

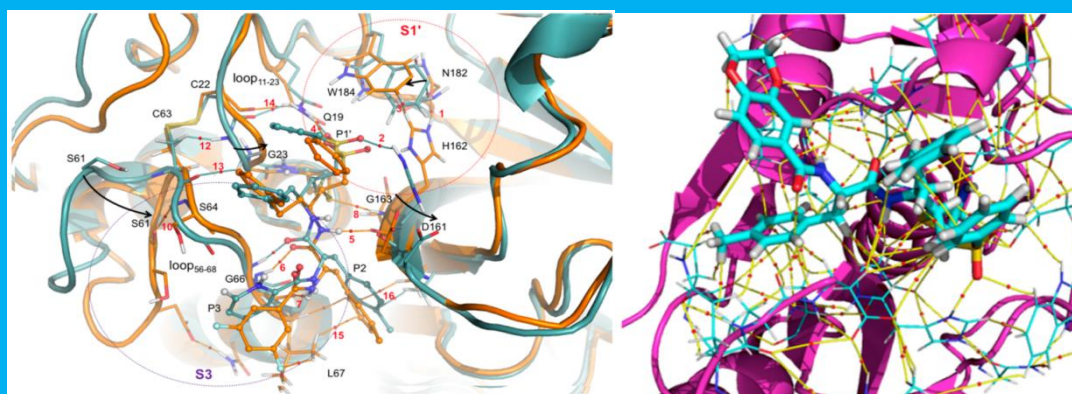
INDUSTRIA & QUÍMICA

ISSN 0368-0819

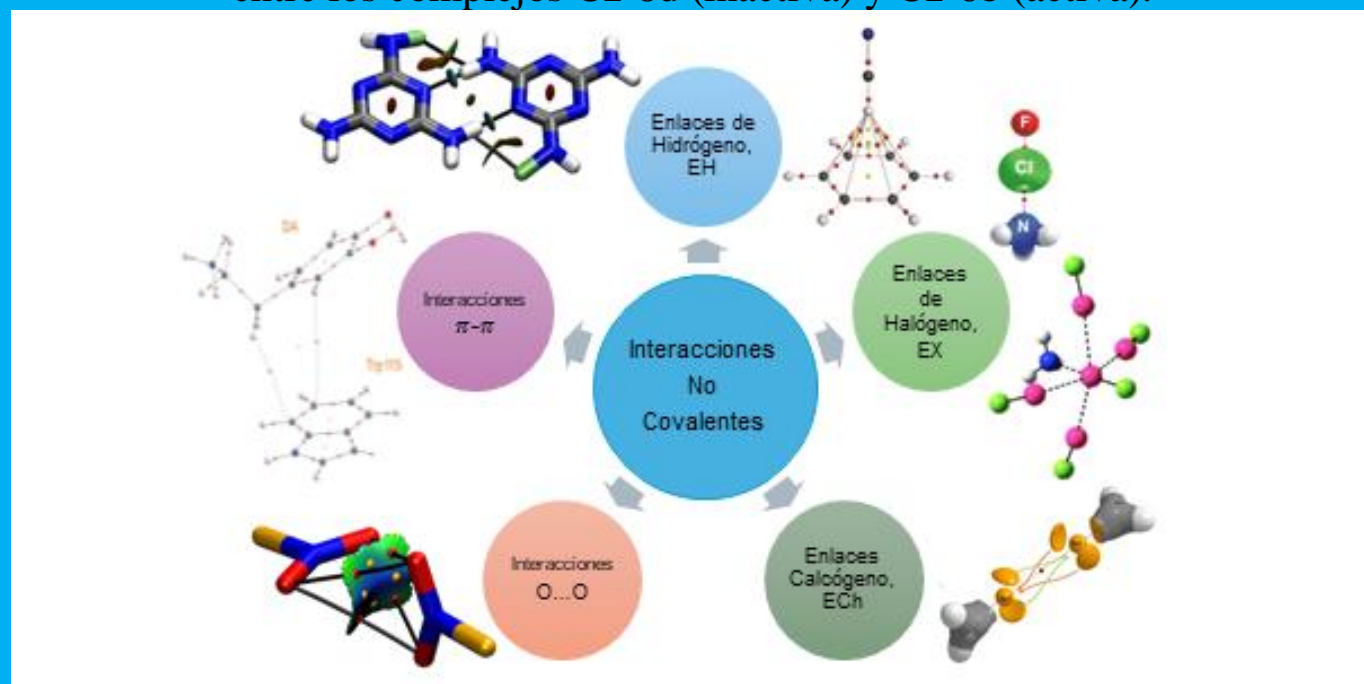
Diciembre 2024 – Nº 375

PUBLICACIÓN DE LA ASOCIACIÓN QUÍMICA ARGENTINA

QUÍMICA COMPUTACIONAL, INTERACCIONES NO COVALENTES Y “MACHINE LEARNING”.



Superposición estructural de complejos de Cruzaína (Cz), elementos topológicos de densidad de carga, y desplazamiento de la cadena principal de la proteína entre los complejos Cz-8d (inactiva) y Cz-6b (activa).



EJEMPLOS DE INTERACCIONES NO COVALENTES

Av. Santa Fe 1145, 4º Piso – C1059ABF Ciudad Autónoma de Buenos Aires- Argentina

WhatsApp: +54 9 11 5569 9881 – aqa@aq.org.ar

Índice

	Pág.
Editorial	1
Actividades de la Asociación Química Argentina	4
Educación en Ciencias Químicas y Físicas	12
Avances en la enseñanza de la química. Resumen de las XIII Jornadas Nacionales y X Jornadas Internacionales de Enseñanza de la Química Universitaria, Superior, Secundaria y Técnica – <i>JEQUSST 2024</i> . <i>Sandra A. Hernández</i>	13
La Inteligencia Artificial en educación: un enfoque crítico desde la Química. <i>Ignacio J. Idoyaga</i>	17
Químicos más importantes y sus contribuciones desde los comienzos de la Química como Ciencia hasta fines del siglo XX. <i>Gabriela P. Cicileo</i>	25
Artículos Técnicos	37
Atmósfera, peroxinitratos y humedad. <i>Gustavo A. Argüello y Fabio E. Malanca</i>	38
Monitoreo del aire en La Plata y alrededores mediante técnicas espectroscópicas. <i>J. Reyna Almandos, D. Schinca, M. Salas, E. Grumel, N. Arrieta, I. Torossian</i>	44
Interacciones no covalentes. Combinando datos de densidad electrónica con herramientas de <i>Machine Learning</i> <i>Emilio L. Angelina y Nélide M. Peruchena</i>	55
Sobre simetrías en Ciencias Físico-Químicas. <i>Francisco José Arrieta Zuccalli, Marcela Zuccalli</i>	72
La Calidad desde el punto de vista del laboratorio de análisis clínicos. <i>Liliana E D'Agostino, Jorge J Bruno, Fernando D Ventimiglia</i>	83
Química y Arte. Preservación del patrimonio cultural	93
Los colores de la Patagonia antigua. El uso de herramientas químicas combinadas para el estudio de pigmentos en contextos arqueológicos del nordeste de la Provincia de Chubut, Argentina. <i>Marcia Mazzuca, Marta Maier, Celeste Gurin, Julieta Gómez Otero.</i>	94
Premios Nobel	95
Premio Nobel de Química	113
Premio Nobel de Física	117
Premio Nobel de Medicina y Fisiología	120

Homenajes	122
Juan Carlos Espector Yebra en el recuerdo	123
<i>Claudio Salvador.</i>	
<i>In memoriam</i>	
Prof. Dr. Enrique J. Baran	126
Prof. Dr. Walter E. Triaca	127
Prof. Dra. Noemí Walsöe de Reca	129
Prof. Dra. Lucía C. Kordich	130

Editorial

El presente número cubre las actividades de la AQA en el período abril-diciembre de 2024.

La AQA no ha estado ausente de un período donde las indefiniciones y limitaciones en el presupuesto de las instituciones universitarias y del sistema científico en general, afectaron su normal desarrollo.

La AQA, sin perder la perspectiva de cuáles son sus funciones y obligaciones, en distintas ocasiones adhirió a las voces que se elevaron en y desde la comunidad académica con relación al impacto de la falta de presupuesto acorde a las necesidades propias para el desarrollo de las actividades de CyT basadas en la calidad y la **excelencia**, tal como ha caracterizado el desarrollo del sistema académico y la formación de recursos humanos que se vuelcan luego al sistema productivo y alimentan las nuevas generaciones de profesionales y académicos de **excelencia** reconocidos, no solo en el país, sino también en el exterior.

Las autoridades de la AQA mantienen la defensa de la educación pública y gratuita en las universidades, así también como el apoyo a la Ciencia y la Tecnología sustentada en las Universidades Nacionales donde la creación del conocimiento fue apoyada desde el CONICET, organismo reconocido internacionalmente desde su creación a fines de 1950. Bernardo Houssay tenía muy en claro el valor de la Ciencia y su optimismo en el desarrollo del país, aunque él mismo fuera objeto de las decisiones políticas de su época que lo desplazaron como Profesor en la UBA. En las presentes circunstancias, el mensaje de Bernardo Houssay, primer Premio Nobel Argentino y Latinoamericano, otorgado en 1947, en Medicina y Fisiología, cuyo pensamiento sobre el valor de la Ciencia y la Tecnología resuena en nuestra memoria: "La disyuntiva es clara, o bien se cultiva la ciencia y la investigación y el país es próspero y adelanta, o bien no se la práctica debidamente y el país se estanca y retrocede. Los países ricos lo son porque dedican dinero al desarrollo científico-tecnológico y los países pobres lo siguen siendo si no lo hacen. La ciencia no es cara, cara es la ignorancia". El credo personal de Houssay se basaba en el amor a la patria, a la libertad, la dignidad personal, la devoción a la ciencia y al trabajo, el respeto a la justicia y a sus semejantes. Es importante recordar y destacar que las actividades de CyT se financian con el apoyo del CONICET, de instituciones provinciales y nacionales desde la Agencia Nacional de Ciencia y Tecnología y de las mismas Universidades, todas ellas comprometidas en el desarrollo de la Ciencia, la Tecnología y la formación de recursos humanos.

El sistema de Ciencia y Tecnología actual, por su parte, con gran esfuerzo de sus integrantes y con una destacada dedicación, continuó desarrollando sus actividades académicas y tecnológicas con la responsabilidad y la solvencia que le caracteriza, algunos de cuyos avances en las distintas áreas de las Ciencias Químicas, Físicas e Innovación se ven reflejados en las contribuciones que acompañan a este número de I&Q. Esta observación se extiende a todos los sectores de la sociedad demostrando, en su conjunto, una resiliencia remarcable.

En contraposición a algunas posiciones que se sustentaron en los últimos años, según las cuales el mérito no nos hace evolucionar, la AQA reconoce que, por el contrario, el camino para el crecimiento y desarrollo del país es el resultado del esfuerzo que realiza la sociedad en su conjunto para sobreponerse a las adversidades que debe afrontar. En efecto, la búsqueda de la excelencia, aún con escasos recursos, volcando la pasión y la imaginación, ha caracterizado siempre al sistema científico-tecnológico y empresarial de nuestra sociedad que piensa en el futuro de las generaciones venideras. Al menos cuatro palabras reflejan la actividad desarrollada: la búsqueda de la calidad, la excelencia, el mérito y la jerarquía del trabajo y de la eficiencia en el uso de los recursos que proveen los ciudadanos para mantenerla. La Asociación continuó apoyando y difundiendo estos conocimientos, sea a través de la participación en reuniones científicas o apoyando la organización de reuniones sobre Educación. En oposición a los que critican el valor del mérito, la AQA ha

ISSN: 2591- 6718



COMISION DIRECTIVA DE LA
ASOCIACION QUIMICA ARGENTINA

Presidente

Dr. Carlos Oscar Cañellas

Vicepresidente

Dr. Alberto Luis Capparelli

Secretaria

Dra. Alicia B. Pomilio

Prosecretario

Dr. Alberto Jorge Lazarowski

Tesorero

Dr. Arturo Vitale

Protesorero

Tco. Qco. Claudio Salvador

Director de Biblioteca

Dr. Máximo Barón

Vicedirectora de Biblioteca

Dra. Stella Maris Battista

Vocales Titulares

Dr. Ángel Alonso

Dr. Máximo Barón

Dra. Stella Maris Battista

Dr. Jorge Oscar Ciprian Ollivier

Dr. Pablo Román Duchowicz

Dra. Sandra Hernández

Dr. Alberto Jorge Lazarowski

Dra. Alicia Beatriz Pomilio

Dra. Marisa Gabriela Repetto

Lic. Enrique G. Rodger

Técnico Químico Claudio Salvador

Lic. Nicolás Alejandro Szewczuk

Dr. Alan Talevi

Dr. Arturo Alberto Vitale

Vocales Suplentes

Lic. Mariano Mandelbaun

Dr. Gustavo Ruiz

Órgano de Fiscalización:

Titulares

Dr. Víctor Szewczuk

Dr. Pablo Román Duchowicz

Suplentes

Dr. Andrew Mercader

reconocido la trayectoria de los científicos a través de los Premios Consagración y distingue a aquellos investigadores y docentes cuya contribución al avance del conocimiento científico, y cuya trayectoria científica los destaca en las áreas Físicoquímica (Premio Prof. Dr. Hans J. Schumacher), Química Orgánica (Premio Prof. Dr. Venancio Deulofeu), Bioquímica Clínica (Prof. Dr. Juan M. Castagnino) y Ciencia y Tecnología de Alimentos (Prof. Dr. Pedro Cattaneo). El detalle de los premiados puede consultarse en la Sección Actividades de la AQA de este número. Finalmente, durante diciembre 2024 se seleccionaron las presentaciones para los “Premios Asociación Química Argentina Dr. Roberto Recoder 2024” a los mejores egresados de Escuelas Técnicas de la Ciudad Autónoma de Buenos Aires y de la Provincia de Buenos Aires, así como los “Premios Asociación Química Argentina 2024” a los mejores egresados universitarios de Licenciaturas en Química o Carreras afines, según se detalla en este número. Se presentaron, además Tesis de Doctorado para los Premios Estímulo AQA 2024, que corresponden al Premio Dr. Enrique Herrero Ducloux 2024 en las áreas indicadas en este número y al Premio Educación en Química 2024.

Durante 2024 se visualizaron con gran intensidad los cambios tecnológicos, particularmente en informática, el avance creciente y arrollador de las tecnologías digitales como la incorporación de las herramientas de la inteligencia artificial (IA), “Machine Learning” y sus derivados en distintos campos, tanto sociales como científicos, que han modificado hábitos de los ciudadanos, en particular de las generaciones más jóvenes. Estos cambios alcanzan también a los procesos de producción y de enseñanza. Algunos ejemplos se presentan en los artículos que se publican en este volumen de I&Q. Las contribuciones resultantes de la aplicación de la IA se han incorporado en las Ciencias Químicas, Medicina, Biología, Arqueología, etc. No es de extrañar que en 2024 los Premios Nobel y otros Premios hayan sido a investigadores que han recurrido a las nuevas tecnologías para realizar avances significativos en Ciencias Químicas y en Física. Recientemente, en el campo de la Arqueología, un grupo de investigadores ingleses fueron capaces de recuperar, por primera vez, el texto de un rollo de un papiro romano parcialmente carbonizado por la erupción del Monte Vesubio que fueran recuperados de la zona de Herculano. Para ello se combinaron algoritmos de “Machine Learning” y rayos X de alta intensidad emitidos por un sincrotrón. El rollo se analizó sin desenrollarlo, evitando su destrucción lo que constituye un avance para la recuperación del conocimiento de la antigüedad. En esta edición de I&Q, se abordarán temas de la aplicación de las herramientas de la IA relacionados con la Educación en Ciencias Químicas, la Química Computacional y aún en los criterios de calidad en laboratorios dedicados a los Análisis Clínicos.

El estudio de los procesos químicos en Cinética Química y Fotoquímica Ambiental y el empleo de técnicas ópticas para el monitoreo de atmósferas contaminadas en regiones urbanas nos permite destacar la importancia de las investigaciones, los desarrollos y la innovación tecnológica en estos campos. En una época de cambios profundos en muchos de los paradigmas científicos, es refrescante saber que todavía hay grupos que se proyectan hacia el futuro sin mezquindades y altruismo. En estos tres grandes temas, se destaca la necesidad del trabajo multidisciplinario. Este hecho se ha visto reflejado en los Premios Nobel en los campos de la Química, la Física y la Medicina, en los que equipos de científicos, ya sea en su laboratorio o en alguna empresa visionaria, independientemente de su formación académica de grado, contribuyeron enormemente a estos desarrollos que se volcaron, vuelcan o volcarán a las Ciencias Químicas en particular. -De la lectura de esta sección, se desprende que muchos de los conceptos que formarán parte de la futura enseñanza de estas disciplinas experimentarán un cambio radical. El desarrollo de nuevos materiales, particularmente a escala propia de la Nanotecnología, es un tema que no solo tiene interés académico, sino que es un desafío para el sector empresarial y un campo fértil para las pequeñas y medianas empresas donde, las nuevas generaciones tienen la audacia y la capacidad para comprender estos cambios por sus impactos en los distintos sectores de la actividad económica, salud y educación. Los nuevos desafíos son enormes y la AQA no puede estar ausente, aportando su contribución y apoyo a la formación de nuevas generaciones de profesionales y al sostén de los organismos centrales de Ciencia y Tecnología como uno de los motores fundamentales para el crecimiento de la sociedad.

Dr. Alberto L. Capparelli - Editor

ISSN: 2591-6718



COMISION DIRECTIVA DE LA
ASOCIACION QUIMICA ARGENTINA

INDUSTRIA Y QUÍMICA

Órgano oficial de la Asociación Química
Argentina

Director

Dr. Alberto L. Capparelli

Comité de Redacción

Tco. Qco. Claudio Salvador

Edición

Dr. Alberto L. Capparelli
Dr. Arturo A. Vitale

Revisora

Dra. Alicia B. Pomilio

Comité Científico Asesor

Dra. Cristina Añón
Dra. Elsa Damonte
Dr. Miguel Angel Blesa
Dra. Sandra Hernandez
Dr. Miguel R. Laborde
Dra. Alicia B. Pomilio
Dra. Silvia Porro

ANALES DE LA ASOCIACIÓN QUÍMICA
ARGENTINA

Editor en Jefe (Director):

Dr. Alberto Jorge Lazarowski

Vicedirectora Ejecutiva

Dra. Marisa Gabriela Repetto

Comité Asesor de la Dirección de la Revista:

Dr. Alan Talevi y Dr. Pablo Duchowicz

COMISIÓN DIRECTIVA DE LA ASOCIACIÓN QUÍMICA ARGENTINA

1) AUTORIDADES Y SUS CARGOS:

Presidente:	Dr. Carlos Oscar Cañellas.
Vicepresidente:	Dr. Alberto Luis Capparelli.
Secretaria:	Dra. Alicia Beatriz Pomilio.
Prosecretario:	Dr. Alberto Jorge Lazarowski.
Tesorero:	Dr. Arturo Alberto Vitale.
Protesorero:	Tco. Qco. Claudio Salvador.
Director de Biblioteca:	Dr. Máximo Barón.
Vicedirectora de Biblioteca:	Dra. Stella Maris Battista.

Vocales Titulares

Dr. Ángel Alonso	Dr. Máximo Barón
Dra. Stella Maris Battista	Dr. Jorge Oscar Ciprian Ollivier
Dr. Pablo Román Duchowicz	Lic. Daniel Escati
Dra. Sandra Hernández	Dr. Alberto Jorge Lazarowski
Dra. Alicia Beatriz Pomilio	Dra. Marisa Gabriela Repetto
Lic. Enrique G. Rodger	Tco. Qco. Claudio Salvador
Lic. Nicolas Alejandro Szewczuk	Dr. Alan Talevi
Dr. Arturo Alberto Vitale	

Vocales Suplentes	Lic. Mariano Mandelbaun, Dr. Gustavo Ruiz
--------------------------	---

Órgano de Fiscalización Titulares

Dr. Víctor Daniel Szewczuk	Dr. Pablo Román Duchowicz.
----------------------------	----------------------------

Órgano de Fiscalización Suplente	Dr. Andrew Gustavo Mercader.
---	------------------------------

Revista *Industria y Química*: Órgano oficial de la Asociación Química Argentina

Director:	Dr. Alberto Luis Capparelli.
Comité de Redacción:	Tco. Qco. Claudio Salvador.
Edición:	Dr. Arturo A. Vitale, Dr. Alberto L. Capparelli
Revisora:	Dra. Alicia B. Pomilio

Comité Científico Asesor

Dra. Cristina Añón	Dr. Elsa Damonte
Dr. Miguel A. Blesa	Dr. Miguel R. Laborde
Dra. Alicia B. Pomilio	Dr. Silvia Porro.

Revista *Anales de la Asociación Química Argentina*:

Editor en Jefe (Director):	Dr. Alberto Jorge Lazarowski.
Vicedirectora Ejecutiva:	Dra. Marisa Gabriela Repetto.
Comité Asesor de la Dirección de la Revista:	Dr. Alan Talevi y Dr. Pablo Duchowicz.

Comité Editorial

Dra. Alicia Fernández Cirelli; Dra. Alicia Beatriz Pomilio; Dr. Ángel Alonso; Dr. Alberto Luis Capparelli; Dra. Norma B. D'Accorso; Dr. Arturo Alberto Vitale, Dra. Sandra Analía Hernández.

Comité Académico Asesor

Dra. Aída Ben Altabef; Dr. Ernesto Calvo; Dr. José Luis Crudo; Dr. Carlos O. Della Védova; Dra. Rosa Erra-Balsells; Dra. Marta Litter; Dra. Alicia Penissi; Dr. Gustavo P. Romanelli; Dr. Rolando Spanevello; Dr. Roberto J. J. Williams.

ACTIVIDADES DE AQA

1.- INFORME DE PRESIDENCIA

El día 21 de octubre de 2024 se realizaron los comicios para la renovación de los cargos de Presidente y siete Vocales Titulares de la CD de AQA.

A continuación de los comicios, se realizó la Asamblea Anual Ordinaria según el Orden del Día enviado a todos los Socios.

Como resultado de este acto eleccionario, la Comisión Directiva de AQA, a partir del 21 de octubre de 2024, quedó conformada como se menciona en este número (*vide supra*).

Las actividades de la AQA se desarrollan en las siguientes áreas y/o divisiones.

- *Organización del Dictado de Cursos*: Responsable: Tco. Qco. Claudio Salvador.
- *División de Jóvenes Profesionales Químicos*: Responsable: Lic. Gastón Villalba.
- *División Educación*: Responsable: Dra. Sandra Hernández.
- *División Química Medicinal*: Responsable: Dr. Alan Talevi.
- *División Química del Cuero*: Responsable: Tco. Qco. Claudio Salvador.
- *División Bioquímica, Salud y Ambiente*: Responsable: Dra. Marisa Gabriela Repetto.
- *División Separación*: Responsable: Lic. Daniel C. Escati.



Miembros de la Comisión Directiva en instalaciones de la Sociedad Científica (Setiembre 2024). Sentados de izquierda a derecha: Dra. S. M. Battista, Dr. A. Alonso, Lic. E. Rodger, Dr. A. L. Capparelli, Dra. A. B. Pomilio, Dr. J. O. Ciprian Ollivier, Dr. A. A. Vitale, Dr. A. J. Lazarowski, Dr. C. O. Cañellas, Dr. D. C. Escati, Tco. Qco. C. Salvador.

2.- INFORME DE SECRETARÍA

Se tomó conocimiento del agradecimiento de las autoridades de SAFYBI por el auspicio y uso del logo otorgado por AQA para el Simposio sobre Farmacia y Bioquímica Industrial 2024 realizado del 29 al 31 de octubre del corriente.

Asimismo, se enviaron las cartas de otorgamiento de los “**Premios Consagración 2024**”. El listado de los premiados se detalla más adelante en esta Sección.

Actualmente se encuentran en etapa de evaluación los “**Premios Estímulo AQA 2024**” a las mejores Tesis de Doctorado aprobadas en Universidades Argentinas, los “**Premios Asociación Química Argentina 2024**”. a los mejores egresados de las Licenciaturas en Química o Carreras afines (Bioquímica, Ingeniería Química, Ciencia y Tecnología de Alimentos y Química Ambiental,

entre otras) de las Universidades del país y “**Premios Asociación Química Argentina Dr. Roberto Recoder 2024**” a los mejores Técnicos Químicos egresados de Escuelas Técnicas de la Ciudad Autónoma de Buenos Aires, propuestos por las correspondientes autoridades.

La Comisión Directiva decidió posponer el Acto de Entrega de Premios para el año 2025, lo cual será adecuadamente informado a los premiados.

Finalmente, con la coordinación de la Secretaría se continuó con:

- Difusión electrónica y apoyo logístico a los cursos.
- Se coordinó la recepción y búsqueda de pedidos para la bolsa de trabajo.
- Cartas de otorgamiento de auspicios a Reuniones Académicas y/o Profesionales Nacionales, Regionales e Internacionales de otros Organismos e Instituciones.
- Intercambio de información con otras Asociaciones, Cámaras e Industrias relacionadas con la Química y con las Autoridades Nacionales y de la Ciudad de Buenos Aires.
- Atención de la correspondencia, notificaciones varias, tareas complementarias encargadas por miembros de la CD, atención del público asistente a la sede y demás tareas concernientes al sector.

3.- INFORME DE TESORERÍA:

El Tesorero de la AQA, Dr. A. Vitale informó que el presupuesto correspondiente a 2024 sigue con saldo positivo.

4.- COMISIÓN DE PREMIOS Y DISTINCIONES

En el mes de julio se dio difusión a las autoridades de las Escuelas Técnicas de la Ciudad Autónoma de Buenos Aires y de la Provincia de Buenos Aires, así como de las Universidades Argentinas que posean en su currícula Licenciaturas en Química o Carreras afines (Bioquímica, Ingeniería Química, Química Farmacéutica, Ciencia y Tecnología de los Alimentos, Biotecnología y Química Ambiental) para que propongan a los mejores egresados para optar a los premios: “**Asociación Química Argentina Dr. ROBERTO RECODER 2024**” y “**ASOCIACION QUIMICA ARGENTINA 2024**” respectivamente.

Se ha solicitado, además, que las autoridades de las Universidades Argentinas presenten propuestas de Tesis de Doctorado para los “**Premios Estímulo AQA 2024**”, correspondientes a:

Premio Dr. Enrique Herrero Ducloux 2024 (Tesis de Doctorado en el área de Química Orgánica, Química Biológica, Química Clínica y Bromatología y/o Ciencia y Tecnología de Alimentos) y **Premio Educación en Química 2024** (Tesis de Doctorado en Educación en Química), según las especificaciones indicadas en la en la reunión de Comisión Directiva del mes de junio de 2024 y detalladas en el sitio web de AQA.

También se otorgarán los **Premios Consagración 2024**, que distingue a docentes e investigadores cuya trayectoria es reconocida en el campo de las Ciencias y Tecnologías Químicas. Este año se otorgarán estas distinciones a las siguientes especialidades

- **Premio Dr. Hans Schumacher 2024 en Fisicoquímica (Básica y Aplicada).**
- **Premio Dr. Venancio Deulofeu 2024 en Química Orgánica.**
- **Premio Dr. Pedro Cattaneo en Bromatología y/o Ciencia y Tecnología de Alimentos.**
- **Premio Dr. Juan Miguel Castagnino en Química Clínica.**

El detalle de los premiados se indica en la Sección PREMIOS de este número.

5.- ACTIVIDADES DE LAS DIVISIONES DE AQA

5.1.- Organización del Dictado de Cursos

Responsable: Tco. Qco. Claudio Salvador

El detalle de los cursos con sus temarios, intensidad y fecha del dictado se lista en la sección Cursos.

El Tco. Qco. Claudio Salvador informa que se han dictado unos 35 cursos entre marzo y noviembre del corriente año, con una asistencia de alrededor de 500 alumnos; además se tienen programados más de diez cursos para el resto del año.

5.2.- División Educación

Responsable: Dra. Sandra Analía Hernández

Durante el segundo semestre, se llevó a cabo la organización de las Jornadas de Educación 2024 bajo la coordinación de la Dra. Sandra A. Hernández. Estas Jornadas, bajo la denominación “*XIII Jornadas Nacionales y X Jornadas Internacionales de Enseñanza de la Química Universitaria, Superior, Secundaria y Técnica*” (JEQUSST 2024) se realizaron en modalidad virtual, entre el 29 al 31 de octubre de 2024. Las Jornadas estuvieron dirigidas a docentes y estudiantes a presentar trabajos de investigación relacionados a la enseñanza y el aprendizaje de la Química y participar en talleres de interés para los niveles educativos universitario, superior, secundario y técnico. Un mayor detalle de la reunión se puede leer en la Sección Educación en Ciencias Químicas y Físicas.

En las Jornadas se contaron con 307 inscriptos, 140 trabajos originales presentados, 12 Talleres temáticos y 10 Conferencistas argentinos y extranjeros,

5.3.- División Química Medicinal

Responsable: Dr. Alan Talevi

Se realizaron las **I Jornadas Rioplatenses de Química Medicinal** los días 11 y 12 de abril de 2024 en la Universidad Nacional de La Plata organizadas por AQA, con el Dr. Alan Talevi, responsable de la División Química Medicinal, como Presidente y el Dr. Pedro Colinas como Copresidente. La evaluación de los trabajos presentados permitió obtener unas jornadas de jerarquía y de interés para la audiencia nacional y de los países vecinos. En el Acto Inaugural hablaron el Rector de la Universidad de La Plata (UNLP), el Decano de la Facultad de Ciencias Exactas de UNLP y el Presidente de AQA. Las actividades se iniciaron luego de las palabras del Dr. Alan Talevi que remarcaron la importancia nacional y regional de la realización de un evento de esta naturaleza en condiciones económicas tan dificultosas, con falta de apoyo a la investigación científico-tecnológica.

Hubo 250 inscriptos, con la presentación de 148 posters de grupos de investigación principalmente de Argentina, Uruguay, Brasil, Chile y otros países. Se destacó el excelente nivel de las presentaciones, el alto número de inscriptos, el interés de los presentes por los temas desarrollados, tanto en las disertaciones como en los posters, y la permanente presencia de los concurrentes hasta el último día. Las investigaciones más relevantes abarcaron tópicos de Síntesis de nuevos compuestos bioactivos y aislamiento e identificación estructural de Productos Naturales con miras al desarrollo de fármacos. Además, las empresas participantes pudieron exponer el desarrollo de sus actividades.

Por este exitoso evento la CD de AQA ha felicitado y agradecido a los Dres. Talevi y Colinas por la organización y desarrollo de las Jornadas mencionadas.

6.- RELACIÓN CON LOS SOCIOS

El Padrón de Socios de AQA se conforma de. Socios Activos, Activos interior, Estudiantes, Institucionales, Vitalicios y Honorarios.

La relación con los socios se establece a través del sitio web de AQA, los e-mails personalizados, y las redes sociales (X, Instagram y LinkedIn).

AQA ofrece como modalidad para el pago de las cuotas sociales y servicios: transferencia bancaria, pago con tarjeta de crédito (Visa, MasterCard), mediante débito automático con la tarjeta VISA, todos los socios abonan sus cuotas mediante esta modalidad salvo los socios vitalicios y honorarios (que se encuentran exentos) y aquellos que gozan de la licencias debidamente autorizadas. También se incorporó Mercado Pago y Western Union para los socios que abonan desde el exterior.

7.- RELACIÓN CON OTRAS SOCIEDADES Y ORGANISMOS

7.1.- IRAM

El Tco. Qco. Claudio Salvador, en representación de AQA, participa oficialmente de las reuniones del Instituto Argentino de Normalización y Certificación (*IRAM*), del cual AQA es Socio Fundador.

La Ing. Graciela Elisabet Magaz participa oficialmente en el Subcomité de Domisanitarios representando a AQA.

El Lic. Rodger ha aceptado actuar como especializado para Material de Laboratorio de Evasa con el aval de la Comisión Directiva de la AQA.

7.2. Cámara Argentina de Empresas Mineras (CAEM) e Instituto Petroquímico Argentino (IPA)

A través del Lic. Rodger se están realizando gestiones con la Cámara Argentina de Empresas Mineras (CAEM) y con el Instituto Petroquímico Argentino (IPA) quienes están interesados en establecer vínculos con AQA y participar en los cursos que se dictan en nuestra institución.

7.3.- Asociación Argentina para el Progreso de las Ciencias (AAPC)

AQA tiene representación ante esta Asociación, manteniendo una relación fluida con las actividades de la misma.

7.4.- AMERICAN CHEMICAL SOCIETY Y OTROS ORGANISMOS INTERNACIONALES

El Lic. Enrique Rodger es el representante de AQA ante la American Chemical Society (ACS).

AQA tiene acceso al *Chemical Abstracts Service (CAS)*, división de ACS.

A través de Lic. Ricardo Segura, se brinda la orientación en forma local para los usuarios en Argentina de la red STN Internacional ("The Scientific and Technical Information Network") y de las bases de datos del CAS, que incluye búsquedas en bases de datos remotas (STN e Internet) y obtención de documentos en el exterior.

8.- BIBLIOTECA Y SERVICIO DE INFORMACIÓN:

Director: Dr. Máximo Barón

Vicedirectora: Dra. Stella Maris Battista

El detalle de las actividades de esta División fue el siguiente.

Servicio de Información en Línea (SIL):

- Se continuó colaborando con la Secretaría y otros sectores de AQA (Cursos, Anales, Congreso) y en la actualización y mantenimiento del sitio web de la Asociación.

- Servicio de Consulta en Bases de Datos: se atendieron consultas de variadas temáticas químicas, siendo las más frecuentes (pero no limitadas a ellas):

- búsquedas sobre preparación o síntesis de sustancias químicas, en forma amplia o restringidas por reactivos;
- obtención de CAS RNs (número de registro del Chemical Abstracts Service) de sustancias químicas;
- búsquedas amplias sobre bibliografía de sustancias químicas (todos los registros sin discriminar tema específico);
- búsquedas sobre usos de sustancias químicas, ya sea en forma general como restringido a un aspecto particular;
- búsquedas sobre formulaciones conteniendo una o más sustancias químicas de interés;
- recuperación de registros específicos de las bases de datos Chemical Abstracts, Registry y otras.

Servicio de Obtención de Documentos: se procesaron solicitudes de documentos (artículos de publicaciones periódicas, patentes y otros).

Los asesoramientos brindados en estos temas, además de consultas individuales de investigadores, incluyeron a empresas e instituciones radicadas en la provincia, así como también a otras del resto del país. Asimismo, se facilitan las actividades en desarrollo a Investigadores, Personal de Apoyo y Becarios de la CIC.

9. NUEVA SEDE

Se están ultimando los trámites ante el Catastro de la Ciudad de Buenos Aires para registrar las escrituras (el agrimensor ya realizó la subdivisión correspondiente). También se está esperando que la Escribana envíe el Reglamento de Consorcio para ser aprobado por la Comisión Directiva de AQA, luego de las recomendaciones del Asesor Legal de la Asociación.

Una vez que esté todas estas actuaciones concluidas, procederemos a la mudanza.

