cortas (hasta 2500 palabras) de especial interés, debiendo ser de actualidad y/o interés amplio como: entrevistas, historia de las ciencias, crónicas de actualidad, biografías, obituarios y comentarios bibliográficos. La propuesta se deberá acompañar con una nota (conteniendo correo electrónico y teléfono) explicando su importancia. Se considerarán también eventuales Cartas al Editor y/o al Autor, referidas a artículos publicados (aspectos técnicos o teorías). Todos los artículos y notas serán arbitrados y una vez aprobados para su publicación, la versión eventualmente corregida (con posibles sugerencias de los árbitros) deberá ser nuevamente enviada por los autores. Las páginas deben numerarse (arriba a la derecha) en forma corrida, incluyendo el texto, glosario, bibliografía o referencias y las leyendas de las figuras y tablas.

PRESENTACIÓN DEL MANUSCRITO

El artículo se presentará vía correo electrónico a (cienciaeinvestigacion@aargentinapciencias.org), como documento adjunto, escrito con procesador de texto word (extensión «doc») en castellano o inglés, en hoja tamaño A4, a doble espacio, con márgenes de por lo menos 2,5 cm en cada lado, letra Time New Roman tamaño 12.

La primera página deberá contener:

- (a) Título del trabajo (Puede haber un título general seguido de sub-título)
- (b) Nombre y apellido de los autores, indicando pertenencia institucional con índices. (Ejemplo: Juan N.Pandolfi^{1,2}).
- (c) Institución(es) a la(s) que pertenecen y lugar(es) de trabajo, con los respectivos números
- (d) Correo electrónico del autor correspondiente (con asterisco en el nombre del autor a quién pertenece)
- (e) Entre 4 y 8 palabras claves en castellano y su correspondiente traducción en inglés.

La segunda página incluirá un resumen del trabajo, en castellano y en inglés, con un máximo de 250 palabras para cada idioma.

El texto del trabajo comenzará en la tercera página, y finalizará con el posible glosario, la bibliografía y las leyendas de las figuras. Colocar las ilustraciones numeradas (figuras y tablas) al final (páginas con numeración romana). Por tratarse de artículos de predominante divulgación científica aconsejamos acompañar el trabajo con un glosario de los términos que puedan resultar desconocidos para los lectores no especialistas en el tema. La extensión de los artículos, salvo excepción, no excederá las 10.000 palabras, (incluyendo título, autores, resumen, glosario y bibliografía). Otras notas relacionados con actividades científicas, bibliografías, historia de la ciencia, crónicas o notas de actualidad, etc, en principio no deberán excederse de 2.500 palabras.

El material gráfico se presentará como: a) figuras (dibujos e imágenes en formato JPG) y se numerarán correlativamente (Ej. Figura 1) y b) tablas numeradas en forma correlativa independiente de las figuras (Ej. Tabla 1). En el caso de las ilustraciones que no sean originales, éstas deberán citar su origen/autor en la leyenda correspondiente (cita bibliográfica o de página web). Los autores deberán acompañar, si fuera necesaria, la autorización para utilizar dichas figuras. Es importante que las figuras y cualquier tipo de ilustración sean de buena calidad.

En caso de utilización de datos significativos que no sean propios se debe siempre indicar la fuente en las Referencias. En el texto del trabajo se indicará el lugar donde el autor ubica cada figura y cada tabla (poniendo en la parte media de un renglón **Figura...** o **Tabla...**, en negrita y tamaño de letra 14). La lista de trabajos citados en el texto deberá ordenarse alfabéticamente de acuerdo con el apellido del primer autor, seguido por las iniciales de los nombres, restantes autores separados por comas, año de publicación entre paréntesis, título completo de la contribución, título de la revista o libro donde fue publicada, volumen y página(s). Ejemplos: Benin L. W., Hurste J. A., Eigenel P. (2008) The non Lineal Hypercycle. *Nature* 277, 108 –115. Tinbergen N. (1951) *The Study of Instinct*. Oxford: Clarendon Press.