LISTADO DE CURSOS DICTADOS ENTRE MARZO Y DICIEMBRE DE 2024

	CURSOS	Intensidad	Docente
20 marzo	Introducción al cumplimiento de integridad de datos y validación de sistemas G x P relevantes en áreas microbiológicas.	3 hs	Farm. María Laura Borzone
3 abril	Plan de verificación, mantenimiento y calibración de equipos de laboratorio	3 semanas	Prof. Horacio Napolitano
11 abril	Implementación de Buenas Prácticas de Manufactura (BPM) y Objetivos de Desarrollo Sostenible para la Industria de Alimentos	5 hs	Biól. Alina del Mar Infante
15 abril	Validación de métodos analíticos	3 semanas	Prof. Horacio Napolitano
17 abril	Problemática del uso de plaguicidas y estrategias y practicas agroecológicas	6 hs	Ing. Agr. Javier Souza Casadinho
29 abril	Análisis causa raíz para el tratamiento de no conformidades	3 semanas	Prof. Horacio Napolitano
2 mayo	Huella de Carbono	6 hs	Lic. María Carolina Mariani

13 mayo	Introducción a la cromatografía de gases	3 semanas	Prof. Horacio Napolitano
15 mayo	Curso integral de Validación de Sistemas Computarizados en entornos regulados.	9 hs	Farm. María Laura Borzone
27 mayo	Cromatografía de gases - Módulo avanzado	3 semanas	Prof. Horacio Napolitano
3 junio	Introducción al HPLC	4 semanas	Lic. Silvia Trajtemberg
10 junio	Formación de auditores internos	3 semanas	Prof. Horacio Napolitano
12 junio	Curso integral de Validación de Sistemas Computarizados en entornos regulados.	9 hs	Farm. María Laura Borzone
14 junio	Control microbiológico de los ambientes del laboratorio de microbiología	4 hs	Biól. Alina del Mar Infante
24 junio	Validación de procesos productivos	3 semanas	Prof. Horacio Napolitano
4 julio	Energías renovables en la Industria.	3 hs	Lic. María Carolina Mariani
15 julio	Costos de Calidad e Indicadores Clave del Desempeño (KPI)	3 semanas	Prof. Horacio Napolitano
23 julio	Interpretación de Fichas de Seguridad de Productos Químicos	4 hs	Lic. Graciela Egüés
2 agosto	Control de bioluminiscencia y biofilms en industrias alimentarias	4 hs	Biól. Alina del Mar Infante
5 agosto	Estadística aplicada a control de calidad	4 semanas	Prof. Horacio Napolitano
12 agosto	Comprendiendo microbiología	2 semanas	Lic Monica Lagomarsino
19 agosto	Desarrollo de Métodos Analíticos (Dirigido a Cromatografía Gaseosa y Cromatografía Líquida).	3 semanas	Prof. Horacio Napolitano
4 septiembre	Calificación de Infraestructura IT en entornos regulados	3 hs	Farm. María Laura Borzone
9 septiembre	Armado de un Sistema de Gestión de Calidad para Laboratorios Analíticos ISO-17025-2017	3 semanas	Prof. Horacio Napolitano
12 septiembre	Calificación de áreas limpias en industrias de alimentos (ISO 14644) y métodos de verificación de limpieza y desinfección	6 hs	Biól. Alina del Mar Infante
23 septiembre	Espectrometría Ultravioleta - Visible (UV - Vis)	3 semanas	Prof. Horacio Napolitano
7 octubre	Estadística para no estadísticos	3 semanas	Prof. Horacio Napolitano

17 octubre	Desarrollo de envases y embalajes en la industria alimenticia y farmacéutica	4 hs	Lic. Alicia Varela
24 octubre	Introducción a la nueva edición de GAMP® 5	4 hs	Farm. María Laura Borzone
28 octubre	Diseño de Experimentos (DOE)	3 semanas	Prof. Horacio Napolitano
28 octubre	Química sostenible y biomasa	4 semanas	Dr. Gustavo P Romanelli y Dr. Jorge E Colman Lerner
1 noviembre	Interpretación de Fichas de Seguridad de Productos Químicos	4 hs-	Lic. Graciela Egüés
4 noviembre	Preparación de Muestras	9 hs	Lic. Silvia Trajtemberg
13 noviembre	Las sustancias químicas incluidas en los convenios internacionales	8 hs	Ing. Agr. Javier Souza Casadinho

Actualmente los cursos se dan en diferentes modalidades, sincrónica y asincrónica, plataforma Zoom, plataforma Moodle, correo electrónico, etc. La difusión de los cursos puede consultarse en el sitio web de la AQA, Facebook, o bien por correo electrónico para consultas e inscripción en la lista de cursos.

PREMIOS CONSAGRACIÓN 2024

La Comisión Directiva de la Asociación Química Argentina comunica que se otorgan los **PREMIOS CONSAGRACIÓN 2024** a la trayectoria científica de aquellos investigadores que se han destacado en el área indicada, por recomendación de Investigadores en el área correspondiente, del Jurado y de la Comisión de Premios de esta institución.

-- **“Premio Consagración Prof. Dr. Hans Joachim Schumacher 2024”**, en el área de **Fisicoquímica Básica:**

Prof. Dr. Carlos Jorge Cobos, por su actividad académica e Investigador Principal de CONICET en el Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA; CONICET, CCT LA PLATA) en la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata, en la especialidad: Cinética y Fotoquímica de Procesos Elementales.

-- **“Premio Consagración Prof. Dr. Hans Joachim Schumacher 2024”**, en el área de **Fisicoquímica Aplicada:**

Acad. Prof. Dr. Gustavo Alejandro Argüello, por la labor desarrollada como Académico de la Academia Nacional de Ciencias, Profesor Emérito e Investigador Principal de CONICET en el Instituto de Investigaciones en Fisicoquímica de Córdoba (INFIQC; CONICET - UNC) en la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Nacional de Córdoba, en la especialidad: Química y Fotoquímica Atmosférica.

-- **“Premio Consagración Prof. Dr. Venancio Deulofeu 2024”**, en el área de **Química Orgánica**:

Prof. Dr. Gustavo Pablo Romanelli, por la labor desarrollada como Profesor e Investigador Superior de CONICET en el Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas "Dr. Jorge J. Ronco" (CINDECA; CONICET, CCT LA PLATA) de la Universidad Nacional de La Plata, en la especialidad: Aplicación de materiales catalíticos a la síntesis sustentable de compuestos orgánicos de alto valor unitario.

-- **“Premio Consagración Prof. Dr. Juan Miguel Castagnino 2024”**, en el área de la **Bioquímica Clínica**:

Prof. Dr. Jorge Alberto Rey, por la labor desarrollada como Profesor de Bioquímica Clínica en la Facultad de Farmacia y Bioquímica de la Universidad de Buenos Aires, y Jefe de la División de Enfermedades de Transmisión Transfusional del Departamento de Hemoterapia e Inmunohematología del Hospital de Clínicas “José de San Martín”.

-- **“Premio Consagración Prof. Dr. Pedro Cattaneo 2024”**, en el área de **Ciencia de los Alimentos**:

Prof. Dra. María del Pilar Buera, por la labor desarrollada como Profesora e Investigadora Superior de CONICET en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires, en la especialidad: Físicoquímica de Alimentos – Preservación de Biomateriales.

-- **“Premio Consagración Prof. Dr. Pedro Cattaneo 2024”**, en el área de **Tecnología de los Alimentos**:

Acad. Prof. Dra. Noemí Elisabet Zaritzky, por la labor desarrollada como Académica de la Academia Nacional de Ingeniería, y de la Academia de Ingeniería de la Provincia de Buenos Aires, Profesora e Investigadora Superior de CONICET en el Centro de Investigación y Desarrollo en Criotecnología de Alimentos (CIDCA; CONICET, CCT LA PLATA) de la Universidad Nacional de La Plata, en la especialidad: Propuestas tecnológicas en procesos de preservación de alimentos; valorización de subproductos y residuos de la industria alimentaria; y tratamiento de aguas residuales.

EDUCACION EN CIENCIAS QUÍMICAS Y FÍSICA

AVANCES EN LA ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA.

RESUMEN DE LAS XIII JORNADAS NACIONALES Y X JORNADAS INTERNACIONALES DE ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA UNIVERSITARIA, SUPERIOR, SECUNDARIA Y TÉCNICA – JEQUSSST 2024

Sandra A. Hernández

División Educación Química. Asociación Química Argentina

Resumen:

Desde 1994, la División Educación Química de la Asociación Química Argentina, promueve encuentros de intercambio académico atendiendo a la importancia de la capacitación y actualización tanto de docentes e investigadores en ejercicio como de estudiantes en formación. En esta oportunidad, como hace ya 30 años, docentes y estudiantes de todos los niveles educativos, tanto nacionales como extranjeros, han aceptado la propuesta de compartir e intercambiar ideas, recursos, experiencias e investigaciones relacionadas a la enseñanza y el aprendizaje de

las Ciencias Químicas y otras Ciencias Interdisciplinarias.

En esta comunicación se detallan algunas de las conclusiones alcanzadas en las *XIII Jornadas Nacionales y X Jornadas Internacionales de Enseñanza de la Química Universitaria, Superior, Secundaria y Técnica* – identificadas con la sigla JEQUSSST 2024, que se llevarán a cabo, en modalidad virtual, entre el 29 y el 31 de octubre 2024, como parte de las actividades previstas en la División Educación en Química de la Asociación Química Argentina.

XIII Jornadas Nacionales y X Jornadas Internacionales de Enseñanza de la Química Universitaria, Superior, Secundaria y Técnica

29 al 31 de octubre de 2024 - Modalidad virtual

JEQUSSST 2024

Asociación Química Argentina
División Educación Química

UNS UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

Objetivos:

Las XIII Jornadas Nacionales y X Jornadas Internacionales de Enseñanza de la Química Universitaria, Superior, Secundaria y Técnica - JEQUSSST 2024, llevadas a cabo, *en modalidad virtual*, del 29 al 31 de octubre de

2024, convocaron a las Ciencias Químicas y otras Ciencias Interdisciplinarias a participar activamente del debate y preocupación en temas de actualidad y relevancia educativa y social, como lo son la accesibilidad y la inclusión, la formación en ciencias y la inteligencia artificial asociada a los nuevos

retos de enseñanza, aprendizaje y evaluación de los saberes.

En estas jornadas se propuso revisar y actualizar la formación en Química, definiendo como objetivos:

- intercambiar experiencias y puntos de vista entre docentes, estudiantes e investigadores, propiciando la reflexión acerca de prácticas áulicas y experimentales, así como de proyectos de extensión y de investigaciones que pudieran aportar como resultado de su labor;
- promover la difusión y discusión de experiencias didácticas e investigaciones en todos los niveles del sistema educativo;
- contribuir a la construcción del conocimiento en enseñanza e investigación de la Química en interdisciplina con otras ciencias;
- reflexionar acerca de la accesibilidad y la educación inclusiva en la enseñanza, el aprendizaje y la evaluación de la disciplina Química;
- estimular el intercambio de aportes de especialistas sobre problemáticas de enseñanza, aprendizaje y evaluación de las ciencias exactas y naturales, conociendo diferentes aspectos para su abordaje;
- reunir a los investigadores en Ciencias Químicas y otras Ciencias Interdisciplinarias con los profesores de distintos niveles del sistema educativo, con la intención de tender redes y espacios de articulación para el mejoramiento de la práctica educativa.

Desarrollo de las JEQUST 2024

Las Jornadas se estructuraron en conferencias, mesas de diálogo y el dictado de cursos - taller.

Las JEQUST 2024 se desarrollaron en modalidad virtual, con dos formas de intervención complementarias, una asincrónica y otra sincrónica. La comunicación asincrónica

se realizó a través de un aula Moodle, habilitada en el Departamento de Química de la Universidad Nacional del Sur, en la sección denominada Eventos científicos, la cual contó con el acceso a los resúmenes y los videos de cada trabajo, enlaces a las conferencias y mesas de diálogo, secciones para los cursos taller, así como también foros de consulta y discusión.

La transmisión de las Jornadas se realizó desde la Dirección de Educación a Distancia y Educación Continua (DirEad), de la Universidad Nacional del Sur, situada en la sede de rectorado de dicha universidad, en la ciudad de Bahía Blanca. Para los encuentros sincrónicos, se utilizó ZOOM como plataforma de videoconferencia y de socialización de los trabajos presentados en las mesas de diálogo dispuestas para tal fin.

Diez conferencistas de nivel internacional distinguieron las jornadas con sus valiosos aportes en temas de actualidad (Figura 1). La conferencia de apertura del día martes estuvo a cargo del Dr. Ignacio Julio Idoyaga (CIAEC, FFyB, UBA, CONICET, Argentina). Posteriormente disertaron la Dra. Adela Muñoz Páez (Universidad de Sevilla, Sevilla, España) y la Dra. Diana López Tavares (Embajadora PheT en América Latina, México). El miércoles expuso su conferencia el Dr. Víctor Simó (Universidad Autónoma de Barcelona, Barcelona, España) y también hubo una mesa redonda en la que la Dra. Lydía Galagovsky (CeFIEC– FCEyN – UBA, Argentina), el Dr. Vicente Capuano (UNC, Córdoba, Argentina) y la Prof. Paola Fernanda Rosalez (I.S.P "Dr. J.V. González", CeFIEC– FCEyN – UBA, Argentina), habilitaron diálogos para la enseñanza de la Química, la Física y la Biología respectivamente. El jueves 31, las conferencias estuvieron a cargo de la Dra. Carina Lion (IICE, Facultad de Filosofía y Letras, UBA, Argentina), la Prof. Fiorella Lizano Sánchez (Universidad Estatal de Costa Rica, Laboratorio de Experimentación Remota, Costa Rica). La conferencia de cierre estuvo a cargo del Dr. Agustín Adúriz-Bravo (CeFIEC, FCEyN, UBA, CONICET, Argentina).

Martes 29		Miércoles 30		Jueves 31	
10:00 h	15:00 h	10:00 h	16:30 h	10:00 h	15:00 h
Ni Inteligencia ni artificial: Reflexiones sobre los modelos de lenguaje natural y otros asistentes digitales en la educación en química.	La tabla periódica. Un cómic con mucha química	Descubre y Aprende Química con PhET: Novedades y Actividades Didácticas.	Retos de la enseñanza de la química	Mesa redonda: Habilitar diálogos para la enseñanza de química, física y biología	Enseñar en tiempos de algoritmos
				  	
Dr. Ignacio J. Idoyaga CONICET-UBA, DIRECTOR ADJUNTO DEL CITEC, CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y APORTE A LA EDUCACIÓN QUÍMICA, FACULTAD DE QUÍMICA Y FÍSICOQUÍMICA, UBA	Dra. Adela Muñoz Pérez LABORATORIO DE QUÍMICA INORGÁNICA DE LA UNIVERSIDAD DE SEVILLA Miembro del Comité de Asesoramiento Científico y Didáctico 2022.	Dra. Diana López Tavares EMBajADORA PhET EN AMÉRICA LATINA	Dr. Victor López Simó PROFESOR DE DEPARTAMENTO DE QUÍMICA DE LA QUÍMICA Y LAS CIENCIAS QUÍMICAS EN LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BARCELONA	Dra. Lydia R. Galagovsky REPRESENTANTE DEL ÁREA QUÍMICA, Profesora Consulto Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Investigadora del Instituto CITEC, UBA. Dr. Vicente Capuano REPRESENTANTE DEL ÁREA FÍSICA, Titular Preterrito de la Universidad Nacional de Córdoba. Lic. Paola Fernanda Rosales REPRESENTANTE DEL ÁREA BIOLÓGICA, Profesora en Ciencias Naturales del Instituto Superior del Profesorado Dr. Joaquín Y. González, Investigadora del Instituto CITEC, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA.	Dra. Carina Lion INVESTIGADORA PRINCIPAL EN EL INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN CIENCIAS DE LA EDUCACIÓN (IECE), FACULTAD DE FILOSOFÍA Y LETRAS, UBA
					Laboratorios Remotos en Química: rompiendo las reras de las aulas
					
					Prof. Fiorella Llanos Sánchez UNIVERSIDAD ESTATAL A DISTANCIA DE COSTA RICA LABORATORIO DE SUPERVISIÓN REMOTA
					La indagación científica en la nueva enseñanza de la química
					
					Dr. Agustín Aduri-Bravo PROFESOR ASOCIADO EN LA COMISIÓN DE CARRERAS DE LOS PROFESORES DE ENSEÑANZA MEDIA Y SUPERIOR E INVESTIGADOR PRINCIPAL DEL CONICET EN EL INSTITUTO CITEC, DIRECTOR DEL SEMINARIO GRUPO DE EPISTEMOLOGÍA, HISTORIA Y DIDÁCTICA DE LAS CIENCIAS NATURALES, UBA.

Figura 1: Conferencistas invitados

Asimismo, se contó con el dictado de 13 cursos-taller en temáticas diversas, los cuales se desarrollaron con un encuentro sincrónico y espacios de tareas y debates asincrónicos.

En la Figura 2 se muestra una foto de las sesiones virtuales, entre los que se puede observar la presencia del Presidente de la AQA en la sesión inaugural y la Presidenta de las Jornadas.

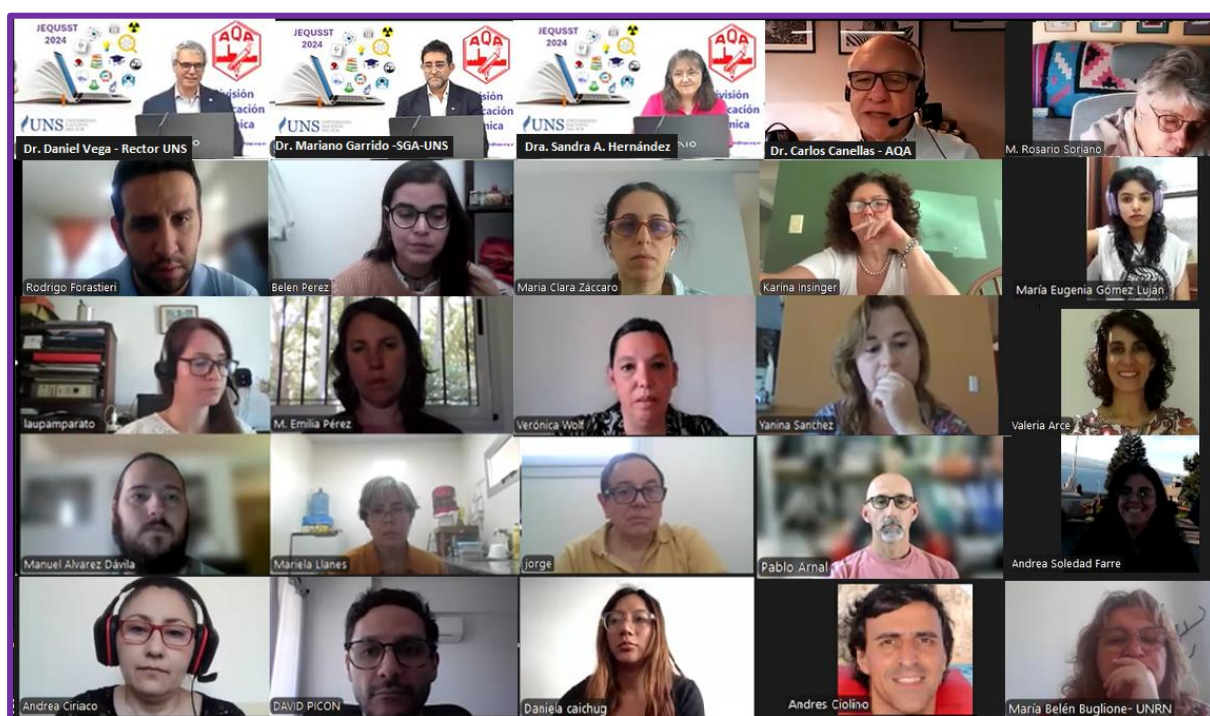


Figura 2: Toma fotográfica de una de las pantallas de los presentes durante el acto inaugural de las Jornadas vía ZOOM. En la primera fila, de izquierda a derecha se encuentran, el Rector de la UNS, Dr. Daniel Vega, el Dr. Mariano Garrido, Secretario General Académico de la UNS, la Dra. Sandra A. Hernández, Presidenta de las JEQUSSST 2024 y el Presidente de la AQA, Dr. Carlos O. Cañellas.

Cabe destacar la participación activa de los más de 300 inscriptos al evento, tanto en las conferencias como durante la socialización de los 136 trabajos presentados, los cuales, divididos de acuerdo a los bloques preestablecidos, se presentaron en modalidad conversatorio.

Los cinco bloques temáticos propuestos para el encuentro fueron:

Bloque 1: Enseñanza, aprendizaje y evaluación de temas de Química.

Bloque 2: Educación en Química mediada por tecnologías (Web 2.0, Web 3.0).

Bloque 3: Accesibilidad y educación inclusiva en la enseñanza de la Química.

Bloque 4: Formación Química Universitaria, Superior, Secundaria y Técnica.

Bloque 5: Resultados de proyectos de investigación y de extensión en Química.

Todos los trabajos presentados fueron evaluados por los miembros del Comité Científico de las JEQUSSST 2024 en modalidad doble ciego, a quienes se agradece muy especialmente los aportes realizados, los cuales enriquecieron los trabajos y sus presentaciones.

Los 136 trabajos presentados fueron escritos por más de 420 autores de origen nacional e internacional quienes reflexionaron sobre el importante rol de la Química en la educación, en sus diferentes niveles académicos.

Es un honor para la División Educación Química de la AQA que las JEQUSSST 2024 fueran consideradas de interés académico por la Universidad Nacional del Sur, la Dirección de Educación a Distancia (DirEad) de la UNS, el Departamento de Química de la UNS y el Instituto de Química del Sur (INQUISUR, UNS- CONICET); así como haber contado con el beneplácito del Consorcio de Grupos de Investigación en Educación en Ciencias Naturales y Experimentales de la Argentina (CONGRIDEC), el Centro de Investigación y Apoyo a la Educación Científica (CIAEC) de la Facultad de Bioquímica y Farmacia de la UBA, la Red Latinoamericana de Investigación en Didáctica de las Ciencias Experimentales (REDLAD), el Laboratorio de Investigación en Didáctica de las Ciencias Experimentales GRECIA-UC, la Asociación de Educadores en Química de la República Argentina (ADEQRA), la Asociación de Profesores de Física de Argentina (APFA) y la Asociación de Docentes de Biología de la República Argentina (ADBIA).

Las presentaciones realizadas en el marco de las JEQUSSST 2024 serán publicadas en el Libro de las Actas de las XIII Jornadas Nacionales y X Jornadas Internacionales de Enseñanza de la Química Universitaria, Superior, Secundaria y Técnica, JEQUSSST-2024, editado por la Asociación Química Argentina con ISBN: en trámite, el cual

quedará disponible para su consulta en la página web de la AQA, en la sección CONGRESOS Y EVENTOS (<https://aqa.org.ar/index.php/congresos-y-eventos>) y replicado en la sección Publicaciones/Libros/Jornadas de Enseñanza (<https://aqa.org.ar/index.php/publicaciones2/libros/jornadas-de-ensenanza>).

Este libro de actas, contendrá una breve semblanza de cada conferencista, así como también un resumen y el enlace al video de cada conferencia; los trabajos completos y un índice especial conteniendo los enlaces de los respectivos videos presentados y el detalle e información relevante de cada curso-taller dictado.

Al momento de esta publicación, se están evaluando los trabajos que serán distinguidos para su publicación en el volumen 111, de 2024, de la revista Anales de la Asociación Química Argentina el cual podrá ser consultado en la página web de la AQA en la dirección:

<https://aqa.org.ar/index.php/volumenes-publicados>

LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL EN EDUCACIÓN: UN ENFOQUE CRÍTICO DESDE LA QUÍMICA

Ignacio J. Idoyaga

Universidad de Buenos Aires, Facultad de Farmacia y Bioquímica, Centro de Investigación y Apoyo a la Educación Científica. CONICET. Junín 956 (1113) CABA, Argentina.

iidoyaga@ffyb.uba.ar

Resumen

Este trabajo reflexiona sobre el impacto de la Inteligencia Artificial en la educación en química. Desde un enfoque personal, se abordan cuestiones clave del campo de la Inteligencia Artificial, como su definición y su historia, y se exploran las tensiones entre la tradición académica y las innovaciones que introducen estas herramientas. Se abordan debates éticos y didácticos clave, como el sesgo algorítmico, la integridad académica y la responsabilidad sobre los resultados. Además, el autor destaca cómo la IA podría redefinir el rol del docente, impulsándolo a integrar nuevas herramientas en las prácticas de enseñanza. El texto incluye experiencias concretas, como el uso de *Claude 3.5* para simulaciones en química y un asistente virtual diseñado para apoyar la planificación docente. A través de estas iniciativas, el trabajo invita a reflexionar sobre las oportunidades y limitaciones de la Inteligencia Artificial en la Educación.

Abstract

A reflection on the impact of Artificial Intelligence on chemistry education is presented in this contribution. From a personal perspective, the author addresses key issues in the field of Artificial Intelligence, such as its definition and history, and explores the tensions between academic tradition and the innovations introduced by these tools. Key ethical and didactic debates are addressed, such as algorithmic bias, academic integrity, and responsibility for results. In addition, the author highlights how AI could redefine the role of the teacher, encouraging them to integrate new tools into teaching practices. The text includes concrete experiences, such as the use of *Claude 3.5* for chemistry simulations and a virtual assistant designed to support teaching planning. Through these initiatives, the work invites us to reflect on the opportunities and limitations of Artificial Intelligence in Education.

Introducción

En esta breve reflexión, con aspiraciones de ensayo, escribiré de un modo sustancialmente diferente a mi costumbre. En primer lugar, lo haré en primera persona del singular, abandonando mi clásico estilo impersonal, tan característico de la academia hispanohablante. Esta decisión responde a la intención de resaltar lo subjetivo de ciertos posicionamientos, así como a la necesidad de responsabilizarme plenamente de cada palabra incluida en este texto, un debate que retomaré más adelante. En segundo lugar, utilizaré diversas herramientas de Inteligencia Artificial (IA) para la confección de este escrito. Echaré mano de ChatGPT-4o de OpenAI, de Gemini 1.5 Pro, recientemente perfeccionado por Google, y de Claude 3.5 Sonnet, desarrollado por Anthropic. Esta elección responde a mi interés por explorar una nueva manera de escribir académicamente, una que tensiona la tradición editorial vigente. Con ello, busco lograr un producto que podría calificarse como “minotauro”, en términos de lo propuesto por Cristóbal Cobo en el último EDUTEC celebrado en Sevilla; otra idea sobre la que me explayaré luego. Todo esto, al tiempo que intento (utópicamente) dar respuesta a preguntas ubicuas, forzando, sin embargo, circunscribirlas al ámbito de la educación en química. En concreto, procuraré hilvanar ideas sobre la IA como área de conocimiento, sus herramientas y el impacto que estas tienen en la educación, en particular en la enseñanza de la química y de las ciencias naturales.

La organización de este documento sigue los lineamientos que ensayé en la conferencia inaugural de las XIII Jornadas Nacionales y X Jornadas Internacionales de Enseñanza de la Química Universitaria, Superior, Secundaria y Técnica organizadas por la Asociación Química Argentina, que será publicada de forma completa en los próximos meses. Intentaré avanzar desde una perspectiva general hacia aspectos más específicos

y, al final, comentaré algunos casos de interés. Para empezar, exploraré distintas definiciones de IA, buscando contrapuntos y planteando mi propia perspectiva. Señalaré posibles hitos en la historia de la IA. Describiré herramientas disponibles y trataré de identificar los componentes clave de esta tecnología. Luego, abordaré el desafío de definir la Inteligencia Artificial en Educación (IAE) y describiré algunos de sus potenciales beneficios. En este punto, me detendré a cuestionar críticamente ciertas visiones románticas que predominan al respecto. Finalmente, ofreceré una perspectiva centrada en el profesor como gestor de la educación y de las tecnologías involucradas en el proceso de enseñanza. Analizaré, además, algunos resultados y experiencias que considero ilustrativos en el ámbito de la educación en química.

Un posible entendimiento de la Inteligencia Artificial

Como tantos otros, encuentro conveniente aceptar que el origen de la IA como disciplina formal se remonta a 1956, cuando John McCarthy, uno de sus principales pioneros, organizó la histórica Conferencia de Dartmouth. Este evento puede considerarse el punto de partida oficial del campo de la IA. Durante la conferencia, McCarthy propuso una definición que aún resuena en la actualidad: “La IA es la ciencia e ingeniería de hacer máquinas inteligentes, especialmente programas de computadora inteligentes” [1]. Este enfoque inicial sentó las bases para un campo interdisciplinario que buscaba replicar y expandir las capacidades cognitivas humanas mediante el desarrollo de sistemas artificiales.

A lo largo del tiempo, la inteligencia artificial ha sido definida desde diversas perspectivas. Marvin Minsky la consideró “la ciencia de hacer que las máquinas hagan cosas que requerirían inteligencia si fueran hechas por hombres”[2], destacando su carácter funcional. Elaine Rich enfatizó su carácter práctico al describirla como “el estudio de cómo hacer que las computadoras hagan cosas en las que, en este momento, los humanos son mejores” [3]. Por su parte, Patrick Winston la definió como “el estudio de las ideas que permiten a los ordenadores ser inteligentes” [4], subrayando su naturaleza teórica, mientras que Russell y Norvig incorporaron el concepto de agentes autónomos que perciben y actúan [5]. Más recientemente, Kaplan y Haenlein resaltaron la capacidad de interpretar datos, aprender y adaptarse para alcanzar objetivos [6]. Estas definiciones reflejan la evolución del campo,

oscilando entre la funcionalidad, la teoría y la adaptabilidad, según las prioridades de cada época.

Todas y cada una de las definiciones propuestas conllevan, desde mi perspectiva, la problemática del uso difuso e impreciso de los términos “inteligencia” y “artificial”. De hecho, quiero sugerir que este conjunto de máquinas y tecnologías no es ni verdaderamente inteligente ni completamente artificial. Como muchos otros, no puedo más que reconocer que las máquinas carecen de conciencia, empatía y comprensión en el sentido humano, elementos clave de la inteligencia que valoro y pongo. Su supuesta inteligencia se limita a ejecutar tareas complejas basadas en un conjunto de datos preconstruidos naturalmente por la humanidad. Su supuesta artificialidad no evita que reproduzcan y amplifiquen lo más venturoso y lo más nefasto de nuestras sociedades. Sin embargo, y a pesar de que de modo casi militante sostengo que “ni inteligente ni artificial”, estoy dispuesto a aceptar que esta tecnología podría considerarse una nueva prótesis de la mente, en términos de Pozo [7], que acompaña y amplifica nuestras capacidades cognitivas. Asimismo, este fenómeno refleja una evolución que va desde el estadio teórico de la mente al estadio digital, tal como lo describe Donald [8]. Estas máquinas no crean conocimiento por sí mismas; más bien, operan como extensiones sofisticadas de nuestra propia inteligencia. En su corta historia, que abordaré en el próximo apartado, aparecen las primeras pistas que permiten entender como la humanidad transita este proceso de amplificación de la cognición.

Un recorrido por la historia de la Inteligencia Artificial

Entender la historia de la IA implica, al menos para mí, un claro desafío: el abandono de una mirada ingenua sobre el desarrollo tecnológico supuestamente contante e ininterrumpido. En esta historia se suceden períodos de intenso desarrollo, conocidos como “primaveras”, y momentos de estancamiento, denominados “inviernos”. Tras la conferencia de Dartmouth en 1956, que, como ya dije, inauguró formalmente el campo, un avance significativo fue el desarrollo de los primeros programas capaces de resolver problemas matemáticos, como el Logic Theorist (1956), considerado uno de los primeros sistemas de IA. Durante la década de 1960, surgieron sistemas como ELIZA (1966), que simulaba conversaciones humanas, y Shakey (1969), el primer robot capaz de evaluar sus propias acciones. Sin embargo, la alta

expectativa inicial de estos años se desvaneció al evidenciarse las limitaciones tecnológicas, dando lugar al primer “invierno” de la IA en los años 70, caracterizado por una caída significativa en el financiamiento y el interés.

En los años 80, la IA vivió un renacimiento con el auge de los sistemas expertos, diseñados para emular el razonamiento humano en campos específicos como la medicina, destacando programas como MYCIN. Este período marcó una nueva primavera, impulsada por el entusiasmo académico y comercial. Sin embargo, los altos costos de desarrollo y el desempeño limitado en problemas más complejos llevaron a otro invierno en los años 90.

El siglo XXI trajo consigo avances significativos, impulsados por el crecimiento del poder computacional y la disponibilidad de grandes volúmenes de datos. El desarrollo de AlphaGo (2016), que venció a los mejores jugadores de Go, y el lanzamiento de asistentes virtuales como Siri (2011) o Alexa (2014), evidencian cómo la IA se ha integrado en la vida cotidiana. Más recientemente, el lanzamiento y popularización de ChatGPT (2022), basado en modelos de lenguaje natural, revolucionó el acceso a la IA, permitiendo a millones de usuarios interactuar con sistemas altamente sofisticados a diario.

En 2024, los científicos Yann LeCun, Geoffrey Hinton y Yoshua Bengio, considerados los padres del aprendizaje profundo, recibieron el Premio Nobel de Física, un reconocimiento histórico que subrayó el impacto de la IA en la ciencia. Ese mismo año, el Premio Nobel de Química fue otorgado a pioneros en el desarrollo de catalizadores asistidos por IA, una innovación que ha transformado la química al acelerar el descubrimiento de nuevos materiales y optimizar procesos químicos con un nivel de precisión sin precedentes.

Estos hitos, que elegí de manera claramente arbitraria, me permiten reflejar cómo la IA atravesó ciclos de expectativas, avances y retrocesos, mostrando su capacidad para renacer con cada nueva primavera tecnológica. Al mismo tiempo, me permiten ofrecer evidencias de su creciente relevancia en la intersección entre tecnología, ciencia y sociedad. Todo esto, me lleva a pensar que, a pesar de las dificultades, la resiliencia del campo radica en las ansias creadoras de la humanidad. Es claro para mí que la ilusión de la criatura inteligente, que maximiza nuestro ego, es un potente motor de cambio, que se concretiza la

proliferación en distintas herramientas a las que me referiré a continuación.

Una mirada de las herramientas de Inteligencia Artificial

La IA se materializa en una amplia gama de herramientas que pueden clasificarse según diversos criterios. Sólo incluiré algunos de los posibles, sin ánimo de ser exhaustivo. Una primera distinción puede hacerse entre sistemas de IA débil e IA fuerte. Por un lado, la IA débil, también conocida como específica, se limita a realizar tareas concretas, como los asistentes virtuales (Siri, Alexa) o los sistemas de recomendación en plataformas digitales. Por otro lado, la IA fuerte, aún un ideal teórico, que me permite poner en duda, aspira a replicar la inteligencia humana en toda su amplitud, incluyendo habilidades como la creatividad, el razonamiento y la autoconciencia.

Un área destacada dentro de las aplicaciones recientes es la de las IA generativas, sistemas diseñados para crear contenido supuestamente original, como texto, imágenes, música o videos. Herramientas como ChatGPT, DALL·E o Stable Diffusion pueden generar productos percibidos por algunos como novedosos y ciertamente útiles, lo que llevó a convertirlas en elementos clave de un nuevo paradigma de interacción tecnológica.

Otro criterio de clasificación se basa en las técnicas utilizadas. Aquí encuentro distintas estrategias como los sistemas basados en reglas, los sistemas expertos, las redes neuronales artificiales y el aprendizaje profundo (*deep learning*). No tengo dudas que redes neuronales y el aprendizaje profundo, en particular, revolucionaron la IA que hoy conocemos, permitiendo avances en reconocimiento de imágenes, procesamiento del lenguaje natural y sistemas autónomos. Además, muchas de estas herramientas comparten una arquitectura común, generalmente basada en redes neuronales multicapa organizadas en un modelo de aprendizaje supervisado, no supervisado o por refuerzo. Estas arquitecturas incluyen componentes clave como capas de entrada, donde se procesan los datos iniciales (esos generados naturalmente de los que hablé antes); capas ocultas, donde se realizan transformaciones complejas y ajustes de parámetros; y capas de salida, que generan predicciones o resultados concretos. En el caso de las IA generativas, se suman mecanismos de atención y modelos entrenados en grandes conjuntos de datos, que permiten crear contenido

aparentemente nuevo a partir de patrones aprendidos.

Además, las herramientas de IA pueden agruparse según su ámbito de aplicación. En la educación, destacan los sistemas de tutoría inteligente, que adaptan contenidos a las necesidades de los estudiantes; en la medicina, los diagnósticos asistidos por IA están transformando la práctica clínica; mientras que en la industria, los robots inteligentes optimizan cadenas de producción.

Estas clasificaciones no son excluyentes, sino que reflejan la complejidad y diversidad de un campo en constante evolución. Cada herramienta, desde los algoritmos más simples hasta los sistemas más avanzados, pone de manifiesto cómo la IA no solo transforma tareas específicas, sino que también redefine nuestras interacciones con la tecnología. En este sentido, en el próximo apartado trataré de centrarme en un campo de interacción ante todo delicado: la educación.

Un acercamiento a la Inteligencias Artificial en Educación

A la hora de hablar de Inteligencia Artificial en Educación (IAE) me siento en el irrenunciable compromiso de asumir la postura más crítica posible y el carácter más cauto, aplacando cualquier pasión. Probablemente, este uso de la IA es el pivó de todo debate sobre la relación de la humanidad con esta tecnología.

La IAE fue definida desde múltiples perspectivas, reflejando tanto sus aplicaciones como sus potencialidades. Según Baker y Smith, “la IAE se refiere a un conjunto de herramientas y metodologías que emplean la IA para apoyar el proceso educativo [9], incluyendo la evaluación, con un enfoque en la mejora del aprendizaje y la enseñanza”. Esta definición, ampliamente aceptada en el ámbito educativo, destaca las oportunidades de optimización que ofrece la IA en la enseñanza. En una línea similar, Woolf subraya que “la IAE combina metodologías de la IA con teorías pedagógicas para crear sistemas que pueden ofrecer tutoría, diagnóstico y enseñanza personalizada” [10]. Por otro lado, Nkambou, Bourdeau y Mizoguchi enfatizan la capacidad de la IAE para personalizar y adaptar la enseñanza [11], mejorando la efectividad del aprendizaje, mientras que Holmes, Bialik y Fadel [12] destacan su potencial para comprender y responder a las necesidades individuales de los estudiantes. Finalmente, Tegmark resume esta idea afirmando que la IAE utiliza técnicas avanzadas de IA para transformar la

educación [13], proporcionando retroalimentación en tiempo real. Estas definiciones, aunque diversas, convergen en la idea de que la IAE no solo optimiza la enseñanza, sino que la personaliza, respondiendo a las necesidades específicas de cada estudiante. En definitiva, puedo intentar sintetizar las promesas de esta tecnología en el ámbito educativo en dos ideas clave: personalización de la enseñanza y retroalimentación inmediata. Algo que como educador no deja de preocuparme, dada su identidad compartida con la pandemia de individualismo e inmediatez que caracteriza nuestros tiempos.

Entender la IAE implica revisar su devenir. Sus raíces parecen estar en los trabajos pioneros de Patrick Suppes en la década de 1960, quien exploró el uso de computadoras para la enseñanza individualizada. En 1970, Jaime Carbonell introdujo el concepto de “AI in CAI” (Inteligencia Artificial en Instrucción Asistida por Computadora) con SCHOLAR [14] un sistema tutor basado en IA diseñado para enseñar geografía. Paralelamente, Allen Newell y Herbert A. Simon sentaron las bases teóricas de la resolución de problemas, influyendo en el diseño de sistemas que apoyaban la enseñanza de habilidades prácticas [15]. Durante los años 70 y 80, figuras como John Seely Brown y Richard R. Burton [16] trabajaron en sistemas capaces de diagnosticar errores de aprendizaje y proporcionar retroalimentación específica, mientras que John Anderson desarrolló sistemas tutores inteligentes que enseñaban habilidades como la resolución de ecuaciones [17]. Asimismo, Roger Schank lideró la aplicación de la IA al aprendizaje basado en casos y simulaciones, incorporando experiencias narrativas en el software educativo [18]. Por su parte, Seymour Papert, conocido por sus aportes a la teoría constructivista y por el desarrollo del lenguaje LOGO, exploró cómo la IA podía crear entornos donde los estudiantes construyeran su propio conocimiento [19]. Estas iniciativas marcaron el desarrollo de sistemas educativos más adaptativos y dinámicos, sentando las bases de lo que hoy entendemos como IAE.

Aunque debo reconocer que la IAE mostró un potencial transformador, sus promesas deben analizarse críticamente. Como ya anticipé, entre los supuestos beneficios se encuentra la capacidad de personalizar la enseñanza, adaptándose a las necesidades individuales de los estudiantes y ofreciendo retroalimentación inmediata. No obstante, este optimismo muchas veces olvida las limitaciones actuales de la tecnología y los riesgos asociados. La dependencia de grandes volúmenes de

datos plantea preocupaciones éticas sobre la privacidad y el sesgo algorítmico. Además, el uso indiscriminado de la IA en educación podría reducir la enseñanza a un proceso meramente técnico, obviando el papel del profesor como pensador de los procesos de la educación. Por otra parte, la utilidad de la IAE sigue siendo desigual según el contexto. Mientras que en entornos con acceso a tecnología avanzada puede ofrecer beneficios sustanciales, en contextos de desigualdad tecnológica corre el riesgo de ampliar las brechas educativas. Como advierten Holmes, Bialik y Fadel [12], la implementación de la IAE debe ser cuidadosamente diseñada para garantizar que las herramientas sirvan como complemento y no como reemplazo de la enseñanza humana. Más aún, solo pensar cómo se están transformando las prácticas con estas tecnologías, me lleva a plantear una serie de temas de debate que describiré seguidamente.

Una reflexión sobre los debates que conlleva la IAE

El advenimiento de la IAE, desde mi perspectiva, hace más urgente la profunda discusión sobre los cuestionamientos de la IA: la perpetuación de sesgos, la naturalización de inequidades, la reproducibilidad de la desigualdad, la tiranía de las mayorías y la construcción de sentido común vano y superficial. Pero, además, habilita el inmediato debate sobre algunas otras cuestiones: el impacto en la buena enseñanza, en términos morales y epistémicos, la cuestión de la integridad académica y la personalización sin empatía. Es decir, ante la popularización de la IAE, se abren al menos dos grandes líneas de trabajo: los debates para llevar al aula y los debates sobre la realidad del aula.

En el aula, los estudiantes deberían reflexionar sobre cómo la IA afecta diversos aspectos de la sociedad. Temas como el sesgo y la discriminación en los algoritmos invitan a analizar cómo estas tecnologías perpetúan prejuicios presentes en los datos de entrenamiento, impactando a distintos grupos sociales. También se puede debatir sobre la vigilancia y privacidad en un mundo donde la tecnología recopila cada vez más información personal, así como la transparencia y explicabilidad de los sistemas, cuestionando si realmente entendemos cómo toman decisiones los algoritmos.

Es importante discutir también sobre la responsabilidad y rendición de cuentas en el uso de la IA, algo a lo que me referí someramente al principio del texto, al anunciar que escribiría en primera persona. Precisamente para dejar claro, que

a pesar de estar usando herramientas de IA para producir este escrito, suscribo cada palabra. En contraposición, muchos de los resultados generados por IA, o con IA, no tienen quién se responsabilice.

La autonomía y el control humano frente a sistemas cada vez más autónomos, y los posibles efectos de estas tecnologías en el mercado laboral y el medio ambiente, son temas imprescindibles. Este último, el impacto ambiental, cobra mayor relevancia en la educación científica. Así mismo, abordar temas como los deepfakes, las desigualdades en el acceso a la tecnología y el impacto en los derechos humanos puede ayudar a los estudiantes a desarrollar un pensamiento crítico frente a estos desafíos.

Desde la perspectiva docente, la IA también me obliga a reflexionar sobre cómo está transformando la naturaleza misma de la enseñanza. El impacto de la IA en la integridad académica, por ejemplo, conlleva a repensar cómo se evalúa el trabajo de los estudiantes y cómo prevenir el uso no ético de estas herramientas. Del mismo modo, la privacidad de los datos estudiantiles plantea preguntas éticas importantes sobre el almacenamiento y análisis de información sensible. También es necesario considerar los posibles sesgos en las evaluaciones automatizadas y su impacto en la equidad educativa, así como el grado de autonomía que estas tecnologías otorgan o restringen a los estudiantes en sus procesos de aprendizaje.

Finalmente, quiero preguntarme cómo la IA está redefiniendo nuestro rol como educadores. Si bien estas herramientas pueden apoyar la enseñanza, también existe el riesgo de deshumanizar el proceso educativo, limitando el contacto humano y la dimensión emocional del aprendizaje. Además, las desigualdades en el acceso a estas tecnologías pueden profundizar las brechas existentes entre estudiantes y entre instituciones educativas. La influencia de la IA en las prácticas educativas y su impacto en el desarrollo profesional docente obliga a repensar nuestras habilidades y responsabilidades para integrar estas herramientas de manera ética, efectiva y humana. Estos debates son esenciales no solo para garantizar una implementación adecuada de la IA en la educación, sino también para preservar el propósito fundamental de la enseñanza: formar ciudadanos críticos y comprometidos con el bienestar de la sociedad, lo que requiere del compromiso de un actor clave al que me referiré a continuación: el profesorado.

Una mirada centrada en el profesorado

Al pensar en las posibilidades de que la inclusión de herramientas de IA mejore la educación, me doy cuenta de que esto depende básicamente de un único factor. De hecho, se trata del mismo factor del que siempre depende la modificación de las prácticas educativas: el modo en el que el profesorado gerencia el cambio. Creo que cualquier análisis sobre cómo la IA podría cambiar la enseñanza de la química o de las ciencias debe partir desde este punto. De igual manera, al ver lo que sucede hoy en los cursos de todos los niveles, solo puedo pensar en la urgencia de que el profesorado recupere esa gerencia y administre la IA en el proceso educativo.

Una idea, que me permitió organizar mis reflexiones e investigación al respecto del impacto de la IA es la práctica de los profesores de química es la llamada “Escalera de la IAE”. Se trata de una metáfora (en realidad un conjunto de metáforas) que describe las etapas de desarrollo y aplicación de la IA en contextos educativos, desde el uso más básico hasta niveles avanzados de integración. Según Luckin [20], en su visión de esta escalera, la IAE comienza con herramientas de automatización simples, como los sistemas de corrección automática, y progresa hacia tecnologías más complejas que personalizan la enseñanza y el aprendizaje. En etapas intermedias, encontramos sistemas de tutoría inteligente que ofrecen retroalimentación específica y adaptativa a los estudiantes, como los propuestos por Nkambou, Bourdeau y Mizoguchi [11]. En los niveles más avanzados, la IA actúa como un mediador en el diseño del aprendizaje, utilizando algoritmos que analizan grandes cantidades de datos para generar modelos predictivos sobre el desempeño estudiantil y personalizar las experiencias educativas [9].

En una visión más simple y centrada en el uso que el profesorado hace de las herramientas de IA para su enseñanza, puedo pensar en cuatro escalones. El primer escalón, es en el que los docentes usan la IA para obtener información que emplean para el diseño de su enseñanza. En este punto quiero proponer dos estilos de uso, que en realidad pueden entenderse como los extremos de un continuo. En una punta, el estilo Delfos, en el que las personas recurren a la IA como al famoso oráculo. Es una forma ingenua, poco crítica y despreocupada de los problemas de la veracidad, responsabilidad y transparencia de la generación de información. En la otra punta, el estilo Alejandría, en la que las personas usan la IA como la renombrada biblioteca.

Es un uso sofisticado, reflexivo y crítico, que buscará la validación de la información.

El segundo escalón, es en el que los docentes usan las herramientas de IA para diseñar materiales para la enseñanza (por ejemplo textos, videos, podcast, visualizaciones, casos, preguntas y simulaciones). Este uso, que algunos llaman (erróneamente a mi parecer) de codiseño, puede generar productos tipo minotauro. Este tipo, que ya introduje arriba y al que obedece este escrito, combinaría lo mejor de la creatividad humana con la potencia de las herramientas tecnológicas.

El tercer escalón, es en el que los docentes son capaces de configurar agentes de IA para que interaccionen con los estudiantes en base a una serie de directivas. Se trata del caso de tutores o asistentes de los que el profesorado podría disponer para que los alumnos tengan una interacción específica.

El cuarto escalón, que según mi opinión, representa un salto cualitativo en el uso de IA en educación, es en el que el docente usa y demanda herramientas con especificidad. Es decir, herramientas de IA específicamente pensadas para la enseñanza y específicamente pensadas para la enseñanza en una determinada área o disciplina.

En concreto, la inclusión responsable de herramientas de IA por parte del profesorado, en los distintos escalones, tiene el potencial de transformar profundamente la manera en que se producen y diseñan materiales educativos. Estas tecnologías permiten la generación de contenido educativo y recursos digitales adaptativos, así como la creación de preguntas y evaluaciones personalizadas. Además, facilitan la creación de visualizaciones científicas y simulaciones en laboratorios virtuales, ofreciendo experiencias de aprendizaje inmersivas. Herramientas como asistentes virtuales pueden ayudar a resolver problemas complejos, mientras que otras herramientas de IA pueden apoyar la composición de textos científicos orientados a la enseñanza y la producción de materiales multimedia. También es posible diseñar casos de estudio dinámicos y responder preguntas abiertas mediante modelos explicativos generados por IA, enriqueciendo el proceso educativo con recursos innovadores y accesibles. Este enfoque no solo optimiza la enseñanza, sino que también redefine el rol del docente como creador de materiales y mediador en el aprendizaje.

En el próximo apartado, el último de esta reflexión, comentaré algunas acciones y casos que resultan interesantes, en particular para la enseñanza

de la química, aunque también para otras ciencias naturales.

Unos pocos ejemplos de iniciativas con IA en educación en química

Los ejemplos a la hora de escribir siempre fueron algo controversiales para mí. No así cuando me presento con alguna conferencia o en clase, donde puede ofrecer uno tras otro. A la hora de plasmarlos en un papel, en una pantalla, viene a mi mente el terrible interrogante sobre el motivo de la elección. Es en este apartado, donde comentaré unas pocas iniciativas con IA en educación en química, donde mi arbitrariedad se hará más extrema. Las experiencias que voy a compartir no son las mejores. No me atrevería a decir tampoco que son exitosas. Solo son las que conozco, las que valoro, y, tal como deberían hacer muchas herramientas de IA, hago visible mi sesgo.

Para empezar, quiero comentar el desarrollo de un libro que estará disponible en 2025. Se trata de la obra titulada *Diálogo Interamericano sobre Inteligencia Artificial en Educación Científica*, promovido por la Mesa Interamericana de Diálogo por la Educación Científica, un conglomerado de asociaciones, redes e instituciones de toda América que trabajan por la mejora de la enseñanza de las ciencias. Empezar por esto me da tranquilidad. Es decir, en esa obra se podrán encontrar más de 20 casos de uso de la IA en educación en ciencias, desde los primeros años de la educación obligatoria hasta la formación de los doctores; por lo que los ejemplos que decidí no incluir en este apartado estarán recogidos en el libro.

Mi primer ejemplo es la propuesta de talleres para docentes sobre el desarrollo de simulaciones en química que llevamos adelante en el Ciclo Básico Común de la Universidad de Buenos Aires. Gracias al uso de herramientas como Claude 3.5, profesores de química de nivel medio y superior han podido generar simulaciones para el trabajo con sus estudiantes. Estas simulaciones no solo han permitido a los estudiantes visualizar procesos complejos, como reacciones químicas o configuraciones moleculares, sino también interactuar con escenarios virtuales que replican condiciones de laboratorio. Lo más interesante de este proceso es cómo las simulaciones han evolucionado: pasaron de ser representaciones estáticas a entornos dinámicos en los que se pueden modificar variables y observar los resultados en tiempo real. Aunque no puedo decir que hemos perfeccionado esta práctica, lo sorprendente es que

ahora los docentes son capaces de crear objetos digitales (tipo minotauro) que antes estaban vedados para ellos por no poder programar.

El siguiente ejemplo, es un proyecto que me enorgullece: el desarrollo de LETICIA, un asistente virtual (que corre en ChatGPT-4^o) diseñado por el Centro de Investigación y Apoyo a la Educación Científica (CIAEC) de la Universidad de Buenos Aires. LETICIA fue entrenado utilizando bibliografía seleccionada por el CIAEC, con el objetivo de apoyar a los docentes de química y otras ciencias naturales en la planificación de sus clases. La idea detrás de este asistente es sencilla pero poderosa: ofrecer una herramienta que permita a los profesores organizar contenidos, proponer actividades y sugerir recursos didácticos basados en enfoques actualizados. Si bien LETICIA todavía está en sus primeras etapas, ya ha demostrado ser útil para estructurar clases más integrales y fomentar la reflexión docente sobre sus prácticas. Su potencial, sin embargo, no está exento de desafíos, especialmente en términos de garantizar que la herramienta sea lo suficientemente flexible y contextualizada para adaptarse a diferentes realidades educativas.

Mi tercer ejemplo corresponde al uso de asistentes virtuales en laboratorios remotos de química. Esta iniciativa de la empresa LabsLand y del Laboratorio de Experimentación Remota de la Universidad Estatal a Distancia de Costa Rica está revolucionando la forma en que los estudiantes interactúan con las actividades experimentales. Estos asistentes, configurados por el docente, actúan como guías, proporcionando instrucciones paso a paso, resolviendo dudas en tiempo real y, en algunos casos, evaluando las decisiones de los estudiantes. Los laboratorios remotos, que inicialmente nacieron como una solución a la falta de acceso a instalaciones físicas, se han convertido en un espacio donde los estudiantes pueden experimentar, equivocarse y aprender con un nivel de acompañamiento que difícilmente se lograría sin la IA. Aunque el camino hacia una implementación más robusta y generalizada sigue siendo largo, estos laboratorios y sus asistentes virtuales están marcando una diferencia palpable en la enseñanza de la química.

Para finalizar, quiero resaltar un último caso: la reformulación del Modelo del Laboratorio Extendido para dar paso al Modelo LEIA (Laboratorio Extendido con Inteligencia Artificial). Se trata de una serie de principios de diseño de la enseñanza de las ciencias naturales tendientes a

recuperar el carácter experimental en entornos digitales. Este modelo incorpora el uso de IA en distintos niveles y prioriza el rol activo del estudiante dotándolo de autonomía y control sobre las herramientas tecnológicas para moverse en un entorno narrativo propicio para el aprendizaje de las ciencias. Esta reformulación muestra como las ideas de la didáctica de las ciencias deben repensarse a la luz de lo que ya no puedo entender sino como una revolución tecnológica. Lo mismo, seguramente, ocurrirá con líneas clásicas como la resolución de problemas, el Conocimiento Didáctico del Contenido o la Naturaleza de las Ciencias.

Todas estas iniciativas dan cuenta de cómo el advenimiento de las herramientas de IA puede impactar positivamente en la educación científica cuando es conducido por un profesorado crítico. Pero, a pesar de que termino el documento en un tono optimista, debo advertir que para alcanzar los supuestos beneficios para la educación en química o en ciencias, en términos generales se requiere maximizar el compromiso reflexivo y la actitud crítica. Hoy más que nunca, entre cables y algoritmos, el profesor debe alejarse de cualquier perspectiva tecnicista de su labor para abrazar su función, como ya dije, de pensador de la educación. Más aún, su función como actor clave, consciente, compresivo y empático, en el más humano de todos los empeños, la enseñanza.

Referencias

- [1] McCarthy, J. (1956). A proposal for the Dartmouth summer research project on artificial intelligence. Conferencia de Dartmouth.
- [2] Minsky, M. (1968). Semantic information processing. MIT Press.
- [3] Rich, E. (1983). Artificial intelligence. McGraw-Hill.
- [4] Winston, P. H. (1992). Artificial intelligence. Addison-Wesley.
- [5] Russell, S., & Norvig, P. (1995). Artificial intelligence: A modern approach. Prentice Hall.
- [6] Kaplan, A., & Haenlein, M. (2019). Siri, Siri in my hand, who's the fairest in the land? On the interpretations, illustrations, and implications of artificial intelligence. *Business Horizons*, 62(1), 15-25. <https://doi.org/10.1016/j.bushor.2018.08.004>
- [7] Pozo, J. I. (1996). La mente humana: Un enfoque desde la psicología cognitiva. Alianza Editorial.
- [8] Donald, M. (1991). *Origins of the modern mind: Three stages in the evolution of culture and cognition*. Harvard University Press.
- [9] Baker, T., & Smith, L. (2019). *Educ-AI-tion rebooted? Exploring the future of artificial intelligence in schools and colleges*. Nesta. Retrieved from <https://www.nesta.org.uk>
- [10] Woolf, B. P. (2010). *Building intelligent interactive tutors: Student-centered strategies for revolutionizing e-learning*. Morgan Kaufmann.
- [11] Nkambou, R., Bourdeau, J., & Mizoguchi, R. (2010). *Advances in intelligent tutoring systems*. Springer.
- [12] Holmes, W., Bialik, M., & Fadel, C. (2019). *Artificial intelligence in education: Promises and implications for teaching and learning*. Center for Curriculum Redesign.
- [13] Tegmark, M. (2017). *Life 3.0: Being human in the age of artificial intelligence*. Knopf.
- [14] Carbonell, J. R. (1970). AI in CAI: An artificial intelligence approach to computer-assisted instruction. *IEEE Transactions on Man-Machine Systems*, 11(4), 190–202. <https://doi.org/10.1109/TMMS.1970.299942>
- [15] Newell, A., & Simon, H. A. (1972). *Human problem solving*. Prentice-Hall.
- [16] Brown, J. S., & Burton, R. R. (1978). Diagnostic models for procedural bugs in basic mathematical skills. *Cognitive Science*, 2(2), 155–192. https://doi.org/10.1207/s15516709cog0202_4
- [17] Anderson, J. R. (1983). *The architecture of cognition*. Harvard University Press.
- [18] Schank, R. C. (1982). *Dynamic memory: A theory of reminding and learning in computers and people*. Cambridge University Press.
- [19] Papert, S. (1980). *Mindstorms: Children, computers, and powerful ideas*. Basic Books.
- [20] Luckin, R. (2017). *Enhancing learning and teaching with technology: What the research says*. UCL Institute of Education Press.
- [21] Idoyaga, I. J. (2023). The Extended Laboratory: new perspectives for the design of natural science education in digital contexts. *Innovaciones Educativas*, 25(Especial), 44–58.

QUÍMICOS MÁS IMPORTANTES Y SUS CONTRIBUCIONES DESDE LOS COMIENZOS DE LA QUÍMICA COMO CIENCIA HASTA FINES DEL SIGLO XX

Gabriela P. Cicileo¹

¹ UNIDEF (MINDEF – CONICET), Departamento de Materiales Avanzados y Proyectos Especiales (DEMAPE), CITEDEF, J. B. de La Salle 4397, 1603 Villa Martelli, Provincia de Buenos Aires, Argentina. Email: gicileo@citedef.gob.ar

Resumen:

En el presente trabajo se hace una recopilación de la contribución científica de la gran mayoría de los químicos más reconocidos, cuyos aportes marcaron un hito o un importante avance en la historia de las Ciencias Químicas.

El periodo abarcado es el que va desde el nacimiento de la Química como Ciencia, dejando atrás la Alquimia, en los siglos XVII y XVIII, hasta los descubrimientos de fines del siglo XX, algunos de los cuales son precursores de los nuevos campos de investigación que surgieron en el siglo XXI.

Se presenta un listado de nombres, que fueron fundamentales en el desarrollo y los avances alcanzados en las Ciencias Químicas durante el periodo mencionado. De todos modos, es sólo una selección y podrían mencionarse más químicos y sus contribuciones, además de los incluidos en el listado. También se debe tener en cuenta que todos los logros alcanzados han sido el resultado del trabajo de mucha gente.

Palabras clave: Químicos, avances, contribuciones, Ciencias Químicas

Abstract:

This paper compiles the scientific contributions of the most prestigious chemists, whose research marked a milestone or an important advance in the history of Chemical Sciences, was made.

The period covered is the one that goes from the birth of Chemistry as a Science, leaving Alchemy behind, in the 17th and 18th centuries, to the discoveries of the late 20th century, some of which are precursors of the new fields of research that emerged in the 21st century.

A list of names is presented, which were fundamental in the development and advances

achieved in Chemical Sciences during the mentioned period. In any case, it is only a selection and more chemists and their contributions could be mentioned, in addition to those included in the list. It should also be taken into account that all the achievements have been the result of the work of many people.

Keywords: chemists, advances, contributions, Chemical Sciences

Desde el siglo XVII hasta el año 2000:

El periodo abarcado es el que va desde el nacimiento de la Química como Ciencia, dejando atrás la Alquimia, en los siglos XVII y XVIII, hasta los descubrimientos de fines del siglo XX, algunos de los cuales son precursores de los nuevos campos de investigación que surgieron en el siglo XXI.

Se presenta un listado de nombres, que fueron fundamentales en el desarrollo y los avances alcanzados en las Ciencias Químicas durante el periodo mencionado. De todos modos, es sólo una selección y podrían mencionarse más químicos y sus contribuciones, además de los incluidos en el listado. También se debe tener en cuenta que todos los logros alcanzados han sido el resultado del trabajo de mucha gente.

Hacia fines del siglo XVIII la Química llega a convertirse en Ciencia, con los trabajos de Lavoisier, con la teoría atómico-molecular, la formulación de las primeras leyes de la materia y el establecimiento de un sistema de nomenclatura que puso orden en la descripción de las sustancias químicas conocidas. En la primera mitad del siglo XIX se asiste al nacimiento de áreas como la Química Orgánica, la Electroquímica y hay una búsqueda constante de nuevos elementos y determinación de sus pesos atómicos. Ya en la segunda mitad del siglo XIX, con la tabla de Mendeleiev, se logra ordenar los elementos

químicos en un sistema periódico por peso atómico creciente y por valencias, que permite observar una regularidad en las propiedades de los elementos. También en ese período, Bunsen y Kirchoff impulsan la espectroscopía y los trabajos de Pasteur dan origen a la Estereoquímica y a la Microbiología.

Al comenzar el siglo XX se creó el Premio Nobel de Química. Gran parte de los científicos que aquí se mencionan fueron galardonados con ese premio, incluso algunos pocos recibieron dos veces un Premio Nobel durante el siglo, como es el caso de Marie Curie (Física y Química), Frederick Sanger (dos veces el de Química) y Linus Pauling (Química y de la Paz). Sin embargo, también se citan algunos destacados científicos que nunca lo recibieron, como es el caso de Henry Moseley o Rosalind Franklin. Henry Moseley fue militar durante la primera guerra mundial y murió al ser alcanzado por un francotirador mientras estaba telegrafando una orden. Al no entregarse premios Nobel póstumos, no recibió el galardón al que estaba nominado por su importante contribución con la ley de Moseley, que establece la relación entre la longitud de onda de los rayos X emitidos por distintos átomos con su número atómico. Rosalind Franklin fue una cristalógrafa británica que descubrió las propiedades clave del ADN, lo que finalmente facilitó la descripción correcta de su estructura de doble hélice. Sin embargo, no fue nominada al Premio Nobel de Fisiología y Medicina de 1962 que recibieron J. Watson y F. Crick por el descubrimiento de la estructura del ADN. Esto se debió a desacuerdos con su colega Wilkins, quien les facilitó la información de su trabajo a Watson y Crick, sin mencionarla a Franklin. En los últimos años, ha recibido numerosos reconocimientos póstumos.

Por otra parte, aunque no se incluyen en el listado, es importante mencionar a algunos químicos que, a partir de sus invenciones, trabajando en empresas químicas, lograron sintetizar nuevos compuestos y desarrollar nuevos materiales que marcaron hitos, desde fines del siglo XIX y durante el siglo XX. Es el caso de J. W. Hyatt (Estadounidense, 1837-1920), inventor del celuloide, el primer termoplástico, con el cual se sentaron las bases del cine y la fotografía. A fines del siglo XIX, Felix Hoffmann (Alemania, 1868-1946), quien trabajaba para la compañía Bayer, logró sintetizar por primera vez una forma pura del ácido salicílico, que no tenía los efectos secundarios de productos similares obtenidos

anteriormente por otros investigadores. Este compuesto recibió el nombre de Aspirina y comenzó a comercializarse en 1899. En esa misma época, L. H. Baekeland (belga y estadounidense, 1863-1944), trabajando en una compañía que fabricaba productos fotográficos, inventó un papel, el papel *Velox*, que se podía revelar con luz artificial. Años más tarde, en 1907, haciendo reaccionar fenol y formaldehído, obtuvo un producto al que denominó *bakelita*, produciendo así el primer plástico totalmente sintético de la historia. Este hallazgo inició el desarrollo del polietileno, polipropileno, polimetacrilato, poliéster, poliamidas, etc., que pusieron en marcha la revolución de los plásticos y la búsqueda de nuevos materiales que incorporen mejores propiedades (mayor resistencia mecánica, mayor poder aislante térmico y eléctrico, menor peso, etc.). Es de destacar, entre ellos, la invención del nylon y el neopreno (neopreno) por W. H. Carothers (Estadounidense, 1896-1937), en la compañía DuPont en la década de 1930, y el descubrimiento del policarbonato, en 1955, por el estadounidense D.W. Fox, de la General Electric, quien desconocía que ya lo había descubierto, dos años antes, el alemán H. Schnell, de Bayer, trabajando de manera independiente.

A lo largo del siglo XX, las distintas áreas de la Química han generado nuevas visiones en muchos aspectos y en poco tiempo, se fueron comprendiendo y resolviendo una gran variedad de cuestiones. En las primeras décadas de ese siglo hubo, además, grandes avances en Física que fueron sentando las bases teóricas de la Química. La concepción de los átomos como unidades indivisibles cambió a partir de la interacción de la radiación electromagnética con la materia, con el descubrimiento 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. Ello contribuyó al progreso de una interdisciplina, la Química Física o Fisicoquímica, que con el tiempo se fue transformando en la base fundamental de todas las áreas de la Química [1, 2].

Por otra parte, se descubrieron nuevos elementos que fueron completando gradualmente la Tabla Periódica, entre los que se encuentran los gases nobles (Ramsay), el flúor (Moissan), el radio y el polonio (Curie), los elementos obtenidos artificialmente a partir de reacciones nucleares (Joliot-Curie), los elementos transuránicos o actínidos (Seaborg, McMillan). A esto se suma el descubrimiento de isótopos como el deuterio (Urey)

o los isótopos naturales descubiertos por Aston.

También se lograron importantes avances en el conocimiento del enlace químico, en el desarrollo de técnicas analíticas avanzadas y la determinación estructural de sistemas complejos (Pauling, Debye, Martin, Mulliken, Aston y Herzberg).

En cuanto a la Química de Coordinación de complejos inorgánicos, es importante el trabajo de Werner, que se consolida con los aportes a la Química de Compuestos Organometálicos de Fischer y Wilkinson y el estudio de las reacciones de complejos metálicos de transición de Taube, muchos de los cuales habían sido sintetizados y caracterizados por Werner [3, 4].

La Electroquímica, que comenzó al iniciarse el siglo XIX, fue evolucionando con las contribuciones de científicos como Davy y Faraday hasta las de los ganadores del Premio Nobel por sus trabajos en Termodinámica Electroquímica (Nernst), en Electroquímica Analítica (Heyrovsky), en la teoría de transferencia de electrones en sistemas químicos (Marcus) y en la síntesis de polímeros electroconductores (Heeger, MacDiarmid, Shirakawa) [5, 6].

Igualmente, se deben reconocer algunas contribuciones relacionadas con investigaciones bioquímicas y el estudio y caracterización de biomoléculas, que han hecho importantes aportes a la medicina y otras áreas que se desarrollaron a partir de ellas, como los análisis de secuenciación del ADN (H. Fischer, Sanger, Franklin, Hodgkin, Leloir).

El descubrimiento de los fullerenos (Kroto y col.), una nueva forma alotrópica del carbono, ha sido antecedente del descubrimiento de nuevas especies químicas y nuevos campos de investigación que se consolidan en el siglo XXI, como la Ciencia de Materiales y la Nanotecnología.

Finalmente, los trabajos pioneros acerca de las reacciones del ozono en la alta atmósfera significaron una nueva perspectiva y los inicios de la Química Atmosférica del siglo XXI (Molina, Crutzen, Sherwood).

1. **R. Boyle (Irlandés, 1627-1691):** Siendo él mismo un alquimista, que creía que la transmutación de los metales era posible, su labor teórico-experimental representó un verdadero punto de inflexión que marcó el

paso de la Alquimia a la Química. Es conocido por la ley que formuló junto al francés Mariotte (Boyle-Mariotte), que establece que el volumen de un gas varía inversamente con la presión del mismo. Publicó sus ideas en numerosos escritos, aunque es de destacar *El químico escéptico*, publicado en 1661. Avanzó hacia la visión moderna de los elementos como los constituyentes de los cuerpos materiales, y comprendió la diferencia entre las mezclas y los compuestos, realizando progresos considerables en las técnicas para la determinación de sus componentes.

2. **A. Lavoisier (Francés, 1743-1794):** Se lo considera el padre de la Química Moderna. Descubrió el rol del oxígeno en la combustión y en la respiración de los animales y las plantas. Demostró que la combustión es un proceso químico en el que la sustancia que se quema se combina con el oxígeno del aire, refutando la teoría del flogisto vigente. Postuló la ley de conservación de la masa en las reacciones químicas, es decir que la suma de la masa de los reactivos es la misma que la suma de la masa de los productos. En 1789 escribió el *Traité Élémentaire de Chimie*, considerado el primer libro de texto moderno de Química. Este tratado contenía una lista de algunos de los elementos conocidos (sustancias que no pueden continuar siendo descompuestas en otras más simples), que incluía oxígeno, nitrógeno, hidrógeno, fósforo, mercurio, zinc y azufre. Sentó las bases de la nomenclatura química y del concepto de elemento químico, además de la ya mencionada conservación de la materia en las transformaciones químicas. Es de destacar la colaboración de su esposa, Marie-Anne Pierrete Paulze, que tradujo del inglés las obras de científicos de la época, que resultaron un aporte invaluable para Lavoisier. Además, realizó las ilustraciones en sus escritos, entre ellas todos los grabados del *Traité Élémentaire de Chimie*. Desgraciadamente, Lavoisier murió en la guillotina durante la revolución francesa por acusaciones vinculadas con su trabajo como recaudador de impuestos, aunque algunos discípulos suyos continuaron su trabajo.

3. **A. Volta (Italiano, 1745-1827):** Fue quien obtuvo por primera vez corriente continua, utilizando un procedimiento electroquímico. Fabricó la primera pila eléctrica, constituida por láminas de cobre y cinc separadas por una

solución salina. En 1801 la presentó ante Napoleón, quien le concedió la medalla al mérito científico.

4. **M. Proust (Francés, 1754-1826):** Formuló, en 1799, la Ley de las Proporciones Definidas, una de las leyes estequiométricas, según la cual cuando se combinan dos o más elementos para dar un determinado compuesto, siempre lo hacen en una relación constante de masas.
5. **J. Dalton (Británico, 1766-1844):** Entre sus trabajos destacan el primer modelo atómico y su tabla de pesos relativos a los elementos. *Describió el daltonismo, ya que él mismo padecía un tipo de ceguera al color.* La más importante de sus investigaciones fue la Teoría Atómica, que propuso que la materia está formada por átomos indivisibles, que todos los átomos de un mismo elemento son iguales, que los átomos de los diferentes elementos se combinan para formar moléculas y los que se combinan para formar un compuesto lo hacen siempre en la misma proporción (Ley de las Proporciones Múltiples). También que la masa se conserva en las reacciones químicas (Lavoisier).
6. **J. L. Gay-Loussac (Francés, 1778 – 1850):** Postuló la ley de combinación de los gases, que enuncia que la relación de los volúmenes de dos gases que se combinan, en iguales condiciones de presión y temperatura, es una relación de números enteros.
7. **A. Avogadro (Italiano, 1776-1856):** Postuló que volúmenes iguales de distintos gases, bajo las mismas condiciones de presión y temperatura, contienen el mismo número de moléculas (Ley de Avogadro).
8. **J. Berzelius (Sueco, 1779-1848):** En 1807 clasifica los productos químicos llamando *orgánicos* a los que proceden de organismos vivos e *inorgánicos* a los que proceden de la materia inanimada. En 1818 publicó una tabla de pesos atómicos sorprendentemente precisa, usando como base la masa del oxígeno, ya que muchos elementos forman óxidos estables y bien definidos, y posteriormente la del hidrógeno igual a 1. En la versión presentada en 1826 (luego de 2 revisiones), los pesos atómicos relativos de casi todos los elementos eran muy cercanos a los utilizados hoy en día. Descubrió los elementos químicos torio, cerio y selenio y fue el primero en aislar el circonio, el silicio y el titanio. Además, sentó las bases de la notación Química Moderna dando a cada elemento un símbolo sencillo. Sugirió usar la letra inicial, o las dos primeras, del nombre en latín para representar los símbolos químicos ya que podían escribirse más fácilmente que otros signos. Por otra parte, al igual que H. Davy, fue uno de los que comenzó a experimentar sometiendo las más diversas sustancias a la pila de Volta.
9. **H. Davy (Británico, 1778-1829):** Al conocer los inventos de Volta, Davy se aplicó al uso de la electricidad para descomponer compuestos químicos, descubriendo así los procedimientos electrolíticos, mediante los cuales obtuvo potasio de la potasa fundida, sodio de la sal fundida y además aisló estroncio, magnesio, calcio y bario.
10. **M. Faraday (Británico, 1791-1867):** M. Faraday fue discípulo de H. Davy. Fue quien acuñó el término electrólisis y fue el primero en hablar de ánodo, cátodo, electrodos e iones. Dejó en claro que la electricidad se debía a iones que se desplazaban en la solución. Enunció leyes cuantitativas para la electrólisis, con las cuales se dispone de un método muy fiable de análisis cuantitativo y determinación de equivalentes químicos. También investigó la inducción electromagnética y desarrolló el concepto de líneas de fuerza alrededor de un imán.
11. **F. Wöhler (Alemán, 1800-1882):** Es el primero en aislar el aluminio, el boro, el berilio, el silicio y el titanio, pero su mayor hallazgo - que se produjo casualmente- consistió en la síntesis de la urea a partir de productos inorgánicos, causando estupor en el mundo científico. En aquel tiempo casi todos los químicos creían que era imposible sintetizar los productos generados por los seres vivos gracias a la *fuera vital* que poseían, idea que se remontaba a Aristóteles. La síntesis de la urea en 1828, marca la fecha de la muerte de la idea filosófica del vitalismo y el comienzo de la Química Orgánica.
12. **R. Bunsen (Alemán, 1811-1889) y G. Kirchoff (Prusiano, 1824-1887):** A Bunsen se lo conoce por ser el inventor del mechero que lleva su nombre, usado en todos los laboratorios de Química. Sin embargo, hizo

otros importantes aportes a la Química. Hacia 1860 comenzó a trabajar con Kirchoff y ambos fueron los fundadores del Análisis Espectroscópico. Demostraron que cada elemento emitía una luz coloreada característica al calentarlo hasta la incandescencia, que podía hacerse visible empleando un prisma de vidrio. Utilizando la espectroscopía descubrieron el cesio (Cs) y posteriormente el rubidio (Rb).

Kirchoff propuso las tres leyes empíricas que describen la emisión de luz por objetos incandescentes. La justificación de estas leyes fue dada más tarde por el Físico N. Bohr.

13. **L. Pasteur (Francés, 1822-1825):** Fue Químico y Biólogo, más conocido por sus aportes a la Medicina y a la Bioquímica, en especial por el descubrimiento de los gérmenes y la vacuna contra la rabia. Sin embargo, sus trabajos en ambos campos están muy ligados y fue la Química la que lo llevó a los descubrimientos microbiológicos.

Inició sus investigaciones estudiando los ácidos tartárico y racémico. Descubrió que los cristales del ácido tartárico giraban la luz polarizada hacia la derecha mientras que los del ácido racémico lo hacían hacia la izquierda. Así, descubrió las moléculas dextrógiras y levógiras, dando origen a la Estereoquímica.

Otro importante aporte de Pasteur es el proceso actualmente conocido como *Pasteurización*, con el cual mejoró la conservación de la leche. A partir de esto fue descubriendo que las enfermedades infecciosas se producían a causa de los gérmenes y que bastaba con matar a los gérmenes con productos químicos o altas temperaturas para terminar con la enfermedad. Podía hervirse el agua y tratarla químicamente, esterilizar instrumentos quirúrgicos, emplear conservantes, etc. De este modo, se pudo combatir sistemáticamente a las infecciones, aumentar la expectativa de vida y mejorar la conservación de los recursos.

14. **A. Kekulé (Aleman, 1829-1896):** Fue uno de los principales fundadores de la estructura química. Descubrió la tetravalencia del carbono y propuso la estructura del benceno, en el cual los átomos de carbono se unen formando cadenas cerradas o anillos. Además, en 1861 definió la Química Orgánica como la Química de los Compuestos de Carbono,

siendo pionero en ponerlo en el centro de esta rama científica.

15. **W. Perkins (Británico, 1838-1907):** Obtuvo, hacia 1853, en uno de sus experimentos, un precipitado color malva, derivado de la anilina, que fue el primer colorante sintético de la historia. Patentó su invento y al año siguiente, con la ayuda de su padre y su hermano montó una fábrica emprendiendo la producción en masa de colorantes sintéticos. La Química Orgánica de Síntesis se desarrolló aceleradamente a partir de la síntesis de colorantes. En 1858 Perkins sintetizó la glicina, consiguiendo el primer aminoácido obtenido en un laboratorio.

16. **D. Mendeleiev (Ruso, 1834-1907):** Su gran aporte fue ordenar los elementos químicos en una Tabla Periódica por peso atómico creciente. Esta agrupación por pesos atómicos y valencias permite observar una regularidad en las propiedades de los elementos. Además, intuyó que aún faltaban elementos por descubrirse, y por este motivo había huecos en la tabla, y señaló las propiedades que éstos debían poseer. La similitud entre las propiedades que había predicho con las encontradas para estos elementos confirmó la validez de su Tabla Periódica.

17. **H.L. Le Chatelier (Francés, 1850-1936):** Fue un Químico que se caracterizó por la aplicación de la Termodinámica a la Química. Es conocido por el Principio de Le Chatelier, según el cual si se realiza cualquier cambio en las condiciones de un sistema en equilibrio (temperatura, presión, concentración), éste tiende a desplazarse de forma que compensa la variación producida.

18. **S. Arrhenius (Sueco, 1859-1927):** Se le concedió el Premio Nobel de Química en 1903, uno de los primeros Premios Nobel otorgados en Química, por postular que los compuestos se disocian en iones en las soluciones electrolíticas (disociación electrolítica). La Teoría Iónica de Arrhenius confirma la conducción eléctrica de los electrolitos por el movimiento de los iones y permite comprender los fenómenos electroquímicos. También permite explicar las reacciones de las sustancias iónicas en solución acuosa, las reacciones ácido-base, etc.

19. **W. Ramsay (Británico, 1852-1916):** Recibió el Premio Nobel de Química de 1904 *por su descubrimiento de varios gases nobles y el lugar que ocupan en la tabla periódica. Junto con Lord Rayleigh, quien fue galardonado con el Premio Nobel de Física ese mismo año, descubrieron el argón.* Luego de este descubrimiento, Ramsay concluyó que este elemento junto con el helio, debían ser parte de una familia faltante del sistema periódico. A partir de allí, comenzó a buscar en forma sistemática los elementos faltantes en el nuevo grupo, encontrando finalmente, en 1898, esos elementos: neón, criptón y xenón.
20. **H. Moissan (Francés, 1852-1907):** Recibió el Premio Nobel de Química de 1906 *por haber aislado* por primera vez el flúor elemental. *Moissan se había dedicado al estudio de compuestos fluorados durante los primeros años de su carrera y sus estudios le mostraron que el flúor debía ser enormemente reactivo y muy oxidante.* Hacia mediados del siglo XIX, los tres halógenos naturales más pesados, cloro, bromo y yodo habían sido aislados y su química era aceptablemente comprendida. Estos elementos pueden obtenerse fácilmente por oxidación de los respectivos iones haluro utilizando un oxidante químico adecuado, pero la dificultad en obtener el flúor en estado elemental radicaba, esencialmente, en que no se conocía un oxidante químico capaz de oxidar el anión fluoruro (F⁻). Por esta razón, Moissan dedujo acertadamente, que una manera de producir la oxidación podría ser la vía electroquímica y realizar la reacción a bajas temperaturas. Basándose en estas dos ideas centrales, Moissan encontró finalmente la manera de generar flúor elemental.
21. **Ma. Curie (Polaca, 1867-1934):** Recibió el Premio Nobel de Física de 1903, conjuntamente con Pierre Curie y Henry Becquerel, *por el descubrimiento de la radiactividad, término que ella misma acuñó, y propiedades asociadas a este fenómeno.* Fue galardonada con el Premio Nobel de Química en 1911 *por el descubrimiento de los elementos radio y polonio, el aislamiento del radio y la caracterización de sus propiedades y compuestos más importantes.*
22. **E. Rutherford (Neozelandés, 1871-1937):** Propuso un modelo atómico, con el que probó la existencia del núcleo, en que se encuentra la carga positiva y la masa del átomo. Trabajó en radiactividad, descubriendo que ésta es causada por la ruptura de los átomos. Descubrió las partículas *alfa*, *beta* y *gamma* y encontró que la radiactividad iba acompañada de desintegración de los elementos. Por estas investigaciones pioneras le fue otorgado el Premio Nobel de Química en 1908.
23. **H. Moseley (Británico, 1887-1915):** Descubrió en 1914 que al hacer incidir un haz de rayos X sobre un elemento, los átomos de éste emiten rayos X con una frecuencia característica, que es función de su número de protones, es decir, de su número atómico. Este hallazgo le permitió rediseñar la Tabla Periódica en función de los números atómicos de los elementos, los que adquirieron, así, sentido científico. Enunció la ley de Moseley, una ley empírica que establece una relación sistemática entre la longitud de onda de los rayos X emitidos por distintos átomos con su número atómico.
24. **W. Ostwald (Alemania, 1853-1932):** Recibió el Premio Nobel de Química en 1909 *por su trabajo en catálisis y por sus investigaciones en los principios generales que gobiernan los equilibrios químicos y los rendimientos de las reacciones.* Formuló la ley de Ostwald, que rige los fenómenos de disociación en las disoluciones de electrolitos.
25. **V. Grignard (Francés, 1871-1935):** Ganó en 1912 el Premio Nobel de Química *por su descubrimiento del reactivo de Grignard y su contribución al progreso de la Química Orgánica.* En su tesis doctoral mostró su descubrimiento de los compuestos organomagnésicos (reactivos de Grignard), que eran un nuevo método de sintetizar elementos orgánicos complejos.
26. **A. Werner (Suizo, 1866-1919):** Recibió el Premio Nobel de Química en 1913 *por sus trabajos en la Química de Coordinación.* Propuso la configuración en octaedro de los complejos de los metales de transición, lo que hoy se conoce como geometría molecular octaédrica. Desarrolló las bases de los complejos metálicos modernos y fue uno de los primeros químicos inorgánicos en recibir un Premio Nobel.

27. **T. Richards (Estadounidense, 1868-1928):** Recibió el Premio Nobel de Química en 1914 *en reconocimiento por la determinación exacta de los pesos atómicos de casi treinta elementos*. Entre ellos, el de los elementos oxígeno, nitrógeno, azufre, plata, cloro, bromo, yodo, sodio y potasio, que constituyeron la base para las determinaciones de pesos atómicos de muchos otros átomos. Estas determinaciones las hizo partiendo de las leyes de Faraday. En 1914 descubrió un isótopo del plomo, acreditándose, de esta forma, como uno de los pioneros de la isotopía. Asimismo, realizó importantes trabajos en los campos de la termoquímica, la electroquímica y la calorimetría.
28. **F. Haber (Alemania, 1868-1934):** Recibió el Premio Nobel de Química en 1918 *por su descubrimiento de cómo obtener amoníaco (NH₃) haciendo reaccionar el nitrógeno atmosférico con hidrógeno, a presiones y temperaturas elevadas y en presencia de un catalizador. La importancia de su descubrimiento radica en que el amoníaco es una forma químicamente activa y fácilmente utilizable, a diferencia del nitrógeno del aire, que si bien constituye el 78% de la atmósfera, el mismo existe en forma de una molécula gaseosa diatómica poco reactiva. Junto con Carl Bosch desarrollaron el proceso de Haber-Bosch para fabricar amoníaco a escala industrial, un hito en la industria química con grandes consecuencias en la producción de fertilizantes y de munición.*
29. **W. Nernst (Alemania, 1864-1941):** Recibió el Premio Nobel de Química en 1920. Sus trabajos fueron fundamentales para establecer la moderna Fisicoquímica. Sus descubrimientos incluyen la ecuación de Nernst, que se utiliza para calcular el potencial del electrodo fuera de las condiciones standard. Trabajó en los campos de la Electroquímica, Termodinámica, Química del Estado Sólido y Fotoquímica.
30. **F. Aston (Británico, 1877-1945):** Inventó y desarrolló el espectrógrafo de masas. Recibió el Premio Nobel de Química en 1922 *por el descubrimiento, mediante la espectrografía de masas, de más de 200 isótopos estables naturales de elementos químicos no radiactivos.*
31. **H. Fischer (Alemania, 1881-1945):** En 1929 determinó la estructura del grupo hemo, una molécula esencial para la hemoglobina y otros compuestos biológicos. Este descubrimiento fue un hito en la comprensión de la Bioquímica y la función de esta molécula esencial para la vida. También logró sintetizar la clorofila. Esta síntesis fue un logro importante en la Química Orgánica, ya que permitió estudiar la estructura y función de esta molécula a un nivel más detallado. Estos dos descubrimientos llevaron a Fischer a ganar el Premio Nobel de Química en 1930.
32. **I. Langmuir (Estadounidense, 1881-1957):** Fue galardonado con el Premio Nobel de Química el año 1932 *por sus investigaciones en la Química de Superficie. Dedujo la isoterma de adsorción de Langmuir* en sus investigaciones sobre la cinética de las reacciones gaseosas y, más especialmente, de la velocidad de adsorción de las moléculas de los gases a bajas presiones.
33. **H. Urey (Estadounidense, 1893-1981):** Recibió el Premio Nobel de Química el año 1934 *por el descubrimiento del deuterio*. También trabajó en el campo de enriquecimiento de uranio (Proyecto Manhattan).
34. **I. Joliot-Curie (Francesa, 1897-1956) y F. Joliot-Curie (Francés, 1900-1958):** Recibieron el *Premio Nobel de Química del año 1935 por descubrir la radiactividad artificial*. Demostraron por primera vez, en sus investigaciones, la creación de radioisótopos artificiales mediante el bombardeo de átomos de boro, aluminio o magnesio con partículas alfa.
35. **P. Debye (Neerlandés y Estadounidense, 1894-1966):** En 1936 le fue otorgado el Premio Nobel de Química *por sus importantes contribuciones al conocimiento de la estructura molecular a través de sus investigaciones de momentos dipolares y estudios de difracción de rayos X y de electrones en moléculas gaseosas. Contribuyó al desarrollo del campo de la cristalografía de rayos X que, en aquel momento, estaba en sus inicios.*
Junto con su discípulo P. Scherrer desarrolló el método de polvos para analizar la estructura de muestras policristalinas mediante difracción

de rayos X.

36. **B. A. Houssay (Argentino, 1887-1971):** Médico, Farmacéutico y Profesor de la Universidad de Buenos Aires (UBA). Trabajó en el Instituto Bacteriológico Nacional (posteriormente Instituto Malbrán), como Director del Departamento de Sueros (1915 a 1919), donde conoció a su futura esposa, Dra. María Angélica Catán, Doctora en Química de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (UBA), quien influyó en los aspectos químicos de sus investigaciones. En 1919, fundó el Instituto de Fisiología en la Facultad de Medicina (UBA), que se convirtió en un Centro de Excelencia mundial. En 1944, creó el Instituto de Biología y Medicina Experimental (IByME). Junto con colaboradores y estudiantes realizó numerosas investigaciones en Endocrinología, Nutrición, Farmacología, Patología, hipertensión, diabetes y otras áreas de la Fisiología.

En la década de 1940, Houssay fue uno de los primeros científicos en el mundo en comprender la causa de la diabetes en base a sus investigaciones realizadas en Química Biológica y Fisiología. Descubrió que el hipotálamo, la glándula pituitaria (o hipófisis) y el páncreas interactúan para regular el metabolismo de la glucosa. Propuso que equilibrando las hormonas de estas glándulas se podría controlar la diabetes. El hipotálamo (región del cerebro) controla a la glándula hipófisis, la cual mantiene la homeostasis mediante la liberación de hormonas al torrente sanguíneo que regulan la actividad de otras glándulas endocrinas. Cuando el hipotálamo recibe señales químicas de las células nerviosas, reacciona activando a la hipófisis para que libere hormonas, como la hormona de crecimiento (GH) o somatotropina producida por la adenohipófisis que participa en la síntesis de proteínas y en el metabolismo de los hidratos de carbono (aumenta el azúcar en sangre) y las grasas. El hipotálamo y otras zonas del sistema nervioso central producen somatostatina (péptido de 14 aminoácidos) que es una hormona que afecta al páncreas, ya que inhibe la secreción de hormonas pancreáticas, como la insulina y el glucagón. Además, inhibe la secreción de hormonas pituitarias, como la hormona del crecimiento (GH) y la hormona estimulante de la tiroides (TSH). El páncreas produce insulina que es una hormona que regula los niveles de azúcar en sangre y estimula el metabolismo

de la glucosa, las proteínas y las grasas. El páncreas también produce glucagón que es otra hormona que eleva los niveles de azúcar en sangre. En personas con diabetes, el cuerpo no puede regular la cantidad de glucosa en la sangre. En personas con diabetes tipo 2, el páncreas no puede trabajar completamente y produce cada vez menos insulina.

Por sus descubrimientos sobre el rol de la hipófisis (en particular, las hormonas liberadas por el lóbulo anterior de la hipófisis o adenohipófisis) en el metabolismo de los hidratos de carbono y su relación con la diabetes fue galardonado con el **Premio Nobel de Fisiología y Medicina en 1947**, siendo el primer latinoamericano laureado en Ciencias.

Houssay propuso elaborar insulina en Argentina. Contactó al Dr. Alfredo Sordelli y al Dr. Venancio Deulofeu, quienes en 1923 lograron obtener insulina para pacientes del Instituto Malbrán. Recién en 2017, se produjo a escala insulina recombinante humana en Argentina, mediante un proyecto impulsado por el Dr. Eduardo Charreau.

37. **G. Seaborg (Estadounidense, 1912-1999) y E. McMillan (Estadounidense, 1907-1991):** Obtuvieron el Premio Nobel de Química en 1951 por sus descubrimientos en la Química de los Elementos Transuránicos. Entre los grupos de trabajo de ambos investigadores descubrieron y aislaron los elementos químicos del 93 al 102 (neptunio, plutonio, americio, curio, berkelio, californio, einstenio, fermio, mendelevio, nobelio) y el elemento 106, cuyo nombre es seaborgio en honor a Seaborg. Todos estos elementos son de origen sintético y pueden ser producidos por una variedad de reacciones de transmutación utilizando neutrones o partículas cargadas, incluyendo iones pesados. El concepto de *elemento actínido* fue desarrollado por Seaborg, quien fue el primero en proponer la Serie Actínida, que fijó la disposición actual de la Tabla Periódica.
38. **A. Martin (Británico, 1910-2002):** Junto con el Bioquímico R. Synge inventaron la *cromatografía*, un método de análisis que posibilita la separación de los aminoácidos en cualquier proteína de materia viva. Este descubrimiento les permitió ganar el Premio Nobel de Química del año 1952. Esta técnica se ha expandido a otros compuestos orgánicos y es actualmente de amplio uso en Química

Analítica y Bioanalítica, Química Orgánica, Química Biológica y Bioquímica Clínica, así como en laboratorios de empresas químicas. Por otra parte, en 1951, A. Martin, junto con su colaborador A. James publicaron un trabajo en el que se describía el primer cromatógrafo de gases. En los siguientes años, la cromatografía de gases se convertiría en la técnica cromatográfica más eficaz para analizar sustancias volátiles, siendo la industria petroquímica una de las más beneficiadas por este avance.

39. **F. Sanger (Inglés, 1918-2013):** En 1958 recibió el Premio Nobel de Química por su trabajo sobre la estructura de las proteínas, especialmente la de la insulina, ya que logró secuenciar todos los aminoácidos que componen la insulina. Esta fue la primera vez que se determinó la secuencia completa de una proteína. En 1980, ganó su segundo Premio Nobel de Química, junto a Paul Berg y Walter Gilbert, por sus contribuciones a la determinación de secuencias de bases en ácidos nucleicos, una técnica de secuenciación de ADN que aún se utiliza y que fue base fundamental para el desarrollo de la biología molecular y la ingeniería genética.
40. **J. Heyrovský (Checoslovaco, 1890-1967):** Recibió el Premio Nobel de Química en 1959 por su descubrimiento y desarrollo del método analítico de *polarografía*. En 1925 dio a conocer un aparato automático para el registro de curvas de intensidad de corriente-tensión, al que bautizó como polarógrafo y con el cual se reducía la duración de muchos análisis electroquímicos.
41. **R. Mulliken (Estadounidense, 1896-1986):** Fue galardonado con el Premio Nobel de Química en 1966 por sus trabajos concernientes al enlace químico y a la estructura electrónica de moléculas, por el método de orbitales moleculares.
42. **L. Pauling (Estadounidense, 1901-1994):** Recibió el Premio Nobel de Química en 1954. *Introdujo el concepto de orbitales híbridos* para describir la capacidad del átomo de carbono para formar cuatro enlaces, en los cuales las órbitas teóricas descritas por los electrones se desplazan de sus posiciones originales debido a la mutua repulsión. También identificó la presencia de orbitales

híbridos en la coordinación de iones o grupos de iones en disposición definida alrededor de un ion central. Las teorías de Pauling sobre el enlace atómico se encuentran recogidas en su obra *The Nature of Chemical Bond, and the Structure of Molecules and Crystals* (1939). *Además, para compuestos cuya geometría no se puede justificar mediante una única estructura, propuso el modelo de híbridos de resonancia, que contempla la estructura de la molécula como un estado intermedio entre dos o más estructuras susceptibles de ser dibujadas. Introdujo el concepto empírico de electronegatividad, como medida del poder de atracción de los electrones involucrados en un enlace de carácter covalente, por parte de un átomo.*

Por su oposición y campaña pública contra las pruebas nucleares recibió el Premio Nobel de la Paz en 1962.

43. **D. Hodgkin (Británica, 1910-1994):** Fue una cristalógrafa *considerada como una de las pioneras en el campo de la Cristalografía de Biomoléculas. Recibió el Premio Nobel de Química en 1964 por la determinación* de la estructura de la vitamina B₁₂. También participó en la determinación de la estructura de la penicilina. Asimismo, y después de más de 35 años de labor, fue capaz de descifrar definitivamente la estructura de la insulina.
44. **L. F. Leloir (Argentino, 1906-1987):** Médico, Químico y Profesor de la Facultad de Medicina y de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires. Descubrió la función de los nucleótidos de azúcares en la biosíntesis de los hidratos de carbono. Su investigación relevante sobre el metabolismo los hidratos de carbono dio paso a muchos descubrimientos sobre cómo las células adquieren energía. Leloir demostró que estos compuestos son precursoras de los carbohidratos complejos, como por ejemplo el glucógeno o el almidón, es decir se encargan de unir los azúcares más simples formando polisacáridos, y descubrió ciertas enzimas hepáticas relacionadas con la síntesis de la glucosa. También aisló una enzima que fermenta la galactosa, que denominó *cogalactowaldenasa* por producir en aquella una inversión de Walden. Esta coenzima, es llamada actualmente *uridindifosfato de glucosa (UDP-glucosa)* (sintetizada más tarde por el Premio Nobel inglés Alexander Todd).

La UDP-glucosa es un azúcar de nucleótido que es un intermediario clave en el metabolismo de los hidratos de carbono y es un precursor de glucógeno, de lipopolisacáridos y de glicoesfingolípidos. Participa en las reacciones de glicosiltransferasa en el metabolismo. Puede convertirse en UDP-galactosa y UDP-ácido glucurónico. Tras su hallazgo pudo determinar la causa de la enfermedad hereditaria (por lo tanto congénita; en cambio, no todas las enfermedades congénitas son hereditarias) denominada *galactosemia*, producida por tres defectos enzimáticos genéticos diferentes en el metabolismo de la galactosa. La galactosemia impide metabolizar la galactosa, que es un azúcar presente en la leche como parte de la lactosa. Las personas con galactosemia no toleran la lactosa, pero los síntomas son diferentes y más graves que los de la intolerancia a la lactosa. Fue reconocido con el **Premio Nobel de Química en 1970**. Realizó con éxito experimentos que revelaban las rutas químicas en la biosíntesis de azúcares en levaduras. Estas investigaciones fueron muy importantes, ya que podrían darse rutas similares en una gran variedad de otros procesos bioquímicos, entre ellos, la formación de paredes celulares en bacterias, la formación de polisacáridos y quitina (exoesqueleto de invertebrados), e incluso la síntesis de glicoproteínas en mamíferos.

45. **R. Franklin (Británica, 1920-1958):**

Descubrió las propiedades clave del ácido desoxirribonucleico (ADN), lo que finalmente facilitó la descripción correcta de la estructura de doble hélice del ADN. Realizó trabajos pioneros sobre las estructuras moleculares de los virus, a partir de los cuales, luego de que ella falleciera, un miembro de su equipo, el Dr. Aaron Klug, obtuvo el Premio Nobel de Química en 1982.

46. **G. Herzberg (Canadiense, 1904- 1999):** Le fue otorgado el Premio Nobel de Química en 1971 *por sus contribuciones al conocimiento de la estructura electrónica y a la geometría molecular, particularmente de los radicales libres. Herzberg fue, además, uno de los más renombrados espectroscopistas moleculares de su época a nivel mundial, llegando a transformar su instituto de investigaciones, en Ottawa, en centro de excelencia de esa disciplina.*

47. **G. Wilkinson (Británico, 1921-1996) y E. Fischer (Alemán, 1918-2007):** Recibieron el Premio Nobel de Química de 1973 *por sus trabajos pioneros, realizados independientemente, de la determinación de la estructura del ferroceno y por sus aportes a la Química de Compuestos Organometálicos, los llamados compuestos sandwich.* La obra de estos dos investigadores tuvo un fuerte impacto en el desarrollo de la Química Inorgánica. También G. Wilkinson, junto a F. Albert Cotton, publicó en 1962 en *Advanced Inorganic Chemistry*, un texto pionero y fundamental que transformó el modo de enseñar Química Inorgánica a nivel mundial (conocido como el Cotton y Wilkinson).

48. **W. Lipscomb (Estadounidense, 1919-2011):** Le fue otorgado el Premio Nobel de Química de 1976 *por sus estudios de la estructura de los boranos y sus enlaces atípicos, que esclarecieron la Química de los Compuestos de Boro, extremadamente rica y compleja.*

49. **H. Taube (Canadiense, 1915-2005):** Recibió el Premio Nobel de Química en 1983 *por sus estudios de mecanismos de las reacciones de transferencia de electrones en complejos de metales de transición.* Muchos de los complejos investigados por Taube habían sido sintetizados y caracterizados por A. Werner, quien fuera el iniciador de la moderna Química de Coordinación.

50. **C. Milstein (Argentino, 1927-2002):** Químico, egresado de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires (UBA), donde obtuvo su título de Doctor en Química por su tesis sobre enzimas, recibiendo un premio especial de la Sociedad Bioquímica Argentina. Fue seleccionado como investigador en el Instituto Nacional de Microbiología "Carlos Malbrán" y realizó su investigación postdoctoral como becario de la Universidad de Cambridge (Inglaterra) en 1960, bajo la dirección del Bioquímico Molecular Frederick Sanger en el Laboratorio de Biología Molecular.

Investigó sobre las inmunoglobulinas, cuyo estudio había iniciado en el Instituto Malbrán, para ahondar en el proceso por el cual la sangre produce anticuerpos (proteínas que combaten a los cuerpos extraños o antígenos). Junto al Biólogo alemán Georges Köhler desarrolló

una técnica para crear anticuerpos con idéntica estructura química, que denominó anticuerpos monoclonales. Los anticuerpos monoclonales son proteínas producidas en el laboratorio, que se utilizan por vía intravenosa para tratar enfermedades, como algunos tipos de cáncer. Actúan por unión a antígenos específicos, como los de las células cancerosas; ayudan al sistema inmunitario a reconocer y destruir a las células cancerosas; transportan medicamentos, toxinas o sustancias radiactivas directamente a las células cancerosas. El primer uso en terapia humana fue en 1982 para el tratamiento de un linfoma.

Por su trabajo en Química Biológica sobre el desarrollo de anticuerpos monoclonales, Milstein obtuvo el **Premio Nobel de Fisiología y Medicina en 1984**.

El descubrimiento de los anticuerpos monoclonales por Milstein configuró un hito en la historia de la Medicina e influyó en diversas especialidades, tales como la Inmunología, la Oncología, la Biotecnología, así como también en la industria. Su trabajo condujo al desarrollo de fármacos innovadores, como medicamentos para prevenir rechazos en trasplantes, la inmunización pasiva para el virus Sincicial Respiratorio, terapias para la leucemia linfocítica crónica, para el asma y para enfermedades inmuno-mediadas como la artritis reumatoidea, la psoriasis y la enfermedad de Crohn o la hidradenitis supurativa, y permitió mejorar las tasas de supervivencia y de calidad de vida de pacientes con cáncer.

En 1986 creó "*Medicorp Sciences*" junto al científico argentino Claudio Cuello y al empresario tecnológico argentino Martín Varshavsky, una empresa de biotecnología radicada en Montreal. Esta compañía fue pionera en el desarrollo de pruebas para la detección del SIDA, cáncer y antígeno prostático específico (PSA: *Prostate-Specific Antigen*).

En 1993, recibió el Premio Konex de Brillante junto al Dr. René Favaloro, por su legado a las Ciencias y Tecnología en Argentina. El 15 de diciembre de 1999 Milstein dio una de sus últimas charlas en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (UBA) a la que tituló: *La curiosidad como fuente de riqueza*. En enero de 2021, el gobierno argentino declaró al año 2021 como de Homenaje a Milstein en reconocimiento a su "profundo compromiso con la Ciencia".

51. **R. Marcus (Estadounidense de origen**

Canadiense, 1923): Marcus desarrolló su Teoría de Transferencia de Electrones en sistemas químicos, originalmente en 1956, para explicar la tasa de transferencia electrónica en las reacciones químicas, es decir la tasa a la que los electrones pueden moverse o saltar de una especie química (donante) a otra (aceptora). Esta teoría tuvo notable impacto e influencia sobre muy variadas áreas y procesos de la Química, ya que es aplicable a fenómenos tales como la captación de energía por parte de las plantas verdes, la quimioluminiscencia, la conductividad de polímeros, los fenómenos de corrosión, las síntesis electroquímicas y otras. Por sus contribuciones, le fue otorgado el Premio Nobel de Química en 1992.

52. **M. Molina (Mexicano, 1943-2020), P. Crutzen (Neerlandés, 1933-2021) y F. Rowland (Estadounidense, 1927-2012):** Recibieron el Premio Nobel de Química en 1995, *por sus trabajos en la Química de la Atmósfera*, realizando contribuciones pioneras para llegar a comprender como el ozono (O₃) se forma y se descompone a través de procesos químicos atmosféricos. Estos investigadores también demostraron cuán sensible es la capa de ozono atmosférica a la influencia de emisiones antropogénicas de diversos compuestos y sustancias químicas, como los clorofluorocarbonos (CFC). Esto llevó a la firma del Protocolo de Montreal, en 1989, en que las naciones firmantes se obligan a reducir gradualmente la utilización de CFC con la intención de alcanzar, en diez años, una reducción del 50% de su uso.

53. **H. Kroto (Británico, 1939-2016), R. Curl (Estadounidense, 1933-2022) y R. Smalley (Estadounidense, 1943-2005):** Recibieron el Premio Nobel de Química en 1996 *por el descubrimiento de los fullerenos, una nueva forma de carbono puro, que junto al grafito y al diamante constituyen las 3 variedades alotrópicas del carbono*. Fueron descubiertos en 1985 al realizar experimentos destinados a reproducir la química de las atmósferas de las estrellas gigantes rojas. Estas estructuras, compuestas por 60 átomos de carbono (C), se consideran uno de los primeros nanomateriales. Más tarde, en 1991, S. Iijima, un reconocido microscopista japonés, descubrió los nanotubos de C al observar al microscopio electrónico los electrodos de grafito tras la

síntesis de fullerenos, descubriendo especies químicas carbonadas de estructura tubular y dimensiones nanométricas, denominados actualmente nanotubos.

54. **A. Heeger (Estadounidense, 1936), A. MacDiarmid (Estadounidense de origen Neozelandés, 1927-2007) y H. Shirakawa (Japonés, 1936):** Recibieron el Premio Nobel de Química en 2000 *por el descubrimiento y desarrollo de los polímeros conductores*. Esta fue una contribución revolucionaria en el campo de la Química y los Materiales, pues desafiaba la creencia de que los polímeros, que son esencialmente plásticos, sólo podían ser aislantes eléctricos. Este descubrimiento abrió un campo completamente nuevo en la Ciencia de los Materiales, permitiendo la integración de materiales plásticos en aplicaciones electrónicas que antes estaban reservadas únicamente para materiales metálicos y semiconductores convencionales.
- Comenzando el nuevo siglo, en 2004, fue descubierto otro alótropo cristalino del carbono, que se suma a los fullerenos descubiertos por Kroto y col. Se trata del grafeno, que puede ser descrito como una lámina de grafito de espesor atómico. Es un material completamente nuevo, que se ha convertido en la actualidad en uno de los de mayor interés. Como conductor eléctrico se comporta prácticamente como el cobre y como conductor térmico supera prácticamente a todos los materiales conocidos. Es completamente transparente y tan denso que aún el helio, la molécula gaseosa más pequeña, no puede atravesarlo. En base a sus propiedades, aparecen como posibles una vasta serie de potenciales aplicaciones prácticas, como la generación de nuevos materiales y la manufactura de innovativos sistemas electrónicos. Por sus trabajos en torno a este nuevo material, el Premio Nobel de Física del año 2010 fue otorgado conjuntamente a los Físicos rusos A. Geim (Neerlandés-Británico nacido en Rusia que trabaja en Inglaterra, 1958) y K. Novoselov (Ruso-Británico, 1974).

Conclusión:

Anteriormente hemos visto como los desarrollos y descubrimientos de finales del siglo XIX y comienzos del XX han dado origen a la organización de la Química en subdisciplinas como Química Inorgánica, Orgánica, Analítica, Fisicoquímica. Sin embargo, en la actualidad las

áreas de investigación son cada vez más interdisciplinarias y aquellas divisiones rígidas comienzan a perder vigencia. En las últimas décadas, han surgido nuevas áreas científicas, en las cuales la Química se integra junto con otras disciplinas, jugando un rol fundamental. Entre éstas se destacan las Ciencias de los Materiales, las Ciencias Biomoleculares y las Ciencias Ambientales [1].

Podemos concluir que todos los logros mencionados, en estos más de dos siglos de evolución, le han dado a la Química un papel central, que es clave en la actualidad, en que estamos asistiendo a una gran revolución tecnológica.

Argentina es el único país de América Latina con recepción de Premio Nobel en Ciencias. No una vez, sino en tres oportunidades: B. Houssay, L. F. Leloir y C. Milstein que correspondieron a investigaciones relevantes en el área de la Química Biológica con aplicaciones biomédicas, [además de dos Premios Nobel de la Paz: C. Saavedra Lamas (1936) y A. Pérez Esquivel (1980)].

Referencias bibliográficas:

- [1] Blesa M.A., *Ciencia e Investigación* **2023**, 73, no 4, 13-22.
- [2] Arvía A.J., *The Journal of the Argentine Chemical Society* **2005**, 93, no 4/6, 43-79.
- [3] Baran E.J., *Anales de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales* **2013**, 65, 5-9.
- [4] Baran E.J., *Los Premios Nobel en Química Inorgánica*, 1a. Ed., Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Buenos Aires, 2015, pág. 1-140.
- [5] Martín Sánchez M.T., Martín Sánchez M., *Anales de la Real Sociedad Española de Química* **2001**, 41-47.
- [6] Poveda Ramos G., *Colección Memoria de Ingenieros*, Fondo editorial ITM, 1a. Ed., Medellín, 2010, pág. 1-139.

ARTÍCULOS TÉCNICOS

ATMÓSFERA, PEROXINITRATOS Y HUMEDAD

Gustavo A. Arquiello y Fabio E. Malanca

INFIQC- Dpto de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria, Córdoba.

E-mail: gaac.isea@gmail.com

Resumen:

En la atmósfera ocurren una vasta cantidad de procesos químicos. Sus estudios han dado origen a la Química Atmosférica. La degradación de compuestos orgánicos volátiles y semivolátiles es uno de los temas más relevantes. En nuestro laboratorio hemos realizado minuciosos estudios haciendo foco en la síntesis, identificación y caracterización de peroxinitratos orgánicos, siendo pioneros en el estudio de la estabilidad de estos últimos en atmósferas húmedas.

Abstract:

A great number of chemical processes occur in the atmosphere. The study of these processes has given rise to Atmospheric Chemistry. The degradation of volatile and semi-volatile organic compounds is one of the most relevant topics. In our laboratory we have carried out detailed studies focusing on the synthesis, identification and characterization of organic peroxy nitrates, being thus pioneers in the study of the stability of the latter in humid atmospheres.

Introducción

La atmósfera se define como la capa gaseosa que rodea a un cuerpo celeste, y es retenida por éste. En algunos de ellos es muy tenue y en otros es muy densa. Las composiciones químicas son variadas, aunque en general en todas ellas prevalecen moléculas de estructuras sencillas como hidrógeno, helio, vapor de agua, dióxido de carbono, etc.

La atmósfera terrestre es única para el sostenimiento de la vida tal como la conocemos; pero lo que respiramos hoy no es lo mismo que había en un remoto principio. De hecho hace unos cuantos millones de años atrás (varios, muchos), nuestra atmósfera era ligeramente reductora pues luego de la acreción de la nebulosa solar para formar la Tierra, comenzó el “outgassing”, o sea la expulsión de los gases atrapados que dieron lugar a la atmósfera primigenia donde el contenido masivo de CO₂ fue en gran medida a formar los depósitos rocosos de carbonatos. El H₂O mayormente se condensó para formar los océanos, y el N₂ siguió siendo el gas “casi inerte” quedando

en la fase gaseosa junto a algo de amoníaco y metano (NH₃ y CH₄ respectivamente) que le dieron ese leve carácter reductor. El O₂ comenzó a formarse por reacciones fotoquímicas a partir precisamente de los precursores CO₂ y H₂O [1], y fue acumulándose paulatinamente a medida que los átomos de H (que se producían en las reacciones fotoquímicas) lograban escapar al espacio exterior. Esto permitió a su vez que se formara ozono y redundó en la aparición de vida, pues los organismos vivos no pudieron haber habitado la tierra hasta que la concentración de ozono alcanzara niveles que aseguraran la protección de la radiación solar ultravioleta [1]. Así fueron pasando millones de años con las concentraciones de oxígeno y ozono creciendo lentamente, y apareciendo distintos organismos vivos, hasta que se alcanzaron los niveles actuales hace aproximadamente 300 millones de años. La presencia de ambos gases confirió a la atmósfera un carácter oxidante, a diferencia de los comienzos reductores.

La atmósfera actual está formada por N₂ (78%), O₂ (21%) y por otros gases llamados traza que representan el restante UNO POR CIENTO. La **Tabla 1** presenta la concentración de dichos gases en partes por billón en volumen [2].

Constit.	Concentración (ppbv)
N ₂ O	270
NO	0,5
NO ₂	1
H ₂ S	0,05
NH ₃	4
H ₂	500
CH ₄	1500
SO ₂	1
CO	190
CO ₂	322
O ₃	40
Tomado de referencia [2]	

Tabla 1: Concentración troposférica de constituyentes traza.

¿Y cómo es la distribución de estas especies en la atmósfera?..... Ésta depende de las características (peso molecular, reactividad, capacidad para absorber la luz, etc.) de las mismas. Por ejemplo, las moléculas más livianas (H_2 , He) aumentan su concentración relativa a medida que aumenta la altura.

La **Figura 1** muestra a la izquierda el peso molecular promedio y a la derecha, la variación de la presión en función de la altura [2]. Puede verse que en los primeros 10 km, la distribución es uniforme y que a grandes alturas predominan las especies más livianas.

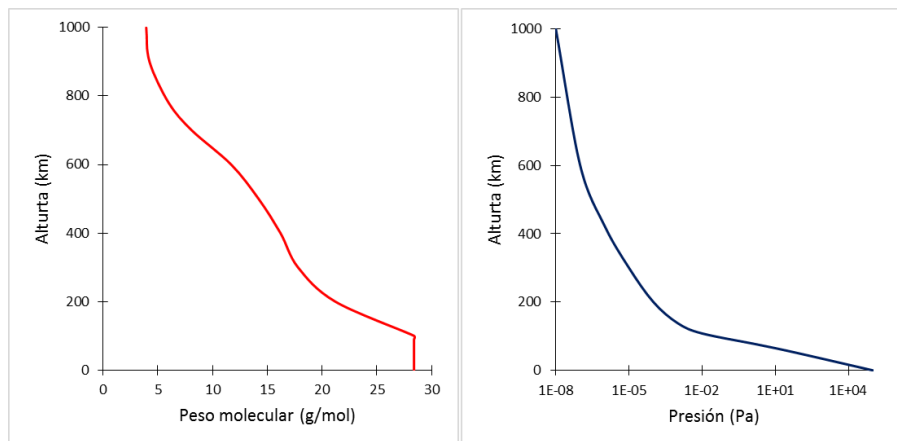
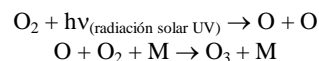


Figura 1: Tomada de Referencia [2].

En general, siendo que la presión disminuye en forma exponencial con la altura, se esperaría que la concentración de todas las especies atmosféricas también lo hagan así. Aquellas que reaccionan muy lentamente o no son afectadas sustancialmente por la luz solar (tienen tiempos de vida más largos) están uniformemente (tanto latitudinal como longitudinalmente) distribuidas en la atmósfera, y su concentración puede decirse que es relativamente homogénea. Por otra parte, aquellas moléculas que reaccionan más rápidamente, desaparecen en menos tiempo de la atmósfera, y por lo tanto no están uniformemente

distribuidas, sino que se encuentran en mayor concentración en los lugares en los que son generadas o emitidas.

Sin embargo, hay una especie que por lo particular de su formación tiene una distribución especial. Es el ozono, que se forma por la fotólisis del oxígeno



y cuya distribución se presenta en la **Figura 2**.

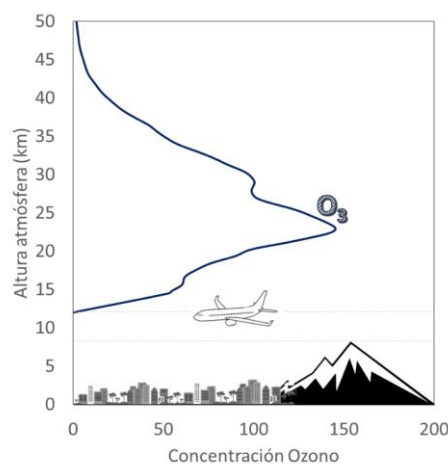


Figura 2: Perfil atmosférico de la concentración de ozono (Gentileza de J. Salas).

Una explicación simplista sería que a bajas alturas (desde la superficie terrestre hasta 10-12 km),

donde la concentración de O_2 es sustancial, muy pocas moléculas son fotolizadas pues la radiación

solar que llega es poca y por ende la concentración de átomos de oxígeno que se necesitan para formar ozono es baja. A mayores alturas la radiación solar se incrementa en intensidad y en energía; pero la concentración de oxígeno disminuye. Esto da como resultado que en ambos extremos (por debajo de 12 km y por encima de 50 km), la producción de ozono es baja. Entre ambas alturas se dan las condiciones ideales para que la concentración de ozono sea máxima, dando la conocida forma de campana para la distribución vertical de ozono.

En cuanto a los componentes traza no naturales (es decir, los de origen antropogénico), la cantidad o la concentración que alcancen, así como su distribución será evidentemente el resultado de la interacción de factores tan dispares como las velocidades de emisión, la reactividad química que presenten frente a las condiciones “oxidantes” de la atmósfera, sus propiedades fotoquímicas, sus afinidades por el agua, entre otros.

Es bien sabido que, a partir de la primera máquina de vapor (inicio de la revolución industrial), hemos estado quemando combustibles (inicialmente madera, luego petróleo) para alimentar nuestra insaciable necesidad de energía. Ello llevó a que la concentración de CO_2 en la atmósfera se incrementara desde la “típica” cantidad de 322 a las 428 ppm medidas el 31 de Mayo de 2024. Es decir, un incremento del 33% en 65 años a partir de un valor que NO HABÍA SIDO SOBREPASADO durante los últimos 800.000 años. De allí que tenemos un gran problema con el calentamiento global, aunque no es el centro de nuestra discusión.

Química y fotoquímica de especies reactivas de nitrógeno

Hay muchas, muchísimas otras especies que se emiten a la atmósfera. Pensemos simplemente en los gases de escape de la flota vehicular presente. En un motor de combustión, el combustible (nafta o gasoil) se quema en el cilindro con el oxígeno del aire para producir la impulsión del vehículo.

Evidentemente, si se quema, la temperatura alcanza valores altos, suficientes para que el 71 % del aire que ingresa al cilindro (o sea, el “inerte” nitrógeno) comience a ser reactivo y también reaccione con oxígeno dando como resultado la formación de NO y NO_2 , los óxidos de nitrógeno responsables de buena parte de la contaminación del aire. Estas especies son particularmente interesantes en química por la sencilla razón de ser moléculas con un electrón desapareado, o si se quiere, un radical libre. La inmensa mayoría de las

especies químicas son moléculas que deben su estabilidad a que tienen sus electrones apareados. Por eso, por ejemplo, el hidrógeno se encuentra naturalmente como molécula diatómica, H_2 , y el helio, He , como gas monoatómico. Aparearse es estabilizarse.

Dicho esto, nos deberíamos preguntar ¿qué hacen los óxidos de nitrógeno cuando son emitidos en una atmósfera de carácter oxidante?.....

Supongamos que junto con los óxidos de nitrógeno, por el escape del vehículo, sale un número de moléculas del combustible que no se quemaron y comienzan a esparcirse por el aire. En algún momento las especies encargadas de “limpiar” la atmósfera (particularmente el radical HO^\bullet que ha sido justamente llamado “el detergente” de la atmósfera) reaccionarán con el combustible iniciando su degradación.

Todo comienza cuando un hidrógeno “lábil” del combustible en particular es atacado por el radical HO^\bullet que quiere “estabilizarse” formando H_2O y deja otro radical (R^\bullet). Entonces ¿qué puede hacer (R^\bullet) en una atmósfera oxidante?: ¡Pues reaccionar con Oxígeno!, que es la especie reactiva MÁS abundante en la cercanía de ese radical (el 78% restante, o sea N_2 , es inerte a temperatura ambiente) y se oxida a RO_2^\bullet , que sigue siendo un radical con un electrón desapareado que deambula buscando un alma gemela (otro radical) para estabilizarse. Y si hablamos de atmósferas contaminadas, lo encuentra. Es el NO_2 y el producto resultante es un peroxinitrato, una molécula que ahora tiene sus electrones apareados y por tanto no es particularmente reactiva. Tan poco reactiva es que generalmente es transportada por los vientos y puede encontrarse en lugares alejados de las fuentes de contaminación, donde desafortunadamente pueden dar lugar a un proceso de contaminación secundaria por el mero hecho de la existencia de la reacción inversa, o sea la descomposición en NO_2 y el radical RO_2^\bullet . Tengamos presente este mecanismo pues volveremos a mencionarlo luego.

Por supuesto, no sólo moléculas de combustible sin quemarse se emiten a la atmósfera. Hay una miríada de sustancias que la naturaleza (terpenos de los árboles y bosques, por ejemplo), y las actividades humanas (agricultura, desechos de la industria, pinturas, solventes, etc, etc, etc) emiten a la atmósfera y que reciben el nombre genérico de Compuestos Orgánicos Volátiles, COVs. Son todos estos COVs los que comienzan un camino

de degradación en la atmósfera, generalmente iniciado por el radical HO• que se muestra en la

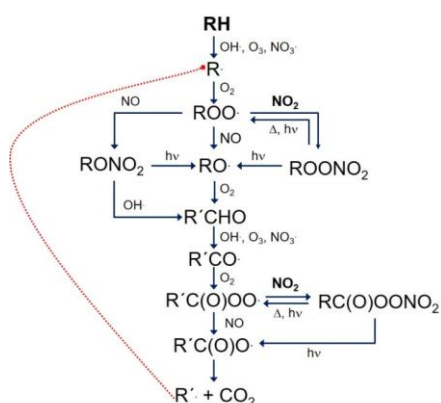


Figura 3: Mecanismo general de degradación atmosférica de un compuesto conteniendo al menos un “hidrógeno lábil”.

El arquetipo de los peroxinitratos es el peroxiacetilnitrato, $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{O}_2\text{NO}_2$ o PAN, el más estudiado en la familia de estos compuestos. Fue identificado por primera vez en el fenómeno de smog fotoquímico ocurrido en Los Ángeles en 1943 [3]. Si bien el PAN es el peroxinitrato más abundante en la atmósfera, la comunidad científica ha detectado, identificado y caracterizado otros peroxinitratos presentes en menor concentración como: nitratos de peroxipropionilo (PPN, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{O}_2\text{NO}_2$), de peroxibenzoílo (PBzN, $\text{C}_6\text{H}_5\text{C}(\text{O})\text{O}_2\text{NO}_2$), de peroxi-*n*-butilo (PnBN, $\text{C}_3\text{H}_7\text{C}(\text{O})\text{O}_2\text{NO}_2$), de peroximetacrilóilo (MPAN, $\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{O})\text{O}_2\text{NO}_2$) y de peroxiacrilóilo (APAN, $\text{CH}_2=\text{CHC}(\text{O})\text{O}_2\text{NO}_2$) [4a-b]. En nuestro grupo hemos estudiado las características fisicoquímicas de muchos de ellos y en particular de algunos peroxinitratos fluorados, o sea, los que provienen de compuestos clorofluorocarbonados (CFCs) e hidroclofluorocarbonados (HCFCs) que fueron las moléculas que se utilizaron como refrigerantes en reemplazo del amoníaco empleado en refrigeración que tantos accidentes fatales producía debido a su toxicidad.

Estos CFCs son compuestos con tiempos de vida suficientemente largos (100 a 300 años), es decir pueden estar presentes mucho tiempo en la atmósfera, lo que llevó a que pudieran alcanzar la estratósfera, donde son destruidos por la radiación solar liberando átomos de cloro que destruyen la capa de ozono. Buena parte de la comunidad científica se abocó entonces a la búsqueda de reemplazantes de estos compuestos que pudieran ser destruidos en la tropósfera y no pudieran llegar a la estratósfera, o sea, que fueran destruidos antes que la radiación solar estratosférica liberara los átomos de cloro presentes en ellos. Surgieron así otras familias de compuestos fluorados, los compuestos hidroflocarbonados (HFC) y los

Figura 3 y que llevan a la formación de peroxinitratos.

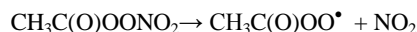
hidrofluoroéteres (HFE) que no contienen cloro y que reaccionan más rápidamente que los CFCs debido a la presencia de algún “hidrógeno lábil” en su estructura. Por tanto, estos compuestos fluorados comenzaron a ser utilizados a escala industrial, y por consiguiente se inició el estudio de la degradación atmosférica de todos ellos. Estas moléculas también, al ser degradadas en ambientes contaminados, pueden dar lugar a la formación de peroxinitratos y lo que hemos establecido en nuestros estudios en particular es que los derivados fluorados resultan más estables que los hidrogenados.

Para muchos peroxinitratos (PAN, PPN, PnBN, PBzN, MPAN, APAN, CF_3OONO_2 , $\text{CF}_3\text{C}(\text{O})\text{OONO}_2$, $\text{FC}(\text{O})\text{OONO}_2$, $\text{ClC}(\text{O})\text{OONO}_2$) hemos determinado propiedades como absorción ultravioleta e infrarroja, estabilidad térmica y fotoquímica y particularmente los tiempos de vida atmosféricos [5a-c] [6] [7a-d].

En general puede decirse que los tiempos de vida de los peroxinitratos están controlados por el proceso de descomposición térmica a bajas alturas y por el proceso de ruptura fotoquímica a mayores alturas. Esto es consecuencia de la absorción de luz característica de estas sustancias pues, si bien los peroxinitratos son más estables a temperaturas más bajas (y en esto, la disminución de la temperatura con la altura favorecería la estabilidad), la disponibilidad de longitudes de onda menores a 330 nm (que no llegan a la baja tropósfera como consecuencia de la existencia de la capa de ozono) dan cuenta de su descomposición.

De cualquier modo, la estabilidad térmica de los peroxinitratos depende de su estructura. Aquellos que poseen un grupo carbonilo adyacente al enlace peroxídico son más estables que los que no lo tienen. Así el CH_3OONO_2 tiene un tiempo de vida atmosférico de 1 segundo [8], en tanto que el del $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{OONO}_2$ va de días a semanas o meses [9]. Precisamente por esto, el PAN, (que da cuenta del 75-90% de los peroxinitratos en la tropósfera, y es una especie fitotóxica responsable de la formación de ozono troposférico originada por la oxidación de COVs emitidos -acetaldehído, metilglixal, acetona, isopreno y terpenos-) es una especie reservoria, porque puede formarse en regiones contaminadas con dióxido de nitrógeno, y ser transportado por corrientes de aire ascendentes a mayores alturas donde la temperatura es más baja, y consiguientemente estabilizarse. Una vez que ocurre ésto, puede ser transportado a grandes distancias de su lugar de

formación, donde puede descomponerse, liberando radicales peróxido y dióxido de nitrógeno nuevamente en lo que se conoce como contaminación secundaria a través de la reacción:



Sin embargo hay otra especie muy ubicua que tiene una distribución desafiante por lo variable tanto espacial como temporalmente, además de representar una verdadera complicación en los estudios de laboratorio. Es el agua, especie que si se puede, se evita a toda costa en los estudios experimentales, al punto que la definición de atmósfera "standard" que hemos utilizado [2] y que aún hoy se usa no la tiene en cuenta. Del mismo modo, la inmensa mayoría de los trabajos experimentales que hay acerca de la degradación atmosférica de una miríada de sustancias (llevadas a cabo en los reactores de numerosos laboratorios del mundo), han sido realizados en total ausencia de agua, es decir considerando que la atmósfera "standard" es seca.

Se dará cuenta el lector que nuestro interés por el estudio de los peroxinitratos sólo podemos considerarlo completo si se analiza qué ocurre en presencia de agua vapor, como la que encontramos a diario, y que informan los Servicios Meteorológicos como la humedad relativa ambiente.

El primer estudio de la reactividad del peroxiacetilnitrato con agua realizado fue mediante cálculos computacionales sin la complicación experimental del laboratorio. Li y Francisco [10] calcularon la reactividad del PAN con agua en fase gaseosa, y concluyeron que el PAN forma complejos estables de Van der Waals con el agua ($\text{PAN} \cdot n\text{H}_2\text{O}$), y que estos llevaban a la formación de ácido acético:



Sin embargo, pasaron varios años hasta que dichos estudios fueron contrastados por resultados experimentales, que fueron aportados por nuestro grupo. Nuestros estudios dieron cuenta que el PAN reacciona con agua tanto en forma homogénea como heterogénea, que no se forma ácido acético como producto de reacción, sino nitrato de metilo (CH_3ONO_2) dióxido de carbono y ácido nitroso [11] y que la presencia de agua aumenta la velocidad de degradación. Dichos estudios implicaron técnicas experimentales de espectroscopía infrarroja, apoyadas por cálculos computacionales y simulaciones cinéticas.

Respecto a la velocidad de degradación, la **Figura 4** es clara [11] en reflejar no sólo el cambio en las velocidades sino que también permite inferir acerca del mecanismo de reacción. Analicemos:

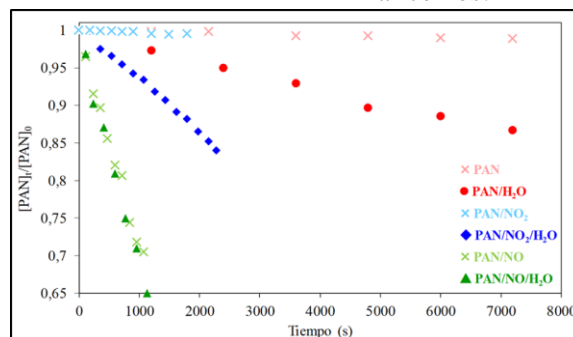
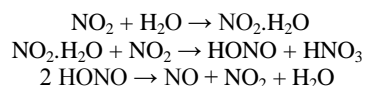


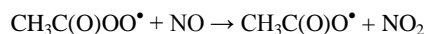
Figura 4: Degradación del PAN para diferentes mezclas de reacción (Gentileza de J. Salas).

La concentración de PAN sólo en el reactor (cruces rosas) no se modifica sustancialmente, por lo que, es estable en el tiempo; mientras que si se agrega agua (círculos rojos) la degradación aumenta. Si además se agrega NO_2 al reactor, la degradación (rombos azules) aumenta aún más. Hasta aquí, uno supondría que el NO_2 es el responsable. Sin embargo, si sólo se agrega NO_2 sin agua, la degradación es la que representan las cruces celestes. O sea que la combinación NO_2 - H_2O algo hace. Por último, si se agrega NO al PAN la degradación es mucho mayor (cruces verdes) y casi independiente de que se agregue H_2O (triángulos verdes). Una explicación muy somera nos dice que [11 y Ref. citadas allí] el NO_2

forma un complejo con el agua y que con más NO_2 se forman ácido nítrico y ácido nitroso, que luego se reconvierte en agua, NO_2 y más importante NO .



¿Por qué es tan importante el NO ?.....porque reacciona prácticamente titulando cada radical peróxido que se forme por disociación



lo que hace que la velocidad de degradación sea la correspondiente a los triángulos verdes del gráfico. A su vez el radical $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{O}^\bullet$ se descarboxila (pierde CO_2) y da como resultado la formación del nitrato de metilo que es el producto que se observó.

Otra diferencia sustancial en la estructura de los peroxinitratos que tiene impacto sobre el tiempo de vida es la presencia de átomos de flúor en la molécula. Si se comparan los tiempos de vida del CF_3OONO_2 con los del CH_3OONO_2 , el primero es mucho más estable que el segundo [5a], siendo ésta una característica general de los compuestos fluorados frente a los hidrogenados [12]. En nuestro grupo hicimos extensivo el estudio de degradación de CF_3OONO_2 y $\text{CF}_3\text{C}(\text{O})\text{OONO}_2$ en presencia de agua. Los resultados mostraron que la estabilidad del primero no se ve modificada por la presencia de agua en fase gaseosa, ya que no forma complejos de Van der Waals en tanto que la del segundo sí se ve afectada, llevando a la formación de ácido trifluoroacético, $\text{CF}_3\text{C}(\text{O})\text{OH}$ [13].

Conclusión

La complejidad de la atmósfera es tal que cada reacción en particular puede estudiarse en diferentes condiciones y seguramente los resultados que se obtengan variarán. Durante muchos años, la complicación que trae el agua hizo que miles de trabajos se hicieran sin considerar la presencia de agua, tendencia que está siendo revertida en la actualidad pues es mandatorio conocer qué pasa en la realidad y no sólo en un reactor de laboratorio.

Agradecimiento

Los autores desean agradecer especialmente a Juana Salas por facilitarnos las Figuras que obran en su Trabajo Doctoral.

Referencias

- [1] R.P. Wayne. *Chemistry of Atmospheres*. 2nd Edition, Oxford University Press, Oxford, 1991.
- [2] *U.S. Standard Atmosphere 1976*, document 19770009539.pdf, US Government Printing Office, 1976.
- [3] E.R. Stephens, P.L. Hanst, R.C. Doerr, W.E. Scott. *Ind. Eng. Chem.* 1956, 48, 1498-1504.
- [4a] B.W. Lafranchi, G.M. Wolfe, J.A. Thornton, E.C. Browne, K.E. Min, P.J. Wooldridge, M. McKay, A.H. Goldstein, J.B. Gilman, D. Welsh-Bon, W.C. Kuster, J.A. Degouw, J. Mao, Z. Chen, X. Ren, W.H. Brune, R.C. Cohen, In: American Chemical Society - 237th National Meeting and Exposition, ACS 2009, Abstracts of Scientific Papers (ACS National Meeting Book of Abstracts).
- [4b] W. Zheng, F.M. Flocke, G.S. Tyndall, A. Swanson, J.J. Orlando, J.M. Roberts, L.G. Huey, D.J. Tanner. *Atmos. Chem. Phys.* 2011, 11, 6529–6547.
- [5a] F.E. Malanca, M.S. Chiappero, G.A. Argüello, T.J. Wallington. *Atmos. Environ.* 2005, 39, 5051-5057.
- [5b] F.E. Malanca, M.S. Chiappero, G.A. Argüello. *J. Photochem. Photobiol.* 2006, 184, 212-215.
- [5c] F.E. Malanca, M.M. Manetti, M.S. Chiappero, P. Gallay, G.A. Argüello. *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry* 2009, 205, 44-50.
- [6] M.D. Manetti, F.E. Malanca, G.A. Argüello. *Int. J. Chem. Kin.* 2008, 40 (12), 831-838.
- [7a] A.G. Bossolasco, F.E. Malanca, G.A. Argüello. *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry* 2011, 221, 58-63.
- [7b] A.G. Bossolasco, F.E. Malanca, G.A. Argüello. *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry* 2012, 231, 45-50.
- [7c] A.G. Bossolasco, F.E. Malanca, M.A. Burgos Paci, G.A. Argüello. *J. Phys. Chem. A* 2012, 116, 9904-9910.
- [7d] A.G. Bossolasco, J.A. Vila, M.A. Burgos Paci, F.E. Malanca, G.A. Argüello. *Chem. Phys.* 2014, 441, 11–16.
- [8] A. Bahta, R. Simonaitis, J. Heicklen. *J. Phys. Chem.* 1982, 86, 1849
- [9] I. Bridier, F. Caralp, H. Loirat, R. Lesclaux, B. Veyret, K. H. Becker, A. Reimer, F. Zabel. *J. Phys. Chem.* 1991, 95, 3594.
- [10] Y. Li, J.S. Francisco. *J. Am. Chem. Soc.* 2005, 127, 12144–12146.
- [11] J. Salas, M.A. Burgos Paci, F.E. Malanca. *Atmos. Environ.* 2020, 232, 117537.
- [12] F. Kirchner, A. Mayer-Figge, F. Zabel, K.H. Becker. *Int. J. Chem. Kin.* 1999, 31, 127-44
- [13] J. Salas, A.L. Cardona, M.A. Burgos Paci, F.E. Malanca. *Atmos. Environ.* 2022, 279, 119097.

MONITOREO DEL AIRE EN LA PLATA Y ALREDEDORES MEDIANTE TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS

J. Reyna Almandos^{1,2,*}, D. Schinca^{2,3}, M. Salas¹, E. Grumel^{2,3}, N. Arrieta¹, I. Torossian¹

¹Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional La Plata (UTN-FRLP)

²Centro de Investigaciones Ópticas, CIOP, (CONICET-UNLP-CIC), Gonnet, La Plata

³Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Facultad de Ingeniería

E-mail: jreyna@ciop.unlp.edu.ar; reynaalmandos@yahoo.com

Resumen

En este artículo se presenta el estudio, mediante instrumental fundamentado en la espectroscopía óptica, de la concentración del dióxido de azufre (SO₂), dióxido de nitrógeno (NO₂), aerosoles atmosféricos y material particulado (MP₁₀), contaminantes presentes en la región del Polo Petroquímico cercano a la ciudad de La Plata, Argentina. En la medición del SO₂ y NO₂ se utilizó instrumental que detecta la concentración de estos gases por fluorescencia en la región ultravioleta (UV) y visible (VIS) del espectro electromagnético; y con el fin de comparar los resultados obtenidos de estos gases se trabajó con técnicas químicas para la medición de sus valores. Un radiómetro y datos satelitales fueron utilizados en el caso de los aerosoles atmosféricos. La medición de MP₁₀ se realizó mediante un equipo portátil con filtros renovables y en su análisis se usaron métodos químicos y aplicación de radiación estimulada. Las determinaciones se realizaron entre los años 2010 al presente (en el caso del SO₂ los registros datan desde el año 1996). En el análisis posterior de datos fueron requeridos diversos parámetros meteorológicos, tales como las frecuencias con las que los vientos soplan en las direcciones cardinales, ya que estas permiten correlacionar las concentraciones medidas con los posibles focos emisores.

Palabras clave: Contaminación atmosférica, Espectroscopía óptica.

Abstract

This article refers to the study, using instruments based on optical spectroscopy, of the concentration of sulfur dioxide (SO₂),

nitrogen dioxide (NO₂), atmospheric aerosols and particulate matter (PM₁₀), pollutants present in the Petrochemical Pole region near the city of La Plata, Argentina. To measure SO₂ and NO₂, instruments were used that detect the concentration of these gases by fluorescence in the ultraviolet (UV) and visible (VIS) regions of the electromagnetic spectrum. To compare the results obtained from these gases, chemical techniques were used to measure their values. A radiometer and satellite data were used in the case of atmospheric aerosols. The measurement of PM₁₀ was carried out using portable equipment with renewable filters and chemical methods and the application of stimulated radiation were used in the analysis. The determinations were carried out between 2010 and the present (in the case of SO₂, the records date back to 1996). In the subsequent data analysis, various meteorological parameters were required, such as the frequencies with which the winds blow in the cardinal directions, since these allow the measured concentrations to be correlated with the possible emission sources.

Keywords: Air pollution, Optical spectroscopy.

Introducción

La contaminación del aire es una amenaza aguda acumulativa y crónica para el ambiente y la salud humana. La lluvia ácida y el efecto invernadero son ejemplos de los cambios a los que se ha visto sometida la atmósfera de nuestro planeta. Existen fuentes de contaminación procedentes de procesos naturales cuyas apariciones, tal vez esporádicas y de corta duración

temporal, plantean efectos con gran impacto ambiental como:

- Erupciones volcánicas, donde se emiten tanto gases como partículas (ceniza) que alteran la composición natural de los gases presentes de forma natural en la atmósfera.
- Humo y gases de incendios naturales no provocados.
- Tormentas de polvo.
- Polen y esporas de plantas, responsables de muchas alergias respiratorias.

Durante la segunda mitad del siglo XVIII y producto de la revolución industrial aumentó de manera considerable la producción en fábricas, así como el desarrollo y el creciente uso de los medios de transporte y, por ende, el incremento en el uso de los combustibles fósiles. Como resultado se produjo un aumento en la concentración de gases como el dióxido de carbono, el óxido de nitrógeno o el óxido de azufre, monóxido de carbono, material particulado, hidrocarburos no quemados, ozono, metales pesados, entre otros, todos ellos muy perjudiciales en elevadas cantidades para la salud.

Otras actividades que contribuyen a la contaminación atmosférica son:

- Las actividades mineras:** Para la extracción de muchos minerales se emplean químicos y maquinaria pesada muy contaminantes.
- Uso excesivo de productos pesticidas en la agricultura:** Estas sustancias afectan y alteran los suelos, facilitando además la acumulación de gases en el aire.
- La deforestación:** Las especies vegetales son capaces de limpiar el aire al secuestrar contaminantes de la atmósfera y neutralizarlos. Con su eliminación, este proceso se reduce, así como la producción de oxígeno durante la fotosíntesis.

En nuestro país la información básica para evaluar la situación y cuantificar tendencias es limitada, por lo que resulta difícil entonces adoptar políticas de saneamiento sin un conocimiento sistematizado del problema. Es entonces necesario contar con datos basados en mediciones de algunos de los

contaminantes más representativos, en particular en regiones expuestas a un importante grado de polución, como el Polo Petroquímico de La Plata. El dióxido de azufre (SO_2) y el dióxido de nitrógeno (NO_2) presentes allí, son gases que en contacto con alto contenido de humedad, reaccionan transformándose en responsables de la lluvia ácida. Los aerosoles y el MP_{10} resultan asimismo indicadores adecuados del grado de contaminación de la región.

Investigaciones sobre el estudio de la polución atmosférica utilizando métodos ópticos se realizan desde hace varios años en nuestro grupo [1-5]. En el presente trabajo se muestra y describe la aplicación de métodos que utilizan la espectroscopía óptica, para el estudio y evaluación de la concentración de diversos contaminantes gaseosos del aire, particularmente SO_2 , NO_2 , MP_{10} y aerosoles, presentes en la región cercana al Polo Petroquímico de La Plata.

Equipamiento utilizado

Medición de los valores de concentración de SO_2

Las mediciones de SO_2 fueron realizadas inicialmente con una unidad analizadora continua marca Lear Siegler ML9850 operando por espectroscopía óptica de emisión UV en forma no dispersiva. En este instrumento, que posee una resolución de 1 ppbv en un rango de 0-20 ppmv, la radiación ultravioleta proveniente de una lámpara de Zn pasa por un filtro centrado en los 213,9 nm y es enfocada en la celda de fluorescencia donde interactúa con las moléculas de SO_2 de la muestra de aire. La emisión fluorescente es enfocada sobre un tubo fotomultiplicador pasando a través de otro filtro en 350 nm [6]. Recientemente se incorporó un nuevo equipo para la medición de SO_2 marca SIR SA, modelo S-5001, que trabaja de manera continua mediante la misma técnica de fluorescencia en el UV.

Estas mediciones fueron contrastadas periódicamente con las obtenidas mediante el método Colorimétrico de West y Gaeke – Pararosanilina ASTM 2914-01 [7], en el

que se utilizó una bomba SKC RX8 para el muestreo de aire con un amplio rango de caudales. Este método es aplicable para la medición de SO₂ entre aproximadamente 0,01 ppm y 0,40 ppm.

En el CIOP oportunamente se desarrolló un equipo dispersivo [8] basado en la técnica de absorción diferencial (DOAS, acrónimo de *Differential Optical Absorption Spectroscopy*), para la medición de contaminantes a nivel de calidad de aire. El mismo funciona mediante la detección de las bandas de absorción óptica que poseen las especies gaseosas a medir. En este sentido el método trabaja como un espectrofotómetro de columna abierta (fuente de luz colimada, espectrómetro a red de difracción y detector), basado en la ley de Lambert –Beer:

$$I(\lambda) = I_0 \exp(-\sigma(\lambda) \cdot N \cdot L)$$

expresión en la que I₀ es la irradiancia incidente, σ sección transversal de absorción de la especie, que depende de la longitud de onda, L es la longitud del camino que recorre la luz y N el número de moléculas por unidad de volumen. De este modo, a mayor longitud de la columna, mayor sensibilidad de detección. Este

método se usa desde fines de la década de 1980 para medidas ambientales de gases contaminantes a nivel urbano. En general, la fuente de luz consta de una lámpara de arco de xenón de amplio espectro, con una óptica de colimación y una de recepción ubicada a determinada distancia (entre 200 y 800 m); un espectrógrafo con fotodetector incorporado permite analizar el espectro del haz de luz blanca que atraviesa la columna abierta. En la **Figura 1a** se muestra una configuración típica del equipamiento utilizado en la detección de SO₂ en la que se utiliza un filtro óptico de la radiación incidente, para observar la fluorescencia en el UV de este gas; Una variante de esta disposición consiste en reemplazar el receptor por un retroreflector, lo que permite duplicar el camino de interacción y aumentar la sensibilidad (**Figura 1b**). El montaje de los telescopios emisor y receptor junto a la lámpara de Xe se muestra en la **Figura 1c**. Cuando el sistema se usa trabajando con un amplio espectro de longitudes de onda para la detección de otros contaminantes, el filtro es reemplazado por un espectrógrafo, como se muestra en la **Figura 1d**. Este equipamiento fue utilizado para la medición de la concentración de SO₂ y NO₂.

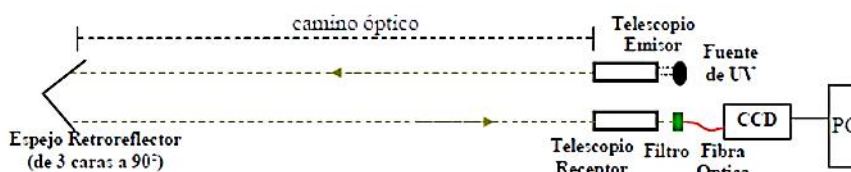


Figura 1a: Esquema de la variante de DOAS realizado en el CIOP



Fig. 1b: Vista del retroreflector montado en tripode ajustable



Fig. 1c: Vista de lámpara de Xe (derecha), telescopio emisor (centro) y telescopio receptor (izquierda), montados en tripodes ajustables.



Fig. 1d: Vista del espectrógrafo de dispersión cruzada utilizado, con cámara tipo CCD a la izquierda del mismo. La entrada de luz es vía fibra óptica.

Medición de los valores de concentración de NO₂

Para la medición de este gas desde el año 2023 se está utilizando un equipo

analizador de NO_x marca SIR SA, modelo S-5012, que trabaja por quimioluminiscencia [9], mostrado en la **Figura 2**.



Figura 2

Las concentraciones de NO_2 fueron asimismo obtenidas mediante la aplicación de la técnica espectrofotométrica - método Griess-Saltzman Reaction D1607 [10], efectuándose mediciones desde el año 2012.

Medición de la concentración de aerosoles

Un instrumento óptico como el radiómetro fue utilizado para la determinación del espesor óptico de aerosoles (AOT), por sus siglas en inglés *Aerosol Optical Thickness*.

Los aerosoles desempeñan un papel muy importante en la atmósfera, tienen una gran influencia en el balance radiativo terrestre, la visibilidad, la calidad del aire, las nubes, la precipitación y los procesos químicos en la tropósfera. En nuestros estudios se utilizó un radiómetro MICROTOPS II, instrumento portátil de varias bandas capaz de medir y almacenar la columna total de ozono, la columna de vapor de agua, y el espesor óptico de aerosoles (AOT [11]. Cada dato se registra con la fecha, hora, coordenadas del lugar, ángulo solar, altitud, presión y temperatura. Este tipo de instrumento está equipado con filtros de interferencia y un fotodiodo para el rango de longitud de onda particular, que en el caso de los AOT corresponde a 1020 nm. La radiación recibida produce una corriente eléctrica que es proporcional a la potencia radiante incidente, información que

posteriormente es amplificada y convertida en una señal digital.

Medición de MP_{10}

El MiniVol Portable Air Sampler, Airmetrics, utilizado en la medición de MP_{10} es un muestreador portátil de aire ambiente para material particulado, que utiliza tecnología de bajo flujo desarrollada conjuntamente por la EPA (*Environmental Protection Agency*) y la LRAPA (*Lane Regional Air Protection Agency*) [12]. En el muestreo de MP_{10} utilizando este instrumento (que dispone de un temporizador programable, un sistema de control de flujo constante y un medidor de tiempo), el aire es forzado a pasar a través de un separador de tamaños de partículas y luego a través de un medio filtrante. La separación de partículas por tamaño de la corriente de aire se logra por impacto, con un flujo constante de 5 litros por minuto a diferentes temperaturas y presiones atmosféricas.

Antes de la inserción del filtro adecuado dentro del equipo muestreador, este debe ser sometido a un proceso de secado durante 24 hs, correctamente pesado en balanza analítica y claramente identificado. Una vez extraído el filtro del equipo, éste se traslada al laboratorio, para su posterior nuevo secado y pesaje. Seguidamente, se obtiene la masa de partículas depositadas en el filtro, calculando la diferencia de los

pesajes antes y después de realizada la extracción.

Datos meteorológicos

Los valores de los parámetros meteorológicos de la zona estudiada son los informados por el Observatorio Astronómico de La Plata y por una estación meteorológica Davis modelo Weather Monitor II Euro Version, instalada en la UTN-FRLP. En el año 2018 se incorporó a la Facultad una nueva estación meteorológica Davis modelo Vantage Pro2, que incluye un sensor de radiación solar.

Características geográficas y meteorológicas del Gran La Plata

En la región del partido de La Plata y de los partidos linderos de Ensenada y Berisso, que constituyen el llamado Gran La Plata, la temperatura media anual ronda los 16,3 °C y precipitaciones medias anuales calculadas en 1023 mm. Por su cercanía al Río de la Plata la humedad tiende a ser abundante, siendo la media anual de 77,6 %. En cuanto al viento, su intensidad media anual llega a 12 km/h. El clima es templado húmedo, con condiciones de microclima que pueden influir en la dispersión atmosférica. Durante otoño e invierno las nieblas son frecuentes en la zona, con inversiones térmicas que contribuyen a una baja dispersión en la atmósfera. Es decir, se presentan condiciones que, por momentos, favorecen la concentración de

contaminantes. Los vientos predominantes, en orden de importancia, provienen de los sectores NO, S, SE, NE y N.

La población del Gran La Plata está compuesta mayoritariamente por la correspondiente a la parte urbana del partido de La Plata y de los partidos cercanos de Ensenada y Berisso. Según los últimos datos disponibles la región posee en total una población aproximada a los 800.000 habitantes, y un tránsito automotor de unos 400.000 vehículos registrados.

Lugares de toma de muestras

El principal sitio de muestreo donde se midieron SO_2 , NO_2 , aerosoles y MP_{10} , se encuentra en la UTN-FRLP ubicada al NE de la ciudad (**punto A** en la **Figura 3**), casi en la intersección de los partidos de Ensenada y Berisso con la Ciudad de La Plata. Muy cercano a este punto se halla una gran zona industrial y de mucho tránsito vehicular, lindera al polo petroquímico, en el cual se destaca la refinería de petróleo más importante del país. Cercana a ésta se ubican otras industrias subsidiarias productoras de compuestos aromáticos (benceno, tolueno, xilenos), alifáticos (pentano, hexano, heptano), anhídrido maleico y coque de petróleo, astilleros, empresas siderúrgicas, entre otras. Este complejo industrial se encuentra al NNE del casco urbano de La Plata e inmerso en el conglomerado del Gran La Plata, rodeado de zonas pobladas (entre los partidos de Ensenada y Berisso).

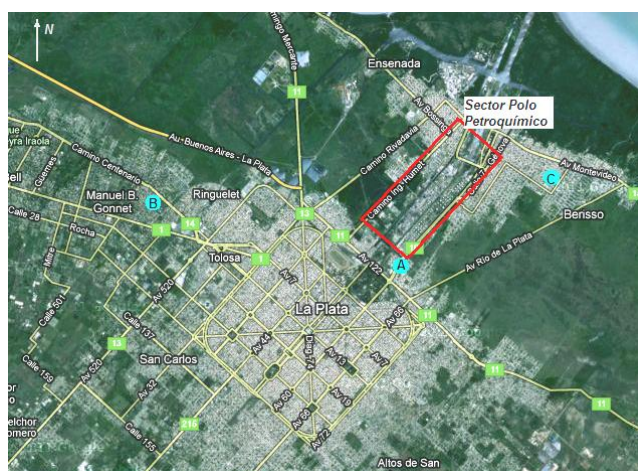


Figura 3: Puntos de medición: el punto principal, ubicado en la FRLP-UTN (A) y los puntos de comparación ubicados en el CIOp (B) y en el Partido de Berisso (C), alrededor del Polo Petroquímico (recuadro rojo). Se observa también en esta Figura, arriba a la derecha, el Río de La Plata.

Resultados de SO₂ y NO₂

Los valores registrados sobre concentraciones de dióxido de azufre mostraron resultados similares a los informados anteriormente [1],[3],[4],[5]. Las concentraciones de SO₂ del año 2012 mostraron resultados con un valor promedio de 12 ppb, que estuvieron de acuerdo con los estudios previos realizados en [5].

A principios de 2000, se realizó una extensa campaña de medición continua de

estos dos contaminantes gaseosos en un sitio próximo al punto A de la Figura 3, con el equipamiento DOAS desarrollado en el CIOP. La Figura 4 muestra los resultados promedios horarios de concentración de SO₂ (panel a) y de NO₂ (panel b) para una semana típica de los meses de medición. Es de destacar que dichos valores, y en especial los máximos que muestra el SO₂, fueron compatibles con los valores medidos en la UTN.

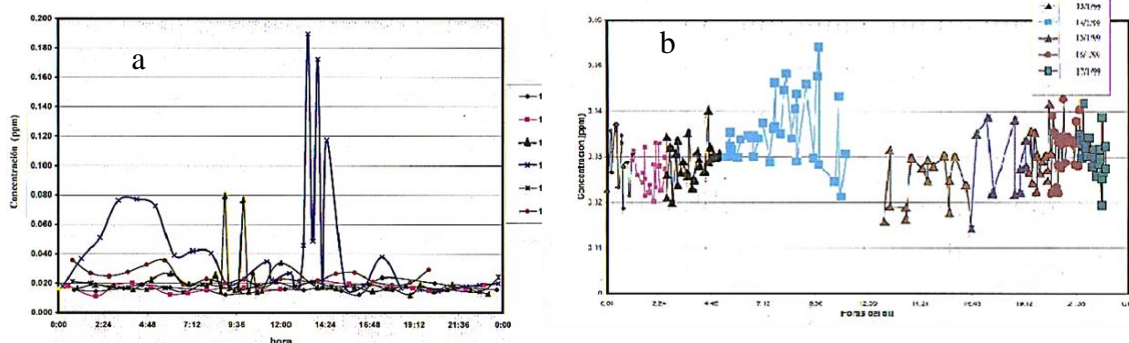


Figura 4: Promedios horarios de concentración de SO₂ (a) y de NO₂ (b) para una semana típica de medición en las cercanías del Polo Petroquímico con equipo DOAS desarrollado en el CIOP.

Las concentraciones de dióxido de nitrógeno registradas en la zona cercana al Polo Petroquímico de La Plata entre marzo y noviembre del año 2013 mostraron un valor promedio de 6 ppb. Los picos más altos, hasta 15 ppb, se observaron en los meses de marzo, abril, junio y julio, con un marcado decrecimiento a partir de agosto.

Asimismo, se tomaron mediciones de concentración de NO₂ en el sitio B de la Figura 3 (CIOP, campus CIC, Gonnet) con el equipo DOAS, mostrando picos de hasta 20 ppb.

La Figura 5 muestra el despliegue del equipamiento en campo.

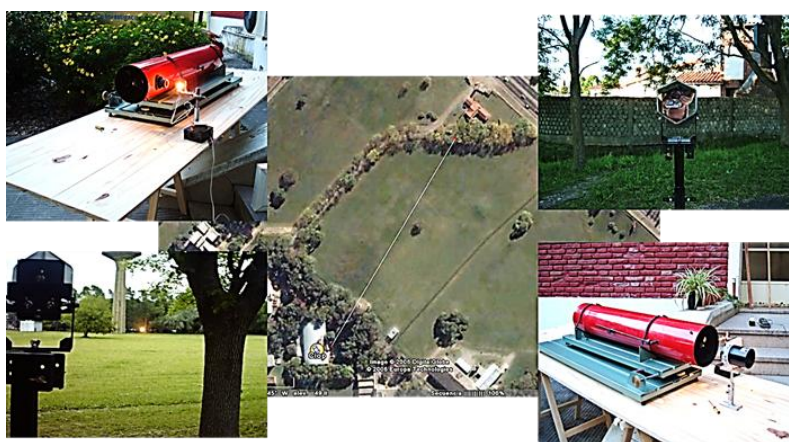


Figura 5: Despliegue de equipo DOAS desarrollado en el CIOP. Panel central muestra con línea blanca la columna abierta de medición. Largo aproximado: 100 m. Los paneles laterales muestran la disposición del telescopio emisor (rojo) y receptor (negro), como así también la posición del retrorreflector.

Mediciones de aerosoles

En la **Figura 6** se muestra el promedio obtenido de AOT para los tres puntos de muestreo. En la escala vertical el valor indicado es un número adimensional que puede variar entre 0,000 y 0,400 que corresponde, en forma creciente, a aire limpio y muy turbio respectivamente. En el gráfico el AOT se encuentra discriminado por el rango horario. para conocer la tendencia aproximada de la concentración de aerosoles en horas diurnas. Se observa,

en general, un valor creciente desde la mañana hasta cerca del mediodía donde alcanza un máximo, decreciendo luego y volviendo a aumentar hacia la tarde.

En la **Figura 7** se muestra la correlación del promedio mensual de AOT con la precipitación, la cual juega un papel importante en el contenido de aerosoles en el aire, al ser uno de los mecanismos de eliminación del material particulado presente en la atmósfera.

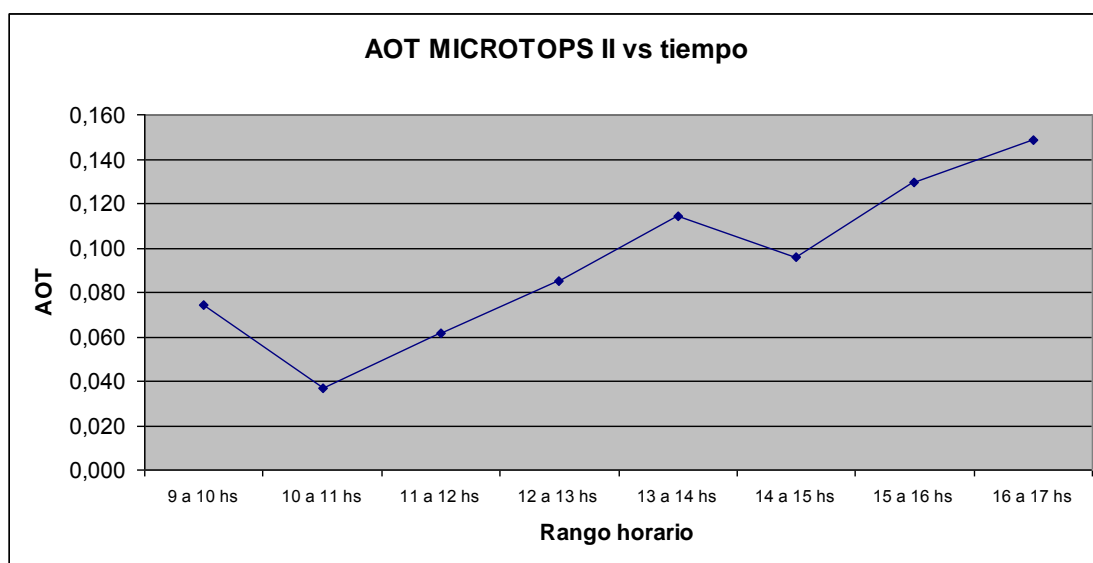


Figura 6: Valor promedio e AOT para los tres puntos de muestreo.

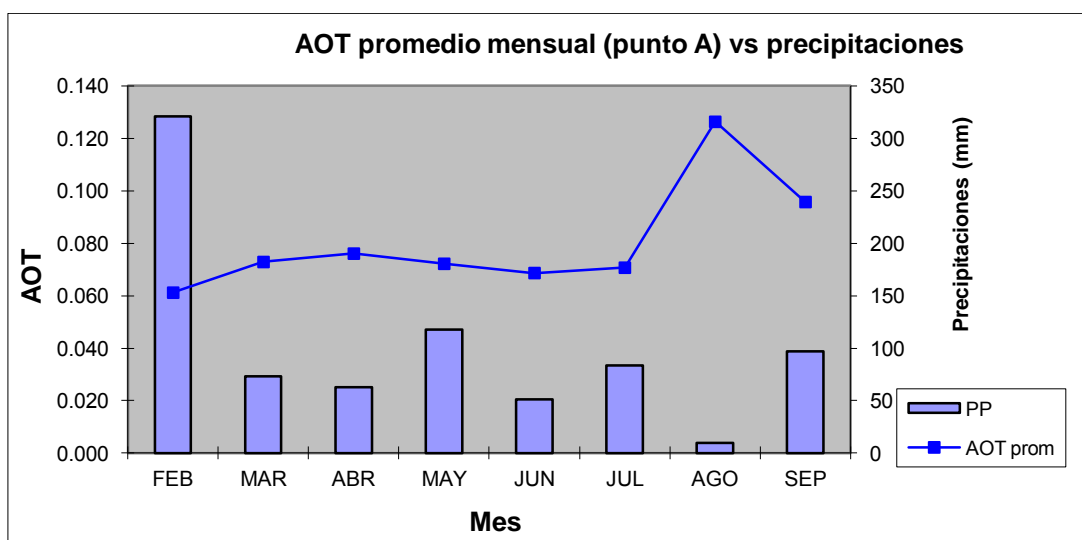


Figura 7: Correlación del promedio mensual de AOT con la precipitación.

Si se compara el comportamiento de la curva mensual de AOT obtenida de las mediciones en el **punto A** con la precipitación acumulada para cada mes del mismo año, se observa que disminuciones en las precipitaciones mensuales se acompañan de, aunque a veces muy leves, aumentos en los valores de AOT y viceversa (salvo para el caso correspondiente al mes de junio, donde se observó una ligera disminución en los valores de AOT acompañado de una también menor cantidad de agua precipitada, con casos extremos donde para los meses en los cuales las precipitaciones fueron las mayores o las menores, el contenido de aerosoles en la atmósfera fue un extremo opuesto (tal es el caso del mes de febrero, donde se registró el menor valor de AOT mensual y la mayor cantidad de agua precipitada y el de agosto, donde la precipitaciones resultaron las más bajas y el valor de AOT aumentó muy por encima del resto de los meses).

(radiómetros, fotómetros solares, etc.) nos permiten obtener datos de una zona puntual. Las obtenidas mediante satélites nos brindan información multiespectral a gran escala de las propiedades de la atmósfera, que permiten diversos estudios (aerosoles, propiedades de nubes, vapor de agua, ozono, entre otros). Uno de los instrumentos utilizados para este fin es el sensor MODIS (*Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer*). Está compuesto por sensores que adquieren datos en 36 bandas espectrales, en un rango que va de 0.4 μm a 14.4 μm). A fines de comparación con los datos obtenidos en tierra, en nuestras investigaciones se utilizaron valores satelitales del espesor óptico de aerosoles correspondientes a la sección de datos diarios del MODIS (*MODIS-Daily*) [13], disponibles con una moderada resolución, según se muestra en la **Figura 8**, pero valiosos a los fines comparativos con la atmósfera circundante a la zona de estudio.

Mediciones satelitales de aerosoles

Las mediciones realizadas mediante instrumentos instalados en tierra

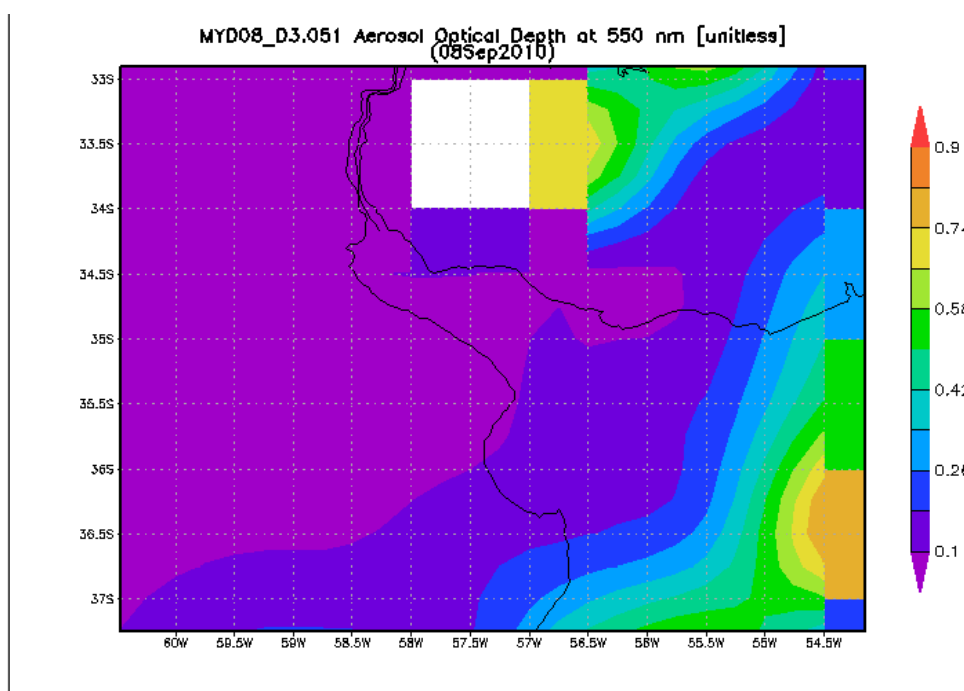


Figura 8: Imagen que muestra valores de AOT del MODIS en 550 nm en la zona de La Plata y alrededores correspondiente al día 8 de septiembre del 2010.

En la **Figura 9** se muestran los valores de AOT promedio mensual del satélite y los obtenidos mediante el MICROTUPS II.

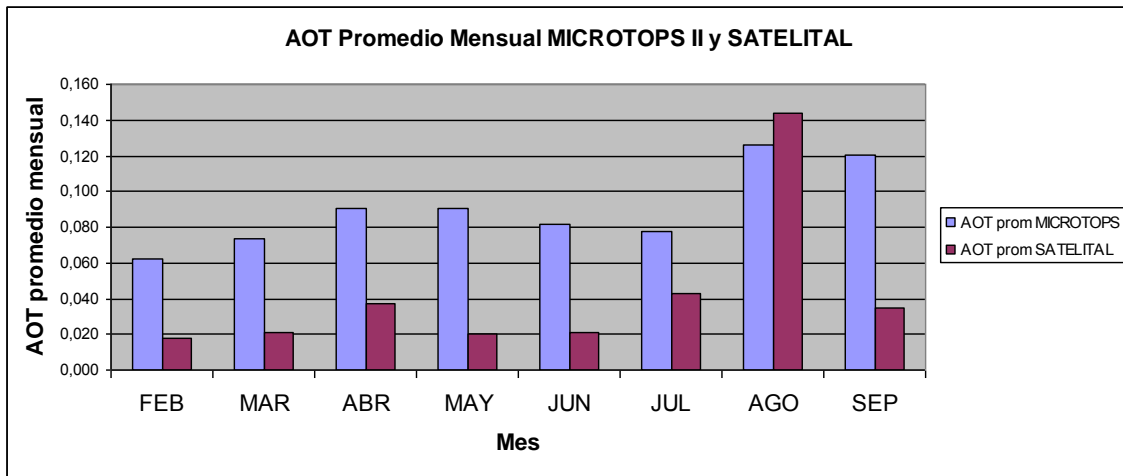


Figura 9: Comparación de los valores de AOT promedio mensual del satélite y los obtenidos mediante el MICROTUPS II.

Esta relación entre las dos formas de medición, una de ellas puntual y la otra de mayor área media, fue realizada para obtener un panorama general y con fines comparativos, como otra forma de conocer el comportamiento de este contaminante en la región.

mediante el radiómetro portátil, es mostrado en la **Figura 10**. Es importante considerar que estos muestreos se realizaron entre los meses de septiembre de 2010 y febrero de 2011. Una figura similar fue obtenida en una roseta de vientos para la concentración de SO₂, en una campaña de medición realizada en el CIOp en primavera [4].

Un gráfico en una roseta de vientos de la concentración de AOT medidos en el CIOp

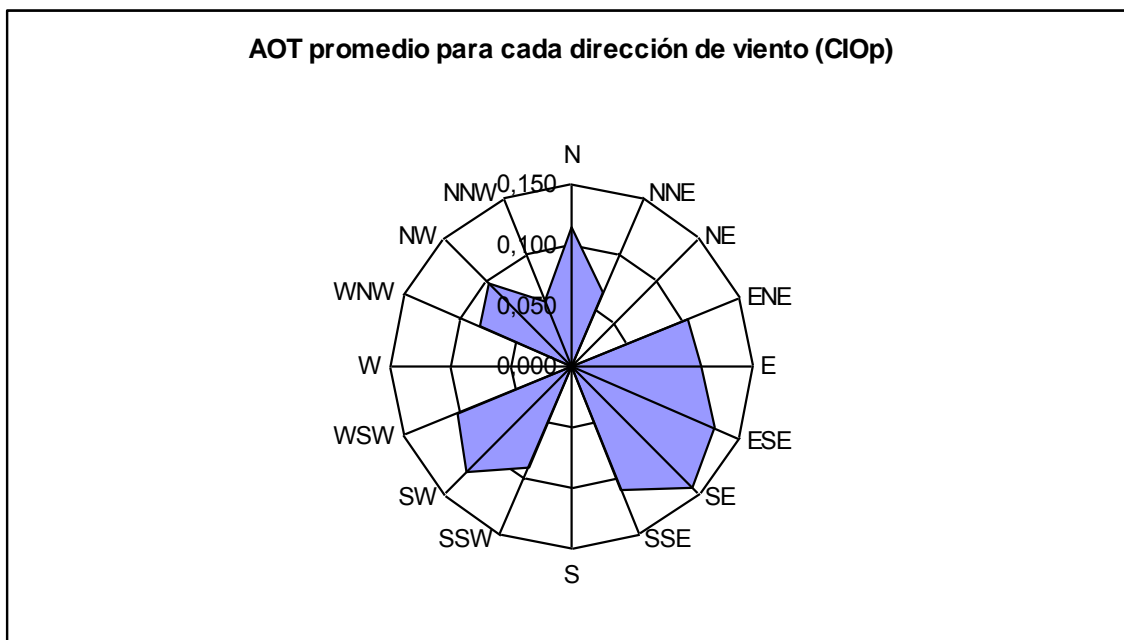


Figura 10

Análisis de los filtros

Se aplicaron técnicas de microscopía electrónica para el análisis de los filtros con MP_{10} , en los que se encontraron metales pesados y otros compuestos característicos de la zona estudiada. Se observaron concentraciones de MP_{10} con un valor máximo de $125 \mu\text{g}/\text{m}^3$ para un tiempo de muestreo de 24 hs. Se detectaron trazas de Fe, V, Zn, Cr, Co, Mo, Ti y Cu. Estos elementos también se hallaron utilizando la técnica LIBS (*Laser Induced Breakdown Spectroscopy*), la que consiste esencialmente en analizar espectroscópicamente una chispa generada sobre la superficie de una muestra al enfocar un haz láser pulsado de alta energía. Mediante el análisis espectral de la señal luminosa emitida por el plasma pueden identificarse los elementos presentes en ella [14].

Actividad actual

Las actividades de investigación descriptas, que desde hace varios años se llevan a cabo en nuestro grupo en el tema de la contaminación atmosférica continúan, en particular en la medición de SO_2 , NO_2 , MP_{10} y aerosoles, incorporando el tratamiento estadístico de los vientos y contaminantes en la región [15], y la presentación de resultados de avance dentro de los nuevos proyectos en curso [16]. En la actualidad se trabaja asimismo en la implementación de un sistema de medición óptico de NO_2 de tipo no dispersivo (sin uso de espectrógrafo) en columna abierta. Se realizaron pruebas en laboratorio con resultados preliminares, llegándose a medir niveles de concentración de este gas en celda de prueba entre 20 y 200 ppb. La **Figura 11** resume estos resultados.

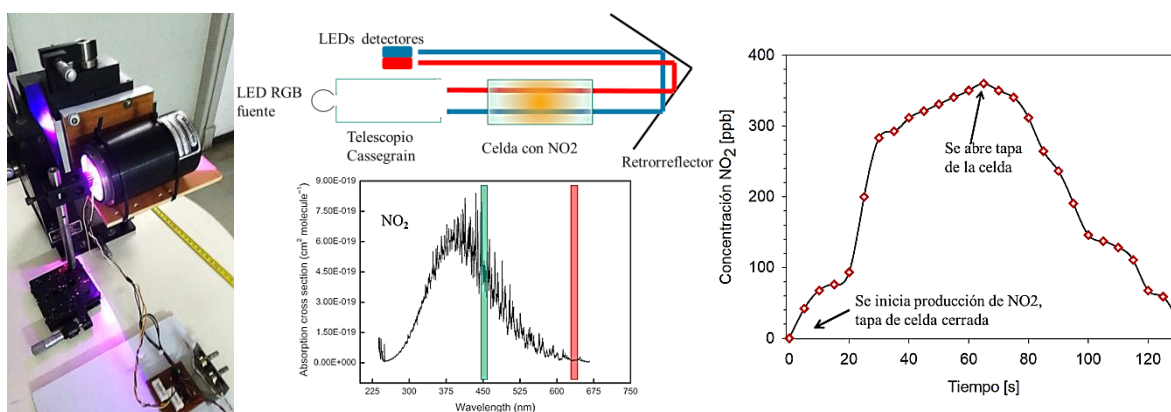


Figura 11: Prototipo de sistema no dispersivo de laboratorio para medición de concentración de NO_2 . *Panel izquierdo:* Detalle de fuente de luz y telescopio emisor montado en sistema de alineación; *panel central:* Esquema de haces y retroreflector; *panel derecho:* Medición dinámica de concentración en celda de muestra.

Conclusiones

En el marco del estudio llevado a cabo por nuestro grupo sobre la contaminación atmosférica en la región del Gran La Plata cercana al Polo Petroquímico, en el presente trabajo se ha descrito la aplicación de técnicas de espectroscopía óptica (junto a otras complementarias), para la detección y medición de las concentraciones de SO_2 , NO_2 , aerosoles y MP_{10} . Los valores medidos de SO_2 y NO_2

mediante de fluorescencia en UV y VIS, estuvieron de acuerdo con los esperados en la región y con aquellos de los estudios previos realizados. Los datos de aerosoles obtenidos en tres puntos diferentes con el radiómetro portátil fueron comparados con los satelitales, mostrando valores comparables. En el estudio de MP_{10} las diversas técnicas aplicadas para la identificación de los elementos presentes en los filtros utilizados mostraron resultados similares. Los datos obtenidos para todos

los contaminantes estudiados fueron correlacionados con los parámetros meteorológicos de la región.

Agradecimientos

Los autores agradecen la colaboración brindada para la realización de estos estudios al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires (CIC), a personal de la UTN-FRLP, el CIOP, el Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas, CINDECA (CONICET-UNLP-CIC), la Facultad de Ciencias Exactas (UNLP), la Facultad de Ingeniería (UNLP), la Facultad de Ciencias Astronómicas y Geofísicas (UNLP), el Instituto de Física “Arroyo Seco” de la Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires (UNICEN), y de la Gerencia Química del Centro Atómico Constituyentes de la Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA).

REFERENCIAS

- [1] M. E. Rosato, J. Reyna Almandos, G. Ratto, A. Flores, V. Sacchetto, V. Rosato, J. Ripoli, J. C. Alberino, J. C. Ragaini, *Pollution Atmosphérique* 2001, 169, 85- 98.
- [2] J. Marañón Di Leo, S. Delnero, J. C. Ragaini, V. Sacchetto, C. Colosqui, J. Colman Lerner, U. Boldes, A. Scarabino, M. Rosato, J. Reyna Almandos, *Latin American Applied Research* 2004, 34, 55 – 58.
- [3] G. Ratto, F. Videla, J. Reyna Almandos, R. Maronna, D. Schinca, *Environmental Monitoring and Assessment* 2006, 121, 327-342.
- [4] G. Ratto, F. Videla, R. Maronna, *Environmental Monitoring and Assessment* 2009, 149, 229-240.
- [5] J. Reyna Almandos, F. Videla, D. Schinca, G. Ratto, J. C. Ragaini, V. Sacchetto, M. Rosato, N. Arrieta, J. Bazán, *Contaminación Atmosférica en Argentina. Contribuciones de la II Reunión Anual PROIMCA*. 2009, Copyright UTN, ISBN 978-950-42-0119-9.
- [6] Manual de instalación y uso del Equipo ML 9800, Lear Siegler, Measurement Controls Corporation. 1992.
- [7] US EPA, 40 CFR 50, Appendix A “Reference Method for the Determination of SulfurDioxide in the atmosphere (Pararosaniline Method)”, 2001, pp. 9.
- [8] F. Videla, D. Schinca, J. Tocho, *Applied Optics* 2003, 42, 3653-3661.
- [9] *Manual de instalación y uso, versión 6.0. del Equipo SIR SA serie S-5012*. 2004.
- [10] *ASTM D1607-91 Standard Test Method for Nitrogen Dioxide Content of the Atmosphere (Griess-Saltzman Reaction)*. 2018.
- [11] *MICROTOPS II User’s Guide*, Version 1.40, Solar Light Company, Inc. 1996.
- [12] <http://www.airmetrics.com/products/minivo/index.html>
- [13] <http://daac.gsfc.nasa.gov/giovanni/MODIS-Daily>
- [14] D. Díaz Pace, “Caracterización de plasmas producidos por láser mediante espectroscopia de emisión atómica.” Tesis de Doctorado, Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires. 2010.
- [15] G. Ratto, F. Videla, J. Reyna Almandos, *AIMS Geosciences* 2018, 4, 88-125.
- [16] M. Salas, I. Torossian, N. Arrieta, J. Reyna Almandos, E. Grumel, D. Schinca. *108 Reunión de la Asociación Física Argentina*, Bahía Blanca, septiembre, 2023.

INTERACCIONES NO COVALENTES. COMBINANDO DATOS DE DENSIDAD ELECTRÓNICA CON HERRAMIENTAS DE MACHINE LEARNING

Emilio L. Angelina¹ y Nélica M. Peruchena^{1,*}

1-Laboratorio de Estructura Molecular y Propiedades. IQUIBA-NEA UNNE-CONICET Avda. Libertad 5470. Corrientes. E-mail: perunm2014@gmail.com, emilioluisangelina@gmail.com

Resumen

Las interacciones no covalentes (NCI) como los enlaces de hidrógeno, EH, enlaces de halógeno, EX (involucrando Cl, Br, I), los de calcógeno, ECh, y los de pnícogeno, EPn, así como otras interacciones que involucran diferentes átomos a lo largo de la tabla periódica, juegan un rol importante en el reconocimiento molecular. El término “interacciones moleculares” es, en realidad, más común, apareció 20 años antes que el término “interacciones no covalentes”, que comenzó a utilizarse en publicaciones desde 1974. Su estudio computacional aporta una nueva visión en el campo de los materiales funcionales, en el autoensamblado molecular, en la síntesis orgánica, en el diseño de fármacos y en otras muchas áreas de vanguardia. En esta presentación realizamos un análisis profundo de las interacciones moleculares en la hendidura de unión de cruzipaína, Cz, para entender el mecanismo de inhibición de la enzima. Para realizar este estudio, nuestra “caja de herramientas” consistió en el análisis topológico de la densidad de carga en complejos [Cz-Inhibidor] para extraer las interacciones moleculares, y modelos de clasificación de aprendizaje automático (ML, *Machine Learning*) para relacionar las interacciones con la actividad biológica.

Esta combinación resultó útil para clasificar las interacciones moleculares como «activas» o «inactivas», en función de su prevalencia en los complejos más activos o menos activos respectivamente. Un análisis más detallado de las interacciones con la ayuda de herramientas de aprendizaje no supervisado también permitió comprender cómo estas interacciones entran en juego “conjuntamente” para provocar que la enzima pase a un estado conformacional particular. Observamos que la mayoría de los inhibidores activos inducen cambios conformacionales dentro de la

enzima que conducen a un mejor ajuste general del inhibidor en la hendidura de unión. La información “extraída” sobre las principales interacciones, se utiliza actualmente en nuestro laboratorio, en las campañas de cribado virtual prospectivo, para buscar nuevos inhibidores no covalentes de la cruzipaína.

Palabras Clave: Interacciones Moleculares, QTAIM, Inhibidores enzimáticos, Modelos de clasificación, Química computacional.

Abstract

Non-covalent interactions (NCI) such as hydrogen bonds, HB, halogen bonds, XB (involving Cl, Br, I), chalcogen bonds, ChB, pnícogen bonds, PnB, among other interactions involving different atoms along the periodic table, play an important role in molecular recognition. The term ‘molecular interactions’ is indeed more common and appeared 20 years before the term ‘non-covalent interactions’, which started to be used in publications from 1974. Their computational study brings new insights into the field of functional materials, molecular self-assembly, organic synthesis, drug design and many other cutting-edge areas. In this contribution, we performed a deep analysis of the molecular interactions at the Cruzipaine binding cleft, in order to investigate the enzyme inhibition mechanism. Our toolbox for performing this study consisted of the charge density topological analysis of the complexes to extract the molecular interactions and machine learning classification models to relate the interactions with biological activity. More precisely, such a combination was useful for the classification of molecular interactions as “active-like” or “inactive-like” according to whether they are prevalent in the most active or less active complexes, respectively. Further analysis of interactions with the help of

unsupervised learning tools also allowed the understanding of how these interactions come into play together to trigger the enzyme into a particular conformational state. Most active inhibitors induce some conformational changes within the enzyme that lead to an overall better fit of the inhibitor into the binding cleft. Moreover, the information about main interactions extracted through this work is already being used in our lab to guide docking solutions in ongoing prospective virtual screening campaigns to search for novel noncovalent cruzain inhibitors.

Keywords: Molecular Interactions, QTAIM, Enzyme Inhibitors, Classification Models, Computational Chemistry.

Introducción.

La química teórica y la modelización computacional han alcanzado en las últimas décadas un lugar importante en el campo científico tecnológico y cada vez se aprecia más su alta calidad formativa. Aceptamos fácilmente que la química juega un papel determinante, para la resolución de los problemas que se consideran prioritarios para el desarrollo científico tecnológico de nuestra sociedad. En Áreas claves como Energía, Salud, Sostenibilidad medioambiental, Agua y Alimentación, la química juega indudablemente un rol clave. Los problemas que nos desafían como sociedad son complejos y la búsqueda de soluciones deben abordarse con distintas herramientas, por ello vale recordar la frase “La química ha dejado de ser una ciencia puramente experimental”. En 1998 la Academia de Ciencias Sueca pronunció esta frase ante los dos investigadores galardonados con el premio Nobel de Química, John A. Pople y Walter Kohn, por sus contribuciones en el campo de la química teórica computacional. Más específicamente a Walter Kohn por su “desarrollo de la teoría del funcional de la densidad (DFT)” y a John A. Pople por su “desarrollo de métodos computacionales en química cuántica”. Estos desarrollos dieron pie a la creación de programas de química computacional, algunos muy populares como el Gaussian, que permiten el estudio de diversos sistemas moleculares.

En la actualidad en nuestro país los grupos de investigación han adquirido los conocimientos teóricos y prácticos en química computacional, que le permiten abordar una variedad de problemas químicos, físicos, biológicos, medicinales, etc., problemas que surgen en distintos ámbitos, desde los más tradicionales referidos a la estructura molecular y sus propiedades, la biología estructural, ciencia de materiales, entre otras, hasta el diseño de nuevos fármacos para la industria farmacéutica; diseño de catalizadores para la industria petroquímica y la industria química en general; diseños de nuevos materiales nanomoleculares, (orientado por ejemplo a la resolución de problemas ambientales), para el desarrollo de nanodispositivos, etc. Se trata de temas de gran impacto, y para encararlos se requiere de profesionales sólidamente formados y con capacidad de constante remodelación. En principio nos centramos en la Química Cuántica, que podría considerarse el núcleo de la Química teórica pero rápidamente fueron desarrollándose habilidades que permiten llevar adelante simulaciones de sistemas cada vez más realistas y complejos, combinando técnicas basadas en la Mecánica Cuántica como en la Mecánica Clásica, no sólo estáticos sino también de Dinámica Molecular y mucho más.... En las últimas décadas, la Inteligencia Artificial irrumpe transversalmente todo el conocimiento y técnicas como Machine Learning (aprendizaje automático) y Deep Learning (aprendizaje profundo) contribuyen significativamente a la resolución de los problemas antes mencionados.

Como cuando éramos niños queríamos desarmar algo para entender su funcionamiento, siguiendo con la misma lógica, y recordando la frase del Dr. Bernardo Houssay, premio Nobel de Medicina en 1947, “El motor de la ciencia: la curiosidad”; para entender cómo funcionan las cosas, por ejemplo la inhibición de una enzima por un compuesto químico o ligando (molécula pequeña), es decir, el anclaje del ligando a su sitio de unión, o entender cómo influye la estructura de un catalizador en una determinada reacción heterogénea, por

ejemplo, en la industria petroquímica o en la industria de los biocombustibles; el transporte de fármacos en material silíceo o en zeolitas...entender las reacciones en la química atmosférica, las estructuras supramoleculares que forman los materiales autoensamblados, por ejemplo; en nuestro laboratorio nos dedicamos a entender las interacciones moleculares, también conocidas como interacciones no covalentes **NCI**, de su nombre en inglés “*non covalent interactions*”. En realidad se utilizan muchos nombres para las interacciones no covalentes, término que comenzó a utilizarse en 1974. El término “interacciones moleculares” es, tal vez, más común y apareció 20 años antes [1]. Las NCI constituyen un conjunto de interacciones interatómicas mucho más débiles que las interacciones o enlaces covalentes. Podemos decir, así como los enlaces covalentes en los que se comparten pares electrónicos entre los átomos unidos, definen la estructura molecular; las interacciones no covalentes se definen como las interacciones “más allá de las moléculas” [2]. Para diseñar y para optimizar nuevos diseños de inhibidores enzimáticos, catalizadores, estructuras “rosetas” autoensamblantes, trímeros, tetrámeros, hexámeros, que dan lugar a cajas con posibilidad de alojar iones y moléculas, etc., necesitamos conocer en profundidad este tipo de interacciones. En otras palabras, la química supramolecular definida como “la química más allá de las moléculas”, es el territorio de las NCI.¹

Uno de los hechos más motivadores para estudiar las interacciones no covalentes es que las mismas son responsables de la estructura y dinámica y, en consecuencia, también de la función de las macromoléculas [3]. Así, por ejemplo, la interacción de una hormona con su receptor puede producir una cascada de procesos muchos de ellos estrechamente relacionados con la formación o ruptura de

NCI. En consecuencia, la comprensión de las NCI en complejos biomoleculares constituye un reto de gran envergadura. El término “no covalente” se reserva para las interacciones intra- e intermoleculares que no se clasifican como típicos enlaces covalentes, pero son importantes para la estabilización de sistemas biomoleculares [3]. Los enlaces de hidrógeno son las interacciones específicas más importantes en los procesos de reconocimiento biológico. Sin embargo, existen otras interacciones que van desde fuertemente electrostáticas a fuertemente dispersivas como, por ejemplo, los enlaces de di-hidrógeno, las interacciones de apilamiento, y las interacciones R-H--- π , entre otras [4] Varias de estas interacciones suelen ser mucho más débiles que las covalentes y resultan más difíciles de describir correctamente. Sin embargo, los recientes avances en cálculo computacional de la densidad de carga electrónica hacen posible la descripción adecuada de la red tridimensional de enlaces y de interacciones (grafos moleculares) en sistemas biológicos en el contexto de la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas (QTAIM) [5] Comenzando con enlaces de hidrógeno, pasando por las interacciones polares más débiles y terminando con interacciones de apilamiento ($\pi\dots\pi$) y en forma de T-shape ($\text{ArH}\dots\pi$) entre anillos aromáticos, todas ellas pueden evaluarse mediante QTAIM [4(b)]. De hecho, el apilamiento de los aminoácidos aromáticos en las proteínas evidentemente resultó mucho más importante de lo que se creía y, de hecho, puede constituir una de las contribuciones estabilizadoras dominantes [5(c)]. También, en sistemas biológicos complejos, las NCI pueden operar simultáneamente, dando lugar a interesantes efectos cooperativos.

¹ En 1987, el Premio Nobel de Química fue otorgado a Donal J. Cram, Jean-Marie Lehn y Charles J. Pedersen por su trabajo en química supramolecular. La química supramolecular es el estudio de las NCI entre moléculas, que dan lugar a la formación de estructuras supramoleculares.



Figura 1. Interacciones no covalentes, algunos ejemplos. (Gentileza de A. N. Petelski).

Interacciones no covalentes, desde enlace de hidrógeno a Interacciones *Sigma-hole* y *Hole-Lump*.

El enlace de hidrógeno, EH, es una de las más importantes interacciones moleculares. Fue descubierto hace más de 100 años pero continúa siendo un tópico vital de la investigación científica [6]. La razón de este interés duradero yace en la predominante importancia de los EHs sobre la estructura, la función y la dinámica de un extenso número de sistemas químicos, que se extienden desde la inorgánica a la química biológica y más allá. De la misma manera el **enlace de halógeno**, EX [7(a-d)], donde un halógeno actúa como átomo puente, entre un dador de enlace de halógeno y un aceptor de halógeno, (D-X...A) comparte con el EH (D-H...A) muchas de las características de éste, en cuanto a direccionalidad, fortaleza, etc., como así también su reciente valorización en ingeniería, en el diseño de nuevos materiales y en la formación de estructuras supramoleculares. Las interacciones moleculares como los enlaces de hidrógeno, EH, enlace de halógeno, EX, enlace calcógeno, ECh, [8], enlace pnícogeno, EPn,

[9], involucrando N, P, enlace tetrel, involucrando al C, extienden cada vez más el concepto de interacciones moleculares incluyendo a más y más átomos a lo largo de la tabla periódica, dando lugar a que pueden describirse como “**interacciones *sigma-hole***” [10], según el concepto de Politzer² basado en mapas de potencial electrostático, donde una región de potencial electrostático positivo, denominado agujero *sigma*, interacciona con un potencial electrostático negativo, de un par libre por ejemplo; o desde la visión de la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas, “**interacciones *hole-lump***” [11,12], dada por las interacciones entre concentraciones (*lump*) y depleciones (*hole*) de densidades electrónicas.

² Se describe al agujero *sigma* como un “*cap*” de potencial electrostático positivo que se genera, por la distribución asimétrica de electrones, sobre la superficie de un átomo, X, en la dirección del enlace *sigma*, D_{atr}-X, cuando X está unido a un atractor de electrones.

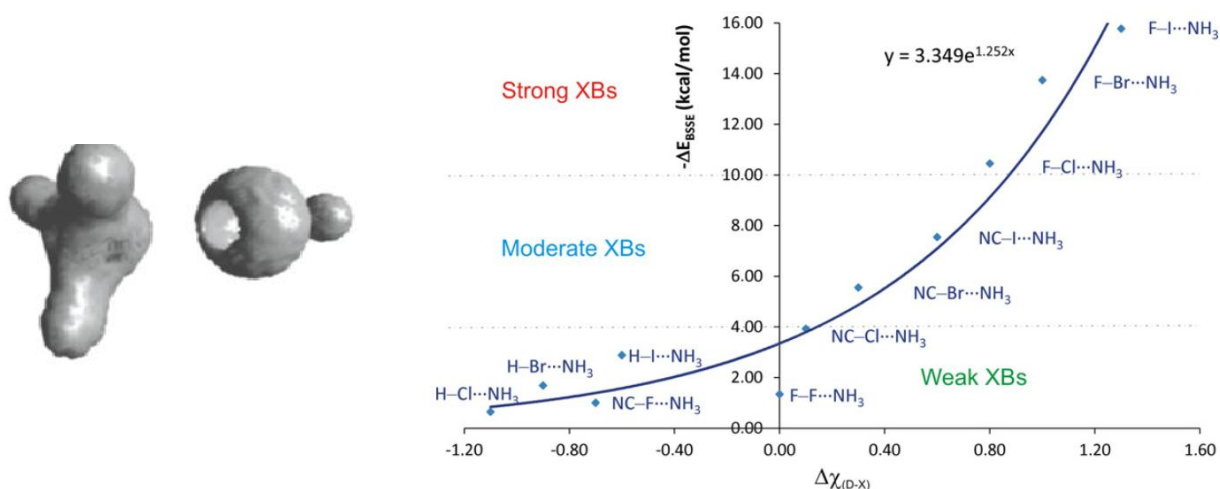


Figura 2. Interacciones *hole-lump*. Envoltura del Laplaciano de la densidad electrónica $L(r)=0.0$ u.a. en enlaces de halógeno Cl...N en el complejo F-Cl...NH₃ mostrando la alineación del “hole” con el “lump”. (Tomado de la referencia [11]); y (derecha) Fortaleza de los EX (débiles, moderados y fuertes) en función de la diferencia de electronegatividad entre D y X (Tomado de la referencia [13]).

El estudio del EH tuvo distintos períodos de efervescencia científica. Considerando el período que se inicia a fines del siglo pasado, en la década del 90, la investigación teórica sobre el EH resurgió con mucha vitalidad e intensidad, dando origen a la discusión sobre EHs propios e impropios, cuya diferencia fundamental radicaba en el desplazamiento de la frecuencia vibracional del enlace dador D-H hacia el rojo (EHp, propio o convencional) o hacia el azul (EHi, impropio). En ese período se consolida el reconocimiento de la importancia de los enlaces de hidrógeno débiles, donde un átomo no incluido entre los átomos electronegativos, como el carbono, aún con hibridación sp^3 puede actuar como dador de hidrógeno en ciertos entornos químicos relevantes como los sistemas biológicos. De forma simple puede describirse al EH como un enlace entre “un hidrógeno deficiente en electrones y una región de alta densidad electrónica”. En la bibliografía se observa que los rangos energéticos para esta interacción se extienden en ambos extremos (≈ 0 a 45 kcal/mol); se debilita la condición de colinealidad de los átomos involucrados y crece la idea de un

aumento del grado de covalencia hasta transformarse, en algunos casos, en verdaderos enlaces covalentes del tipo 3c-4e (Gilli, 2004) [14]. Estos desarrollos conllevan a nuevas interpretaciones y en muchos casos muestran la necesidad de rever y modificar conceptos establecidos [6(b),7(a)]. Desde el punto de vista energético, podemos clasificar a los EHs en a) fuertes y muy fuertes b); moderados, y c) débiles. Gilli clasifica a los EHs fuertes y muy fuertes en tres tipos fundamentales: i) Enlace de hidrógeno asistido por carga negativa, [(-)CAHB]; ii) asistido por carga positiva [(+)CAHB] y iii) asistido por resonancia [RAHB]; donde los átomos dador y aceptor en el EH están conectados a través de dobles enlaces π conjugados; en cambio, los enlaces moderados son considerados como una subclase de EH asistido por polarización.

Hibbert y Emsley [15] clasifican a los EHs de acuerdo a la forma de la superficie de energía potencial (SEP); a la energía del estado de transición, TS, en la reacción de transferencia de hidrógeno entre X e Y (ej. X, Y = O) y a la energía vibracional de punto

cero (ZPEO-H). Surgen así los términos de EH sin barrera, de baja barrera y de alta barrera (*non Barrier, Low Barrier; High Barrier*), [NBHB]; [LBHB] y [HBHB] respectivamente. Los EHs de baja barrera generalmente se forman cuando ambos átomos (dador y aceptor) poseen basicidad similar. En estos casos, los dos mínimos energéticos de la SEP, están separados por una barrera de energía $E\#$. Se encuentra que, si la barrera de energía que conecta a ambos mínimos es similar a la energía de punto cero para el enlace, el átomo de hidrógeno puede moverse libremente entre las dos posiciones, ubicándose aproximadamente en el centro, X--H--Y (distancia cercana a 2,55 Å para d(O--O)). Estos EHs son conocidos como LBHBs, también denominados de doble mínimo (*double well-HBs*, DW-HBs). En el caso extremo en que la d(X--Y) disminuye aún más (cercano a 2,3 Å), la $E\# \approx 0$, desaparece la barrera y el doble mínimo se convierte en uno solo (*single well hydrogen bonds*, SWHBs). Actualmente se encuentran en la literatura muchos trabajos sobre la naturaleza de los LBHBs también denominados SSHBs (*short and strong*), debido al reconocimiento de su participación en las reacciones bioquímicas, en los TS de las reacciones catalizadas por enzimas.

Otra característica distintiva e importante de los EHs, por su consecuencia en los distintos campos, radica en el efecto cooperativo. Numerosos estudios han demostrado la magnitud del incremento en fortaleza experimentado por EHs en cadenas lineales y/o cíclicas formadas por EHs bicéntricos, tricéntricos, etc. Por citar un solo ejemplo, Dannenberg [6(c)] ha estudiado el efecto cooperativo de los EHs en cadenas lineales de formamida (alrededor de 15 unidades monoméricas) encontrando un aumento cercano al 200% en el EH que se establece entre el par de unidades ubicadas en el centro de la cadena y ha racionalizado estos resultados con la importancia y trascendencia de los EHs en el plegamiento de péptidos y proteínas. Otros investigadores han comparado el efecto cooperativo en cadenas unidas por C-H...O y O-H...O, etc. También se han investigado otras bases de Lewis como aceptores de hidrógeno (y en la actualidad de

halógeno) de bases más débiles como un par electrónico π (los aceptores π electrónicos se encuentran ampliamente distribuidas en sistemas biológicos) o un par electrónico σ (este último, en la química de los carbocationes).

Los enlaces de halógeno o puentes de halógeno presentan una mayor direccionalidad que los EHs y la necesidad de saber más sobre su origen e implicancias despertó gran inquietud en la comunidad científica en los últimos 15-20 años, constituyendo un área de intenso crecimiento [6,7]. La idea de que un átomo de halógeno covalentemente unido puede ser atraído (al menos débilmente) por un sitio negativo de otra molécula puede resultar poco probable. Sin embargo, nuevos conceptos y nuevas evidencias experimentales surgen desde distintos campos. Por ejemplo, en los esquemas biosintéticos propuestos para algunos productos naturales halogenados, se encuentran intermediarios en los que -halógenos electrofílicos- interaccionan con los electrones del enlace π de un alqueno o de un alquino en una reacción de la adición. Así, se han descubierto distintas interacciones en las que participan halógenos que recuerdan o se relacionan fuertemente con las que realizan los simples átomos de hidrógeno. De esta forma, en esta "novel interacción" un átomo de halógeno, X, generalmente Cl, Br, I, unido covalentemente en una molécula dadora D-X y un aceptor, A, definen una interacción no covalente caracterizada por su alta direccionalidad. El dador, D, tiende a ser un atractor de electrones, altamente electronegativo, y el aceptor, A, es una base de Lewis con al menos un par de electrones disponible. El ángulo entre D-X y X-A resulta muy cercano a 180°. Por su similitud con el enlace de hidrógeno, D-H...A, se lo denominó enlace de halógeno D-X...A.

La relevancia de los EXs en sistemas biológicos ha sido destacado por varios investigadores, Auffinger *et al.* y Metrangolo *et al.* [7(d)]. Esta interacción ocurre por ejemplo en uniones con ligandos, en reconocimientos moleculares, en equilibrios conformacionales y de manera muy marcada en el plegamiento molecular. Por ejemplo un factor clave en el reconocimiento de las

hormonas tiroideas por sus receptores proteicos es atribuible a numerosos contactos cortos (I...O) entre átomos de yodo y oxígeno pertenecientes a grupos carbonilos de residuos de aminoácidos. También el funcionamiento de algunos inhibidores ha sido atribuido a la formación de complejos puenteados por halógenos, lo que refuerza la importancia de tales interacciones en el diseño de drogas [7(e)]. También el EX ha sido relacionado con la acción de algunos anestésicos, donde la formación de enlaces de halógeno compite con la formación de enlaces de hidrógeno [7(d)].

Generalmente los EXs eran considerados más débiles que los EHs, pero se han encontrado numerosos casos en los cuales la energía de “binding” de los primeros es mayor que la de los EHs. Regier Voth *et al.* han demostrado que la conformación de una molécula biológica puede ser “dirigida” permitiendo la formación de un enlace de halógeno entre un uracilo bromado y un oxígeno fosfato. Este trabajo ha revelado que cuando una interacción Br...O se dirige en directa competición con un EH clásico, la primera es aproximadamente entre 2–5 kcal mol⁻¹ más fuerte que su análogo puenteadado por hidrógeno. Similares resultados en cuanto a la fortaleza de los XH en los que el Br actúa como átomo puente frente a otras bases de Lewis, fueron obtenidos por otros investigadores, extendiéndose a diferentes campos desde ciencia de materiales a reconocimiento biomolecular y diseño de drogas. También Bogado *et al.*, han estudiado enlaces de halógeno en contexto biológico, analizando el entorno proteico de los EXs y otras contribuciones no covalentes que operan simultáneamente en el sitio de anclaje [16].

¿Cuál es su origen? No sorprende que el hidrógeno (con carga parcial positiva) resulte atraído por un átomo electronegativo, en cambio, que un átomo de halógeno fuertemente electronegativo resulte atraído por otro átomo electronegativo, resulta sumamente interesante! Politzer *et al.* [10], utilizando mapas de potencial electrostático molecular, MEP, han estudiado una serie de compuestos, que presentan átomos de halógenos covalentemente unidos, D-X, encontrando que los átomos de halógenos X

(Cl, Br y I) poseen una pequeña región (*cap*) de potencial electrostático positivo sobre su región más externa, centrada a lo largo de la extensión del enlace D–X (lo que explicaría la direccionalidad del EX). En consecuencia ellos han atribuido la formación del enlace de halógeno a la interacción electrostática atractiva entre el “*cap*” de PE > 0 (en el átomo de halógeno puente) y un par libre del átomo aceptor A. Ellos han denominado “*sigma-hole*” al “*cap*” de PE positivo. Este tipo de discusiones sobre el origen y naturaleza del enlace de halógeno fue intensa en la década pasada y al decir de Metrangolo *et al.* [7(a,d)], “*The XB concept is still in its infancy*”. Analizando el EX desde la distribución de la densidad electrónica su origen puede entenderse como la resultante de una distribución anisotrópica de la densidad electrónica en el átomo de halógeno, es decir, los átomos de halógeno pueden comportarse simultáneamente como electrófilos (por su región axial) y como nucleófilos (por su región ecuatorial) [11]. En 2009, la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC) inició un proyecto (Proyecto N° 2009-032-1-100) con el objetivo de «examinar exhaustivamente las interacciones intermoleculares en las que intervienen halógenos como especies electrófilas y clasificarlas». El proyecto concluyó en 2013 con recomendaciones de la IUPAC, donde se definían estas interacciones como enlaces de halógeno: «Un enlace halógeno se produce cuando hay evidencia de una interacción atractiva neta entre una región electrofílica asociada con un átomo de halógeno, en una entidad molecular y una región nucleofílica en otra, o en la misma, entidad molecular» [7(b-c)]. Más aún, un estudio topológico profundo basado en la distribución de la densidad electrónica mostró que estas y otras interacciones podrían describirse como interacciones *Hole-Lump* [11-12,17-18] entre concentraciones y depleciones de la densidad de carga electrónica, que se ponen al descubierto en la topología de la función Laplaciana de la densidad. Como se mostró previamente en la **Figura 2** la topología de la envolvente de la función Laplaciana de la densidad, $L(r)=0.0$ u.a., en el complejo F-Cl...NH₃ da cuenta de la alineación *Hole* –

Lump entre átomos de Cl y N, por sus regiones de depleción (como un verdadero agujero) y de concentración de densidad de carga respectivamente.

Nuestro trabajo contribuye a “tender un puente” o “acortar la brecha” entre la información contenida en modernas funciones de la onda *ab initio* y los conceptos químicos. Los pares electrónicos enlazados y no enlazados pueden ser extraídos, caracterizados y visualizados mediante la aproximación denominada “topología cuántica”. Esta aproximación tiene sus raíces en la QTAIM desarrollada por el grupo del Prof. Bader [5(a)] a partir de la década del 60-70 en la Universidad de MacMaster, Ontario, Canadá. En su forma original la teoría QTAIM tiene dos ramas: a) La topología de la densidad electrónica molecular y b) la topología de su Laplaciano. La primera permite caracterizar enlaces químicos y átomos y la siguiente provee un nuevo camino para estudiar la localización de pares electrónicos, las concentraciones/acumulación y las depleciones locales de la densidad electrónica. En esta teoría, se utiliza el campo del vector gradiente de la densidad para particionar el espacio en cuencas (*basins*) topológicas. La integración en la cuenca atómica de densidades de una determinada propiedad (población electrónica, energía cinética, potencial, electrónica total, por citar algunas) proveen importante información sobre los enlaces químicos, **basados en la topología de la distribución de la densidad electrónica, una propiedad física real de un sistema molecular.**

Sin embargo, la importancia que las interacciones “*hole-lump*” tienen en química biológica y química medicinal, aún está lejos de ser totalmente comprendida y aprovechada por la comunidad científica. Entender el conjunto de interacciones -la compleja red de interacciones- presentes en el sitio de unión de un ligando con un receptor, interacciones que se establecen entre zonas o regiones deficientes en electrones (*hole*) y regiones de alta concentración de la densidad electrónica (*lump*) y su relación con la función biológica que ella desempeña, constituye un interesante

desafío. Actualmente, no se trata de conocer que “átomos” interaccionan con que “átomos” de un aminoácido del sistema proteico que se estudie, sino de entender la distribución anisotrópica de la densidad electrónica en átomos como halógenos, calcógenos, pnícógenos y su capacidad dual de interaccionar con otros como aceptores o como dadores de electrones, en el intrincado conjunto de interacciones -simultáneas- presentes en un determinado escenario. En la actualidad, la química computacional constituye una herramienta poderosa, que puede utilizarse para disminuir los costos en investigación y desarrollo. Esta constituye además una valiosa ayuda para el trabajo experimental, un hecho que se comprueba fácilmente en la bibliografía.

Densidad de carga como un descriptor local de las interacciones moleculares en complejos Ligando/Receptor, Enz/INH. Análisis topológico de la distribución.

Según Bader [5(a)], tres hechos o elementos topológicos aparecen como consecuencia de una interacción entre dos átomos o regiones interactuantes a) un punto crítico de enlace, *Bond critical point*, (BCP), b) un camino o trayectoria de enlace o *Bond Path* (BP) y c) una superficie interatómica, *interatomic surface* (IAS). Además, para cada especie, el conjunto de trayectorias de enlace entre los átomos interactuantes definen un “grafo molecular”. El BCP o punto crítico de enlace (pce) (3,-1) aparece como un punto sobre la superficie que comparten ambos núcleos unidos. El cálculo de las propiedades topológicas locales tales como ρ_b , $\nabla^2\rho_b$, G_b , V_b , H_b , en el pce (puntos donde el gradiente de ρ_b se anula), brinda valiosa información sobre las características de la interacción. También provee una relación entre la forma de $\rho(r)$ y sus propiedades. En particular, el Laplaciano de la densidad electrónica, $\nabla^2\rho(r)$, determina las regiones donde la densidad de carga electrónica está concentrada o reducida. Para facilitar su interpretación es más conveniente definir la función $L(r) = -\nabla^2\rho(r)$, de esta manera un máximo en $L(r)$ indica una concentración de carga y un mínimo una depleción.

Los desarrollos producidos tanto en el hardware como en el software junto con el desarrollo de nuevos algoritmos permiten que la química computacional pueda utilizarse con éxito en la búsqueda de respuesta en situaciones cada vez más realistas y complejas.

Inicialmente, en colaboración con el grupo de Modelado Molecular de la UNSL dirigido por el Dr. Daniel Enriz comenzamos a trabajar en el análisis de la red de interacciones intermoleculares presentes en el bolsillo de unión de la dopamina (DA) con su receptor dopaminérgico, D₂R, en sus distintas conformaciones [4(a,b)]. Esta red de interacciones intermoleculares (C-H... π ; π ... π , O-H_{dopamina}...O, C-H...H-C, R_{arom}-

H...O, etc.) producen efectos cooperativos (positivos y negativos) que afectan las disposiciones de la dopamina en el bolsillo, como también las interacciones intramoleculares $PL_{OH} \rightarrow \pi^*$ redefinen la distribución de la densidad electrónica en el bolsillo de unión. Utilizando métodos mecanocuánticos rigurosos se realizó un estudio exhaustivo de las interacciones de DA en el bolsillo de unión de D₂R, considerando un recorte que incluyó 13 residuos. En la **Figura 3** se observan las trayectorias de enlace y los pc (3,-3); (3,-1) y (3+1); se observa claramente la formación de numerosos anillos topológicos que contribuyen favorablemente a la estabilización de la estructura.

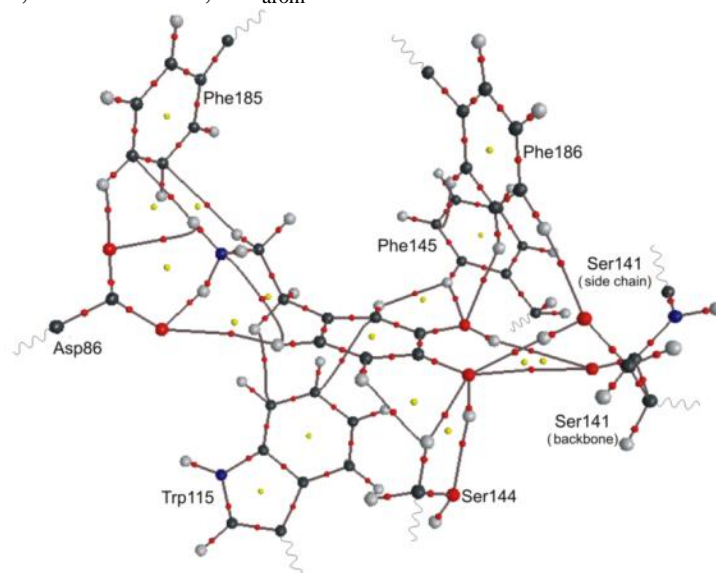


Figura 3. Grafo molecular -red de trayectorias de enlace- de dopamina, (DA) interactuando en el sitio de unión al receptor D₂ (modelo reducido que incluye 13 residuos) en la conformación, A1. Los círculos grandes (NCP) corresponden a atractores nucleares o puntos críticos (3,-3); los círculos rojos pequeños ubicados sobre las trayectorias de enlace (línea gris) corresponden a los pc de enlace o (BCP) (3,-1). Los puntos amarillos corresponden a puntos críticos de anillo o (3,+1). (Tomado de la referencia [4(b)]).

Por otra parte, el valor de la densidad electrónica en el punto crítico de enlace de una interacción ($\rho(r_b)$) es una buena estimación de la fortaleza de dicha interacción. Encontramos una relación lineal entre la suma de las contribuciones de $\rho(r_b)$ en cada punto crítico de enlace ($\sum \rho(r_b)$) entre soluto y agua y las energías de interacción total Soluta-Solvente [19(a)]. En efecto, los cálculos QTAIM permiten **cuantificar la fortaleza de cada tipo de interacción**, en

una situación de múltiples interacciones simultáneas (por relación directa entre la fortaleza de la interacción individual y la densidad electrónica en el correspondiente BCP). De esta manera, a través del cálculo de la suma de $\rho(r_b)$ de las interacciones que conectan un fragmento del ligando con el bolsillo de unión del blanco molecular, se puede estimar la fortaleza con que dicho fragmento está anclado en el bolsillo de unión y con qué peso contribuye a la energía total de

binding del complejo Este protocolo ha sido utilizado en nuestro laboratorio para evaluar la contribución a la energía de interacción enzima-sustrato, en diferentes blancos moleculares de la química medicinal [4(a,b)], [19(b-f)], [20].

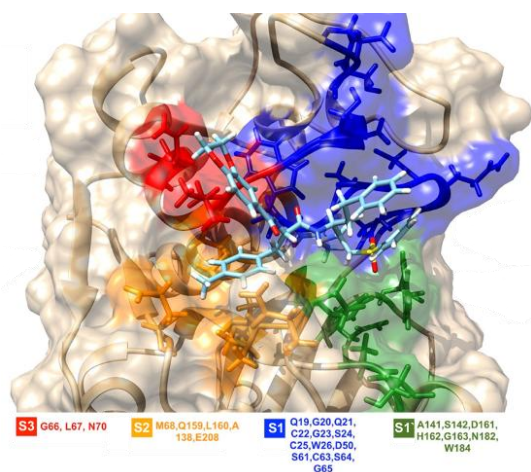
Inhibidores de Cruzipaina. ¿Cómo extraer la información desde la compleja red de interacciones moleculares?

Dada la complejidad de la red de interacciones presentes, para extraer la información de los grafos biomoleculares utilizamos modelos de aprendizaje automático con la idea de identificar las “interacciones moleculares claves” que permitan entender el mecanismo de inhibición de la enzima, y facilitar la búsqueda prospectiva de nuevos candidatos a inhibidores de Cruzipaina [20].

La Enfermedad de Chagas es una enfermedad parasitaria endémica de América Latina, causada por el protozoo hemoflagelado *Trypanosoma cruzi*. Forma parte del grupo de las denominadas “enfermedades tropicales desatendidas”

(NTD, por sus siglas en inglés de *Neglected Tropical Diseases*). Con más de 100 años desde su aparición cuenta con sólo dos fármacos disponibles para su tratamiento (Nifurtimox y Benznidazol) que fueron introducidos al mercado hace más de 50 años, con la característica de presentar baja eficacia en la etapa crónica de la enfermedad y severos efectos secundarios.

La Cruzaína o Cruzipaina (Cz), es la cisteína-proteasa principal del parásito, juega un papel vital en cada etapa de su ciclo de vida. El sitio activo de la enzima, similar a la de otros miembros de la superfamilia de papaína, se encuentra bien caracterizada. Al igual que otras cisteína proteasas, Cz posee siete subsitios que se unen a residuos peptídicos del sustrato. Cuatro subsitios en el lado acilo del enlace peptídico escindido, denominados S4, S3, S2 y S1, unen los residuos P4, P3, P2 y P1 y tres subsitios en el lado amino del enlace, llamados S1', S2', S3', que se unen a los residuos P1', P2' y P3'. De los siete, los que han sido más extensamente estudiados son S2, S1, y S1'.



Compuestos ^b	R	X	Ar	K _i (nM)
9d	4-Me	CH	DHBD	19
7d	4-Me	CH	4-CF ₃ Ph	45
6b	3-Me	CH	3,5-DiFPh	50
9b	3-Me	CH	DHBD	71
9a	H	CH	DHBD	80
7b	3-Me	CH	4-CF ₃ Ph	92
7a	H	CH	4-CF ₃ Ph	97
8c	3-CF ₃	CH	2-piridil	150
4c	3-CF ₃	CH	N-MePip	170
4a (K-777)	H	CH	N-MePip	220
8a	H	CH	2-piridil	250
8b	3-Me	CH	2-piridil	280
6d	4-Me	CH	3,5-DiFPh	350
6a	H	CH	3,5-DiFPh	980
8d	4-Me	CH	2-piridil	1700
4b	3-Me	CH	N-MePip	3300
4c	H	N	N-MePip	3600

Figura 4. Estructura 3D del sitio catalítico de Cz unido a un INH (stick celeste) mostrando los sub-bolsillos S1', S1, S2 y S3 en diferentes colores. En la Tabla adjunta se muestran los compuestos y sus valores de K_i en nM. Los residuos correspondientes a los sub-bolsillos se seleccionaron tomando una distancia de corte de 5 Å desde cada átomo del ligando. (Tomado de referencia [20]).

Aprovechando la información estructural disponible en bases de datos públicas sobre Cz unida a inhibidores covalente conocidos, junto con sus correspondientes anotaciones de afinidad (valores de K_i), en este trabajo realizamos un análisis profundo de las

interacciones moleculares en la hendidura de unión de Cz, para investigar el mecanismo de inhibición enzimática. En el grupo del Prof. Jaishankar se sintetizaron y se determinaron las constantes de inhibición para esta enzima, en una familia de vinilsulfonas con

modificaciones en las regiones P2 y P3 [21]. Tomando como “*template*” la estructura del INH k-777 (PDB ID 2OZ2), se construyeron las estructuras de los 17 análogos que contaban con datos de afinidad, realizándose a continuación simulaciones dinámicas. Dado que los cálculos mecano-cuánticos aún son irrealizables, desde el punto de vista computacional, para los complejos

biomoleculares completos, se construyeron modelos reducidos a partir de las estructuras seleccionadas de la dinámica. Se incluyeron un total de 28 residuos (~570 átomos) en los modelos reducidos: el inhibidor y los residuos circundantes en un volumen esférico de aproximadamente 5 Å centrado en los átomos del inhibidor.

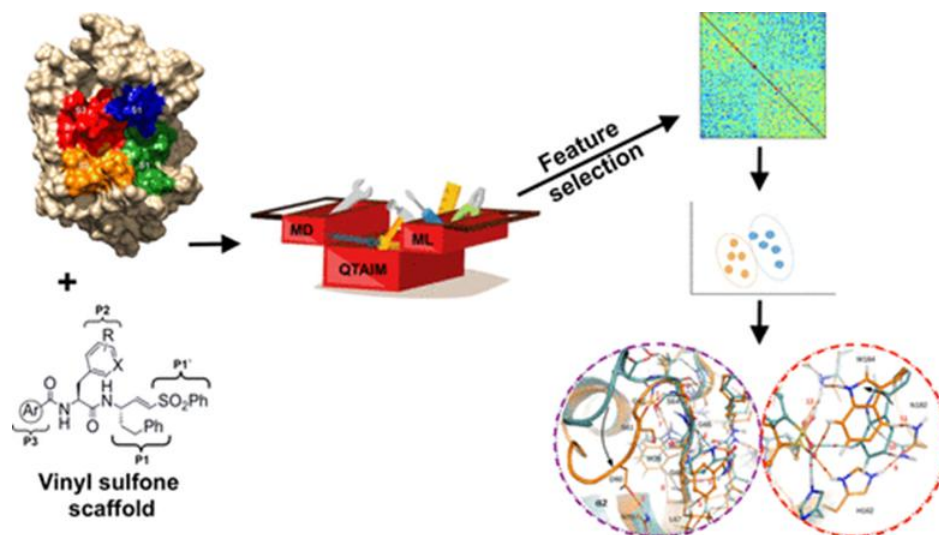


Figura 5: Combinando distintas herramientas MD/QM-QTAIM + ML para relacionar las interacciones moleculares con la actividad biológica. (Tomado de referencia [20]).

La caja de herramientas contó con métodos cuánticos y mecánicos, estáticos y dinámicos, junto con modelos de clasificación basados en aprendizaje supervisado, *Machine Learning* (ML), permitiendo clasificar las IMs en “*active-like*” e “*inactive-like*” según se identificaban en los complejos más activos o menos activos respectivamente.

Como se detalló previamente como descriptores de las interacciones moleculares se utilizaron los valores de densidad en los puntos críticos de enlace, (ρ_b). En el sitio de *binding* de cada complejo se identifican más de 300 interacciones moleculares; esta metodología permite detectar interacciones no direccionales como las que involucran electrones π en anillos aromáticos; también QTAIM permite descomponer la fuerza de anclaje total del INH con la enzima en contribuciones por sub-bolsillos de Cz. En otras palabras, podemos saber qué tan fuerte es el anclaje de los inhibidores conocidos a

cada sub-bolsillo de Cz. Además, pensamos que este análisis permitiría identificar los puntos de anclaje que se podrían mejorar, optimizando la estructura de los inhibidores, para aumentar su afinidad.³

Debido a la intrincada red de interacciones en complejos biomoleculares, extraer información de estos “grafos biomoleculares” que dan cuenta de las interacciones con valores puntuales de ρ_b no resulta trivial; por lo que se debe recurrir a otras herramientas para automatizar el proceso de extracción de información de los grafos y de este modo, explotar exhaustivamente los datos obtenidos.

³ A diferencia de la energía libre de unión, que es una propiedad global, la densidad en el punto crítico de enlace es una propiedad local cuyo valor da cuenta de la fortaleza de la interacción, de allí que es posible conocer (por sumatoria de interacciones que se establecen por sub-bolsillo) que tan fuerte es el anclaje de los INH en cada sub-bolsillo.

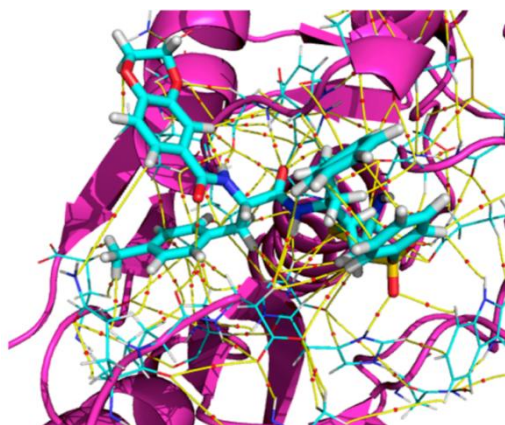


Figura 6. Red de interacciones en la hendidura de unión del complejo Cz-INH. La estructura 3D de la proteína como un conjunto de hélices y láminas y en el centro de la figura, el inhibidor, en sticks celeste. Los elementos topológicos de la densidad de carga que describen las NCI se representan con pequeños círculos rojos (BCP) y con líneas amarillas, las trayectorias de enlace. Se consideran interacciones (Cz-INH) e interacciones intramoleculares (Cz-Cz e INH-INH). (Tomado de referencia [20]).

Se entrenó un modelo de clasificación denominado Máquina de Vector Soporte o máquina de soporte vectorial con eliminación de características de forma recursiva (SVM-RFE) [22] que fue capaz de discriminar entre las interacciones presentes en los complejos formados por los inhibidores más activos (interacciones de tipo activo) y las que

ocurren en los menos activos (interacciones tipo inactivo). Se partió con un conjunto de datos que contenía inicialmente 319 interacciones por complejo, donde luego, las variables menos relevantes se eliminaron iterativamente mediante un procedimiento de selección retrospectivo.

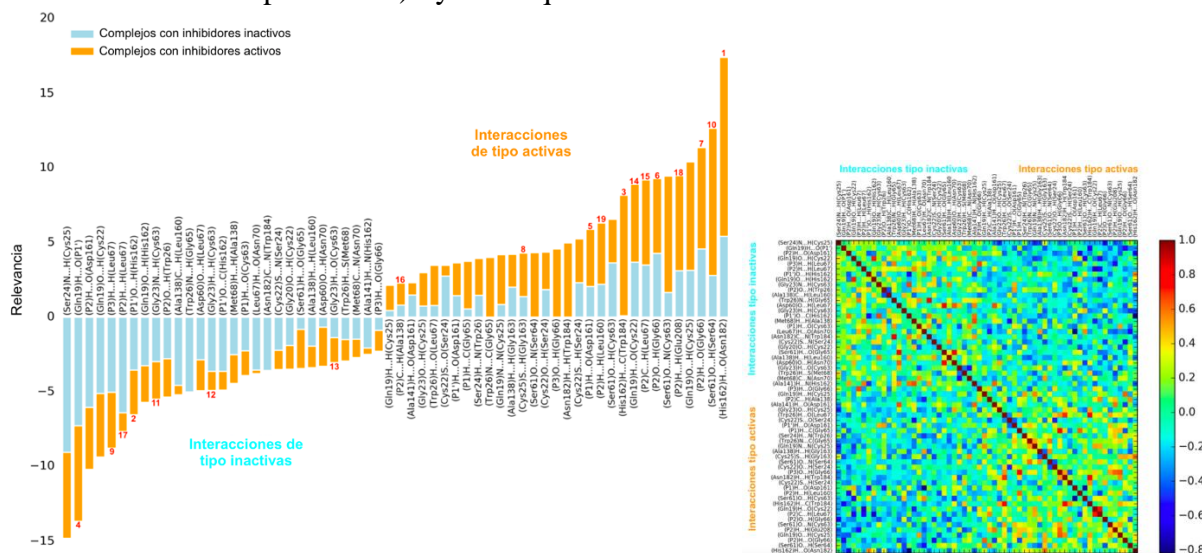


Figura 7. Principales interacciones seleccionadas por el modelo SVM para realizar las clasificaciones de clases. Sólo se muestran aquellas interacciones con coeficientes con valor absoluto mayores 2.0. Los números en rojo sobre las barras indican las interacciones discutidas en el trabajo (ver referencia [20]). La interacción 1 corresponde a (His162)H...O(Asn182).

Figura 8 Matriz de correlación basada en datos de densidad de carga de interacciones en el conjunto de complejos Cz-INH estudiados. (Tomado de referencia [20]).

La altura total de las barras apiladas, en la figura anterior, representa la importancia de la interacción para la tarea de clasificación, mientras que, en colores diferentes, se muestra cuanto es la contribución de los datos pertenecientes a cada una de las dos clases (naranja/activa), (celeste/inactiva), a la relevancia total de la interacción.

Como se puede ver en la **Figura 7**, las interacciones con coeficientes positivos tienen en general mayores contribuciones de compuestos etiquetados como activos, mientras que lo contrario ocurre para las interacciones con coeficientes negativos, es decir, sus contribuciones más importantes provienen de compuestos etiquetados como inactivos. Entre las interacciones que prevalecen en el grupo de inhibidores más activos de Cz, el enlace de hidrógeno N-H...O=C entre cadenas laterales de His162 (protonada) y Asn182 en el subsitio enzimático S1' es el más relevante para la tarea de clasificación.

Por lo tanto, utilizando un modelo de clasificación de SVM lineal, simple e interpretable, junto con un procedimiento RFE, fue posible extraer información útil sobre cuáles son las interacciones más importantes para discriminar entre compuestos activos e inactivos (o menos activos) frente a Cz. Posteriormente, se calculó la matriz de correlación **Figura 8** basada en la densidad de carga que describe cómo se relacionan las interacciones entre sí en los complejos estudiados. La **Figura 8** muestra que existe una “correlación negativa” entre las interacciones que prevalecen en complejos de compuestos etiquetados como activos e inactivos respectivamente. Esto significa que a medida que las primeras interacciones se vuelven más fuertes, las últimas se debilitan. Este hallazgo sugiere que los compuestos activos e inactivos (menos activos) podrían estabilizar diferentes conformaciones de Cz.

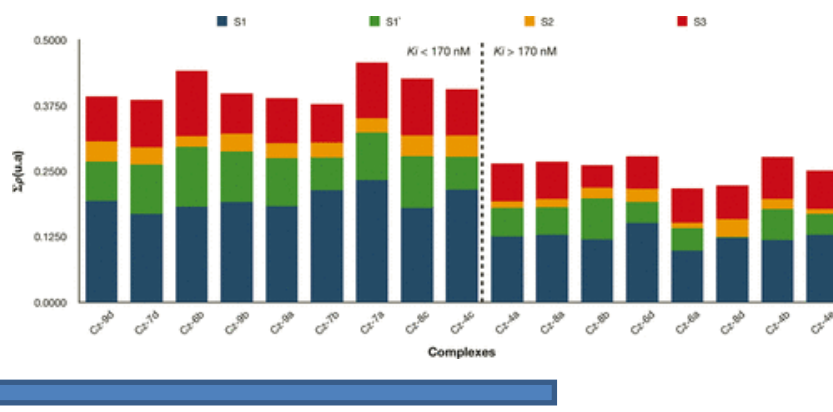


Figura 9. Sumatoria de los valores de densidad de carga en los BCP debido a interacciones intra- e intermoleculares en complejos Cz-INH. Los valores se dividen en cuatro contribuciones correspondientes a los sub-bolsillos S1 (azul), S1' (verde), S2 (anaranjado) y S3 (rojo). De izquierda a derecha, los complejos se ordenan en valores crecientes de K_i . La línea de puntos separa los complejos según el umbral de decisión ($K_i > 170$ nM ; $K_i < 170$ nM). (Tomado de referencia [20]).

Como se puede observar en la **Figura 9** al pasar de los inhibidores menos activos a los más activos, la fuerza de anclaje del inhibidor cuantificada por ($\sum \rho(r_i)$) aumenta en todos los subbolsillos de la enzima, por lo que no puede atribuirse el fortalecimiento del anclaje a un solo subsitio. Esta fuerte comunicación entre los diferentes sub-bolsillos enzimáticos anticipa que la optimización de interacciones por separado en cada uno de los sub-bolsillos de la enzima podría ser difícil de lograr.

Estos resultados junto con el análisis de las trayectorias de dinámica molecular (DM), revelaron cómo las interacciones entran en juego simultáneamente para disponer a la enzima en un estado conformacional particular. En otras palabras, la mayoría de los inhibidores activos inducen cambios conformacionales dentro de la enzima que conducen a un mejor ajuste general del ligando dentro del sitio catalítico.

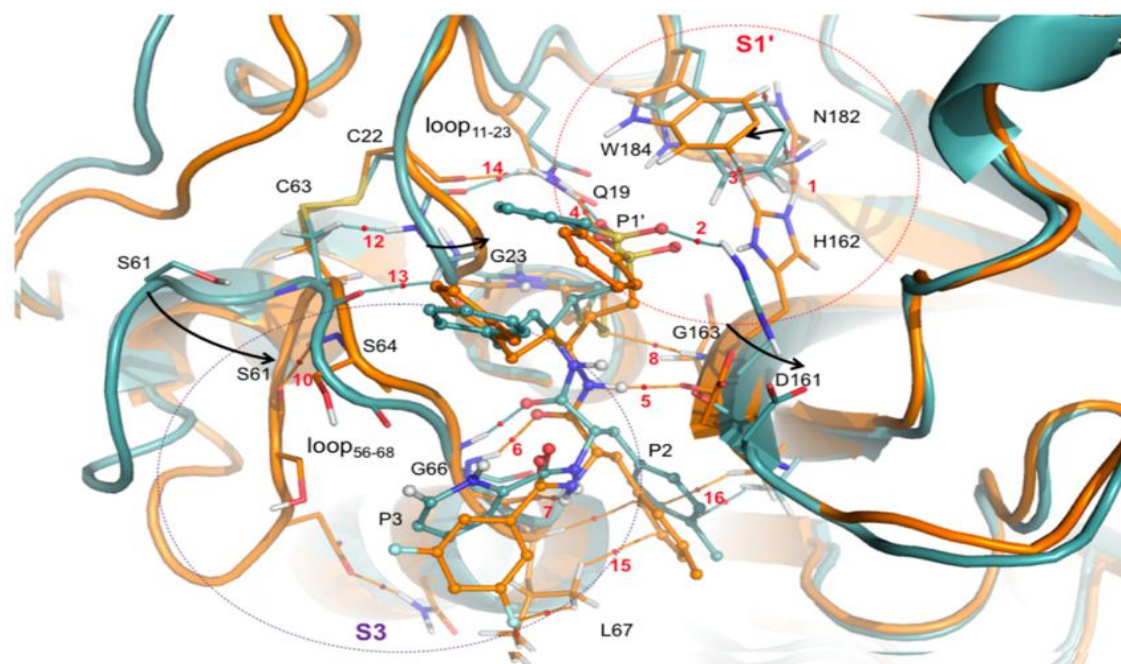


Figura 10 Superposición estructural de complejos Cz-6b (anaranjado) y Cz-8d (ciano). También se representan elementos topológicos de densidad de carga, los caminos de enlace que conectan los núcleos se representan en naranja y azul para Cz-6b y Cz-8d respectivamente. Los puntos críticos de enlace (BCP) se muestran como pequeñas esferas rojas. Los números en rojo indican las interacciones más significativas (al igual que en la Figura 7). Las flechas indican el desplazamiento de la cadena principal de la proteína entre los complejos Cz-8d (inactiva) y Cz-6b (activa). (Tomado de referencia [20]).

Breve análisis de las interacciones más importantes en la tarea de clasificación.

Se conoce de estudios anteriores que la interacción (His162)H...O(Asn182) facilita la formación del par iónico tiolato-imidazolio (Cys25)S⁻...+H-N(His162) necesario para la catálisis. Por tanto, es notable que esta interacción se forme en compuestos de la clase activa, como el compuesto 6b, pero no por compuestos de la clase inactiva, como el compuesto 8d. Esto significa que los compuestos etiquetados como activos por el clasificador imitan mejor al complejo enzima-sustrato porque son capaces de acomodar la maquinaria catalítica **como si estuviera a punto de escindirse** un enlace del sustrato.

En complejos con inhibidores de la clase inactiva, la cadena lateral de la His162 se desplaza lejos de Asn182, acercándose hacia el grupo sulfonilo de los inhibidores en posición P1'. Este desplazamiento forma una fuerte interacción (P1')S=O...⁺H-N(His162) que es una de las principales características del modelo de aprendizaje automático entre

compuestos etiquetados como inactivos (interacción 2) en las Figuras 7 y 10. Por el contrario, en los complejos de compuestos de la clase activa, se observan cambios opuestos: la interacción 2 se debilita y la His162 se mueve hacia Asn182 para formar la interacción 1.

Sin embargo, antes de que se pueda establecer la interacción 1, el anillo Trp184 debe primero “desocupar” la región entre los residuos His162 y Asn182. Al hacerlo, Trp se aleja de Asn182 y termina justo encima del anillo His162 donde la nube de electrones π del Trp forma una interacción de π ...H con un átomo de hidrógeno no polar de His. Esta interacción, etiquetada como 3 en las figuras anteriores, también es considerada por el modelo SVM-RFE como una de las principales interacciones entre la clase activa de inhibidores.

Consideramos que estos hallazgos recuperados con la ayuda de un modelo de *Machine Learning* son significativos porque Trp184 es un residuo altamente conservado

entre las cisteína proteasas lisosómicas pertenecientes a la superfamilia de papaína, y en trabajos anteriores se lo señalaba como el "orquestador" de la tríada catalítica Cys25-His162-Asn182. En consecuencia, con base en nuestros resultados y hallazgos previos, proponemos que Trp184 podría actuar como un "interruptor" para la formación de la interacción 1.

Continuando con el análisis de interacciones relevantes en el subsitio S1', se puede ver en la **Figura 10** que el grupo sulfonilo del inhibidor se mantiene en su lugar en la entrada del subsitio S1'. Esto ocurre gracias a la formación de dos interacciones O...H fuertes entre ambos átomos de O sulfonílicos. La primera con un átomo de H del anillo imidazol His162 (interacción 2) y la segunda con un átomo de H del grupo amida de la cadena lateral Gln19 (interacción 4). Ambas interacciones son características relevantes entre la clase inactiva de inhibidores como se evidencia en la **Figura 7**. Esto significa que estas interacciones son más fuertes en complejos con inhibidores de la clase inactiva y se rompen o debilitan en complejos con inhibidores de la clase activa.

Conclusiones

En este trabajo, se realizó una breve exposición de las interacciones no covalentes, intentando destacar además de su importancia en distintos campos, el gran interés que despierta su estudio en la comunidad científica y las recomendaciones que ha generado la IUPAC en los últimos 10 años. A continuación se destacó la contribución que el análisis topológico de la distribución de la densidad electrónica y de su función derivada, y la función laplaciana pueden aportar a este tema. Se comentó también la complejidad de la red de interacciones en contexto biológico, en complejos ligando-receptor y en mayor detalle, en el caso de inhibidores enzimáticos de Cruzipaina. En este último caso, se utilizaron distintas herramientas computacionales DM-QM-QTAIM y posteriormente herramientas de *Machine Learning*, como Máquina de vector soporte con eliminación recursiva de variables SVM-RFE para comprender desde el análisis de la densidad electrónica de los complejos Cz-

INH, la relación entre las interacciones en la hendidura de la enzima, que operan simultáneamente en el "evento de binding" y de esta forma comprender el mecanismo de inhibición de la enzima.

Se trabajó con 17 complejos de Cz con inhibidores covalentes, [Cz-INH], cuyos datos de afinidad eran conocidos y se encontraban reportados en la bibliografía. La teoría QTAIM proporcionó los elementos topológicos de la densidad de carga que describen las interacciones en los complejos Cz-INH. Con más de trescientas interacciones moleculares por complejo, entrenamos un modelo de clasificación de aprendizaje supervisado, denominado máquinas de vector soporte, con eliminación recursiva de variables, SVM-RFE. Este modelo, **lineal y simple**, fue capaz de discriminar entre las interacciones presentes en los complejos de los inhibidores más activos (clasificadas como activas) y las que ocurren en los menos activos (clasificadas como inactiva). El modelo también proporcionó información sobre la importancia de cada interacción, es decir, cuáles son las interacciones más importantes para discriminar entre ambas clases. Este estudio nos permitió señalar 19 interacciones principales, tanto intermoleculares como intramoleculares, que logran explicar los principales cambios en los complejos analizados.

El análisis de las interacciones intermoleculares reveló que los enlaces de hidrógeno de las cadenas principales de inhibidores de tipo peptídicos y la enzima, en particular aquellas interacciones con el residuo Leu67 desempeñan un papel clave en el anclaje adecuado del inhibidor al sitio de unión de Cz. Sin embargo, no se logró derivar una relación cuantitativa estructura-actividad considerando sólo las interacciones intermoleculares entre los residuos de Cz y los átomos de los inhibidores. La inclusión en el modelo de interacciones entre residuos de la proteína (Cz-Cz) expuso un mecanismo más indirecto de inhibición enzimática que involucra cambios conformacionales extensos dentro de la estructura de la proteína. Las interacciones en el sub-bolsillo S2 estarían

involucradas en los cambios conformacionales que ocurren en la pared derecha del sitio catalítico, mientras que las interacciones en el subsitio S3 impulsan principalmente cambios conformacionales en la pared izquierda de la hendidura. Ambos cambios conformacionales finalmente conducen a reordenamientos de residuos en el sub-bolsillo S1' que permiten el posicionamiento adecuado del grupo reactivo vinilsulfona; esta situación permite la formación de interacciones clave entre el inhibidor y los residuos del sitio.

Por último, los reordenamientos de residuos en el subsitio S1' en los complejos de la mayoría de los inhibidores activos implican la formación de enlaces de hidrógeno entre los residuos de la tríada catalítica considerados "una marca distintiva del evento de reconocimiento del sustrato". Esto significa que es probable que la enzima reconozca estos inhibidores de alta afinidad como si fueran su propio sustrato, de modo que la maquinaria catalítica se acomoda como si estuviera a punto de romper el enlace escindible del sustrato.

En otras palabras, se ha encontrado que la mayoría de los inhibidores de Cz activos inducen una conformación en la que están presentes interacciones consideradas como distintivas del evento de reconocimiento del sustrato. En consecuencia, esta estructura de Cz "activada", puede utilizarse en experimentos de *docking* molecular sobre bases de datos, en el contexto de campañas de cribado virtual prospectivas, para hallar inhibidores altamente activos de Cz.

Finalmente, las interacciones no covalentes están presentes en variados escenarios [23] y son un tema de creciente interés, sin embargo, aún no forman parte de la gran comunidad de químicos. Esperamos contribuir aquí a su difusión y aceptación general.

Referencias

- [1] (a) H. J. Schneider, *J. Phys. Org. Chem.* 2022, 35(7), e4340. (b) P. A. Kollman, *Acc. Chem. Res.* 1977, 10, 365–371. (c) S. Mahadevi, G. Narahari Sastry, *Chem. Rev.* 2016, 116, 5, 2775-2825.
- [2] J.-M. Lehn, *Supramolecular Chemistry. Concepts and Perspectives*. Wiley-VCH, Weinheim, 1995.
- [3] (a) P. Hobza, K. Müller-Dethlefs, *Non-Covalent Interactions. Theory and Experiment*. Royal Society of Chemistry Nottingham, 2010. (b) H. M. Lee, J. Singh, K. S. Kim, in: *Hydrogen Bonding - New Insights*. (Ed.: S. Grabowski), Springer, Dordrecht, 2006.
- [4] (a) S. A. Andujar, R. D. Tosso, F. D. Suvire, E. L. Angelina, N. M. Peruchena, N. Cabedo, D. Cortes, R. D. Enriz, *J. Chem. Inf. Mod.* 2011, 52, 99-112. (b) E. L. Angelina, S.A. Andujar, R. D. Tosso, R. D. Enriz, N.M. Peruchena, *J. Phys. Org. Chem.* 2014, 27, 128–134.
- [5] (a) R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*. Oxford University Press, Oxford, U.K., 1990. (b) P. L. A. Popelier, *Atoms in Molecules. An Introduction*. Pearson Education: Harlow, UK, 2000. (c) C. F. Matta, R. J. Boyd, *The Quantum Theory of Atoms in Molecules: From Solid State to DNA and Drug Design*. Wiley-VCH: Weinheim, 2007.
- [6] (a) E. Arunan, G. R. Desiraju, R. A. Klein, J. Sadlej, S. Scheiner, I. Alkorta, D. C. Clary, R. H. Crabtree, J. J. Dannenberg, P. Hobza, H. G. Kjaergaard, A. C. Legon, B. Mennucci, and D. J. Nesbitt, *Pure Appl. Chem.* 83(8), 2011, 1637-1641. (b) IUPAC Project - "Categorizing Hydrogen Bonding and Other Intermolecular Interactions". (c) J. J. Dannenberg, *J. Phys. Chem. A* 2006, 110, 5798-5802.
- [7] (a) P. Metrangolo, G. Resnati, *Science* 2008, 321, 918-919. (b) G. R. Desiraju, P. S. Ho, L. Kloo, A. C. Legon, R. Marquardt, P. Metrangolo, P. Politzer, K. Rissanen. *Pure Appl. Chem.* 2013, 85, 1711-1713. (c) IUPAC Project N° 2009-032-1-100 "Categorizing Halogen Bonding and Other Noncovalent Interactions Involving Halogen Atoms". *Chem. Int.* 2010, 32, 20-21. (d) G. Cavallo, P. Metrangolo, R. Milani, T. Pilati, A. Priimagi,

- G. Resnati, G. Terraneo, *Chem. Rev.* 2016, 116(4), 2478-2601.
- [8] C. B. Aakeroy, D. L. Bryce, G. R. Desiraju, A. Frontera, A. C. Legon, F. Nicotra, K. Rissanen, S. Scheiner, G. Terraneo, P. Metrangolo, G. Resnati, *Pure Appl. Chem.* 2019; 91(11): 1889–1892
- [9] G. Resnati, D. Bryce, G. R. Desiraju, A. Frontera, I. Krossing, A. C. Legon, P. Metrangolo, F. Nicotra, K. Rissanen, S. Scheiner, G. Terraneo, *Pure Appl. Chem.* 2024, 96(1), 135-145.
- [10] (a) T. Clark, M. Hennemann, J. S. Murray, P.J. Politzer, *J. Mol. Model.* 2007, 13, 291-296. (b) P. Politzer, P. Lane, M. C. Concha, Y. G. Ma, J. S. Murray, *J. Mol. Model.* 2007, 13, 305-311. (c) J. S. Murray, P. Lane, P. J. Politzer, *J. Mol. Model.* 2009, 15(6), 723-729.
- [11] N. J. Amezaga, S. C. Pamies, N. Peruchena, G.L. Sosa, *J. Phys. Chem. A* 2010, 114, 552– 562.
- [12] K. Eskandari, H. Zariny, *Chem. Phys. Lett.* 2010, 492, 9-13.
- [13] D. J.R. Duarte, E. L. Angelina, N. M. Peruchena, *Comp.Theor. Chem.* 2012, 998, 164-172.
- [14] (a) P. Gilli, V. Bertolasi, L. Pretto, V. Ferretti, G. Gilli, *J. Am. Chem. Soc.* 2004, 126, 3845-3855. (b) G. Gilli, P. Gilli, *The Nature of the Hydrogen Bond: Outline of a Comprehensive Hydrogen Bond Theory*. International Union of Crystallography, Oxford Science Publications: Oxford, UK, 2009
- [15] F. Hibbert, J. Emsley, *Adv. Phys. Org. Chem.* 1990, 26, 255-379.
- [16] M. L. Bogado, R. N. Villafañe, J. L. Gómez Chavez, E.L. Angelina, G. L. Sosa, N.M. Peruchena, *J. Chem. Inf. Model.* 2022, 62, 6494 – 6507.
- [17] D.J.R. Duarte, G.L. Sosa, N.M. Peruchena, *J. Mol. Model.* 2013, 19, 2035–2041.
- [18] D.J.R. Duarte, N.M. Peruchena, I. Alkorta, *J. Phys. Chem. A* 2015, 119, 16, 3746–3752.
- [19] (a) M. M. Vallejos, N. M. Peruchena, *J. Phys. Chem. A* 2012, 116, 4199-4210. (b) A. M. Luchi, E. L. Angelina, S. A. Andujar, R. D. Enriz, N. M. Peruchena, *J. Phys. Org. Chem.* 2016, 29, 645-655. (c) L. J. Gutierrez, E. L. Angelina, A. Gyebrovski, L. Fülöp, N. M. Peruchena, H. A. Baldoni, B. Penke, R. D. Enriz, *J. Biomol. Struct. Dyn.* 2017, 35(2), 413-426. (d) A. M. Luchi, E. L. Angelina, M.L. Bogado, S. Forli, A. Olson, N. M. Peruchena, *Mol. Informatics* 2018, 37, 1800053. (e) R. D. Tosso, O. Parravicini, M.N.C. Zarycz, E. L. Angelina, M. Vettorazzi, N. M. Peruchena, S. Andujar, R. D. Enriz, *J. Comput. Chem.* 2020, 41, 1898-1911. (f) A. M. Torres, G. A. Ojeda, E. L. Angelina, S. Bustillo, N. Peruchena, L. Tonidandel, R. Larcher, T. Nardin, E. Dellacassa, *J. Ethnopharmacol.* 2023, 302, 115889.
- [20] A. M. Luchi, R. N. Villafañe, J.L. Gómez Chávez, M.L. Bogado, M. L., E. L. Angelina, N. M. Peruchena, *ACS Omega* 2019, 4, 19582-19594.
- [21] P. Jaishankar, E. Hansell, D.-M. Zhao, P. S. Doyle, J. H. McKerrow, A. R. Renslo, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2008, 18, 624–628.
- [22] S. Suthaharan, Support vector machine. In: *Machine Learning Models and Algorithms for Big Data Classification*. Integrated Series in Information Systems; Springer: Boston, MA, USA, 2016.
- [23] (a) A. N. Petelski, D.J.R. Duarte, N.M. Peruchena, *Chemphyschem.* 2023; 24 (7): e202200768. (b) A. N. Petelski, S.C. Pamies, A.G. Sejas, N.M. Peruchena, G.L. Sosa, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2019, 21, 8205–8214.

SOBRE SIMETRÍAS EN CIENCIAS FÍSICO-QUÍMICAS

Francisco José Arrieta Zucalli^{1,2}; Marcela Zucalli^{1,*}

1- CMaLP - Departamento de Matemática de la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP.

2- Instituto Argentino de Matemática, CONICET.

E-mail: marcezucalli@gmail.com.**Resumen**

Indiscutiblemente, la simetría ha ejercido una gran fascinación a lo largo de la historia del hombre y es un concepto fundamental en numerosas disciplinas científicas. En esta nota nos referimos a la noción de simetría en distintos contextos y en particular discutimos algunas de sus múltiples aristas tanto en geometría como en ciencias físico-químicas.

Palabras Clave: Simetrías, cantidades conservadas, geometría.

Abstract

Symmetry has undoubtedly exerted a great fascination throughout the history of humankind and it's a fundamental concept in numerous scientific disciplines. In this short essay we refer to the notion of symmetry in different contexts and in particular we discuss some of its many sides both in geometry and in physical and chemical sciences.

Keywords: symmetries, conserved quantities, geometry.

Introducción

La palabra simetría suele sugerir ideas tales como armonía o equilibrio entre las partes de un todo y en general se la asocia con el orden y la belleza. La etimología dice que el origen de la palabra simetría viene del latín *symmetria* y éste del griego *συμμετρία*. Este vocablo griego está formado por el prefijo *συμ* (sym=con, en conjunto), la raíz *μετρον* (metrón= medida) y el sufijo *ια* (ia=cualidad) y puede interpretarse como “la medición en conjunto de cualidades”, “reducción a una medida común”, “justa proporción” o “medir por comparación” [1].

El profundo significado que los griegos daban a la noción de simetría quizás pueda sintetizarse en la conocida frase del filósofo griego Aristóteles (384-322 a.C.) que afirmó que la belleza depende tanto del tamaño como de la simetría [2]. Ahora bien, aunque el origen etimológico de la palabra es griego, algunos autores afirman que en la antigua

Grecia en realidad no existía el término simetría ni una definición explícita de ella. Según estos estudiosos, los griegos manejaban un conjunto de nociones (proporción, equilibrio, permanencia, indiferencia, armonía y orden) que estaban estrechamente vinculadas a la idea de simetría y que proporcionaban criterios para describir la belleza de los objetos. De esta forma, la ausencia del término simetría en el mundo antiguo llevaba a los griegos a mostrarla de una forma implícita relacionándola con el conjunto de nociones que la identificaban [3].

Es natural preguntarse cómo estas ideas pueden estar relacionadas con afirmaciones tales como “la simetría de las leyes de la naturaleza”, “compuestos químicos simétricos” y “la simetría de los logos” que van más allá de la mera idea intuitiva de armonía.

El diccionario de la RAE, según aparece en [4], dice que una simetría es una “correspondencia exacta en forma, tamaño y posición de las partes de un todo”. También especifica que en biología una simetría es una “correspondencia que se puede distinguir, de manera ideal, en el cuerpo de una planta o de un animal respecto a un centro, un eje o un plano, de acuerdo con los cuales se disponen ordenadamente órganos o partes equivalentes” y que en geometría es una “correspondencia exacta en la disposición regular de las partes o puntos de un cuerpo o figura con relación a un centro, un eje o un plano”. Sus sinónimos o términos afines son “correspondencia, proporción, compensación, disposición, armonía, equilibrio, semejanza, igualdad, paridad, regularidad, perfección”.

El dibujo de Leonardo da Vinci que es considerado por excelencia el símbolo de la simetría del cuerpo humano (y para muchos por extensión del universo en su conjunto) es el Hombre de Vitruvio. Leonardo, quien nunca recibió una educación formal en matemática, sí gozaba de una notable intuición espacial y geométrica que se halla presente en muchas de sus

obras tanto artísticas como ingenieriles. Su falta de conocimiento teórico fue compensada por su talento visual para el espacio y dijo en su bien conocido *Tratado de la pintura* que no hay estudio del hombre que merezca llamarse ciencia si no se basa en la demostración y argumentación matemática.

Por otro lado, a lo largo de toda la historia, el hombre se ha maravillado con la simple belleza de las esferas y los triángulos equiláteros (triángulos cuyos lados y ángulos tienen la misma medida) que son considerados como símbolos por excelencia de la perfección. Es inmediato observar que estos cuerpos y figuras presentan cierto tipo de invarianza que se pueden relacionar con la armonía de su aspecto.

LA TRANSVERSALIDAD DE LAS SIMETRÍAS

Es indudable que la noción de simetría es transversal a la historia del hombre ya que desde la antigüedad y hasta nuestros días, de una manera u otra, ella se encuentra presente en diferentes situaciones y contextos. También es bien sabido que la noción de simetría aparece en distintas ciencias y disciplinas tales como la música, la literatura, las artes plásticas, la arquitectura, el diseño gráfico, la informática, la biología y de manera insoslayable y sorprendente en la física, la química y la matemática toda. Mencionemos simetrías presentes en algunos de estos contextos.

Una de las características más fascinantes de la música es que con la creación de patrones y estructuras se logra que las distintas composiciones creen una sensación de equilibrio y armonía. La simetría es uno de los elementos clave que contribuyen a generar estas experiencias y se la puede encontrar en varios aspectos de la música, desde la melodía y el ritmo hasta la estructura misma de las obras. Existen diferentes tipos de simetría que se pueden aplicar en la música. Algunos de los más comunes son los siguientes. *Simetría axial*: Se basa en la repetición de una secuencia musical en sentido inverso, creando un efecto de espejo. *Simetría radial*: Se basa en la repetición de una secuencia musical en varias direcciones, creando un efecto de rotación. *Simetría traslacional*: Se basa en la repetición de una secuencia musical en el tiempo, creando un efecto de desplazamiento.

A lo largo de la historia muchos fueron los que se interesaron por estudiar la relación que existe entre la literatura y la matemática y, en particular, se ha analizado la noción de simetría en la literatura. Muchos poetas contemporáneos utilizan la simetría de reflexión de maneras ricas e innovadoras. La escritora africana Marian Christie, que estudió Filología Clásica y Matemática, dice que la simetría ha estado presente en la poesía desde tiempos remotos. La poeta británica Julia Copuss ha ideado una forma poética en la que la segunda mitad de un poema es, verso por verso, una imagen especular de la primera. Lo llama poema especular (de *speculum*, palabra latina que significa espejo). Sus hábiles variaciones en la puntuación permiten transiciones suaves de verso a verso y cambios sutiles de significado como en el conmovedor poema “El asiento trasero del coche de mi madre”. En su artículo *Conjuntos semejantes que cruzan ocultos y callados* la rima XXXIV de Gustavo Adolfo Becquer, José Cardona Lopez afirma que en esta rima de Becquer (1836-1870), que como todas ellas es aparentemente simple y tal vez por eso mismo inolvidable, hay una composición de naturaleza matemática en la recurrente presencia de simetrías entre las unidades sintácticas y aún entre las estrofas.

Si hablamos de simetría en el arte, no podemos dejar de nombrar al artista holandés Maurits Cornelis Escher (1898-1972) que ha dejado un profundo surco en el mundo de las artes plásticas. Gran parte de su trabajo está estrechamente ligado con la geometría ya que buena parte de su obra trata sobre la partición regular del plano y el uso de patrones que rellenan el espacio sin dejar ningún hueco. Visitó dos veces la Alhambra y cuando lo hizo por segunda vez, en 1936, con la ayuda de su esposa copió numerosos motivos ornamentales. De regreso a su país, leyó libros de ornamentos y matemática y las ilustraciones de estos últimos le resultaron de suma utilidad. Así su obra fue profundamente influenciada por el uso de la simetría. También la simetría puede considerarse como la expresión geométrica del equilibrio y la justicia según puede verse en la balanza que se usa para representar la justicia, donde alrededor de un eje de simetría aparecen diferentes factores y proporciones que se compensan unos a otros.

La arquitectura busca combinar belleza y funcionalidad en la construcción de espacios. La simetría desempeña un papel fundamental en la arquitectura, ofreciendo un equilibrio estético y visualmente agradable. Los diferentes tipos de

simetría, tales como la bilateral, radial y axial, permiten a los arquitectos crear diseños únicos y expresivos. Cada tipo de simetría tiene sus propias características y se utiliza en función de los objetivos y la estética deseados: Así, elegir qué tipo de simetría se va a usar es fundamental en el proceso de diseño. Podemos destacar hermosas construcciones que deslumbran con sus simetrías que van desde templos de distintas religiones y pirámides de diferentes culturas hasta palacios reales y edificios de gobierno. Por ejemplo, los edificios islámicos como el Taj Mahal y la mezquita de Sheikh Lotfollah hacen un uso elaborado de la simetría tanto en su estructura como en su ornamentación. Los edificios moriscos como la Alhambra están ornamentados con patrones complejos realizados utilizando simetrías de traslación y reflexión, así como rotaciones.

La simetría también es un concepto básico en el diseño gráfico. Algunos de los beneficios de un diseño que explota las simetrías son el orden visual (que facilita la comunicación efectiva, evitando posibles confusiones), la armonía y equilibrio (que genera una sensación agradable a la vista) y el fijado del foco de atención (se capta fácilmente la atención del destinatario y lo guía con naturalidad hacia la información relevante).

El éxito de las aplicaciones de las simetrías en tantas disciplinas ha motivado el interés en explorar sus posibles usos en el mundo del software. Existen autores que basan su investigación en una noción informal de que la simetría es la posibilidad de realizar un cambio mientras algún aspecto permanece inmune a este cambio. Así, la simetría representa una dualidad de cambio y constancia a partir de la cual se está estudiando cómo realizar algunas construcciones de lenguajes orientados a objetos.

La simetría biológica se puede considerar como una distribución equilibrada de partes o formas corporales duplicadas dentro del cuerpo de un organismo. Es importante destacar que la simetría en biología siempre es aproximada. Por ejemplo, las hojas de las plantas aunque se consideren simétricas, rara vez coinciden exactamente cuando se pliegan por la mitad. La mayoría de los organismos pluricelulares exhiben algún tipo de simetría, ya sea radial o bilateral, aunque una pequeña minoría no presenta ningún tipo de simetría y son llamados asimétricos (faltos de simetría).

De todas maneras, antes de continuar encontrando simetrías, observemos que en todas las disciplinas son igualmente interesantes las asimetrías. Aún en la Antigua Grecia no todo era proporción y simetría. Como bien sabemos la indumentaria típica consistía en una túnica rectangular sujeta sobre el hombro derecho. También la deslumbrante arquitectura griega cuenta con construcciones caracterizadas por la asimetría, tales como el templo de Erecteón. Incluso en la ya mencionada Alhambra encontramos asimetría cromática dentro de sus alicatados, pero no dudamos de su belleza cautivante. Comentaremos más adelante que también en las ciencias físico-químicas se presentan asimetrías.

LAS SIMETRÍAS COMO TRANSFORMACIONES

Se observan tantas simetrías que surge naturalmente preguntarse: ¿por qué ciertos objetos presentan simetrías y otros no? ¿Cómo pueden detectarse las simetrías de un objeto? ¿Cómo se las pueden describir y clasificar? ¿Una simetría puede resultar útil además de bella? ¿Da lugar a otras ideas interesantes?

En general, podemos pensar que una simetría es un rasgo característico de ciertos objetos materiales o entidades abstractas que pueden someterse a la acción de ciertas transformaciones u operaciones. La simetría da cuenta de la invarianza de estos objetos o entidades frente a una de estas operaciones dadas. Como ejemplos sencillos, podemos imaginar una circunferencia dibujada en un papel, la cual no sufre cambios al rotar el papel. Por otro lado, si dibujamos en el mismo papel un triángulo equilátero, solamente observaremos el “mismo” triángulo si la rotación es de (un múltiplo entero de) 120° ; es decir que esta figura tiene menos simetrías que una circunferencia. Peor aún es el caso de los triángulos no equiláteros, que al ser rotados en un ángulo arbitrario dan lugar a una figura que se puede distinguir a simple vista de la original, excepto en el caso de que la rotación sea de una cantidad entera de vueltas (es decir, un múltiplo entero de 360°). En el espacio, se puede observar algo similar cuando se considera una esfera, los famosos sólidos platónicos (entre los cuales se encuentra el cubo) y cuerpos totalmente irregulares.

Las transformaciones consideradas no son cualesquiera ya que verifican las siguientes

propiedades: efectuar una transformación y a continuación otra da lugar a una nueva transformación (ley de cierre). Si se consideran tres transformaciones arbitrarias con cierto orden, no importa cómo se realice su agrupamiento para aplicarlas, la transformación resultante es la misma (asociatividad). Existe una única transformación que no modifica el objeto; esta transformación se llama transformación identidad (existencia de neutro). Cada transformación admite una única transformación (que llamamos transformación inversa) que deshace lo que ella hace (existencia de inverso). Esto dice que el conjunto de transformaciones respecto a las que un objeto es simétrico tiene estructura algebraica de grupo y debido a su origen, estos grupos reciben el nombre de grupos de simetrías. Así, se puede pensar a una simetría como una transformación que no tiene en cuenta cuáles son los objetos a los cuales se las aplica, y se puede estudiar cómo se relaciona con otras transformaciones del mismo grupo. Por ejemplo, en el párrafo anterior hemos considerado simetrías de rotación en el plano y en el espacio.

Notemos que los nombres que llevan estas propiedades que caracterizan a un grupo nos recuerdan a aquellos que tenían las propiedades de las operaciones en el conjunto de los números enteros (entre otros). Si bien ésto no es casualidad, tratemos de concentrarnos en los ejemplos geométricos, que quizás resulten más tangibles. Es sencillo ver que las rotaciones en el plano (y también en el espacio) cumplen todas estas propiedades. En el plano, podemos pensar en que rotar 90° y luego rotar otros 30° es como haber rotado 120° de una sola vez. Se puede observar que estamos hablando de las operaciones de rotación en sí mismas, sin aludir a ningún objeto concreto que se esté rotando.

La teoría de grupos se ocupa, entre otros aspectos, de la clasificación de los grupos que está estrechamente relacionada con la clasificación de las simetrías de un objeto. Es una de las teorías más hermosas del álgebra y sus raíces históricas se remontan al estudio de las ecuaciones algebraicas, la teoría de números y la geometría. Grandes matemáticos como Euler, Gauss, Lagrange, Abel y Galois fueron sus creadores. Es realmente notable cómo una estructura algebraica tan simple aparece en tantos contextos. Varios sistemas físicos así como los cristales y el átomo de hidrógeno pueden modelarse mediante grupos de simetrías. Así, la teoría de grupos (y sus llamadas representaciones) tienen muchas aplicaciones importantes en física,

en química y en la ciencia de los materiales, entre otras. Para ver una definición formal de esta estructura y algunos de los roles de la teoría de grupos en química ver [5].

Entonces, podemos pensar que un objeto material o una entidad abstracta es simétrico respecto de un grupo de transformaciones si (ciertas) propiedades que lo caracterizan permanecen invariantes después de aplicarle una transformación de ese grupo. Esto es, el objeto o entidad resultante de una operación del grupo de simetrías es otro objeto o entidad indistinguible del original. Dos objetos son simétricos en lo que se refiere a un grupo dado de operaciones si uno es obtenido de otro por alguna(s) de esas transformaciones (y viceversa). Esta relación entre objetos de la misma naturaleza es lo que se conoce como una relación de equivalencia (ésta es, una relación reflexiva, simétrica y transitiva) que permite clasificarlos de acuerdo al criterio de similitud fijado por la relación. Es decir, identifica los objetos que pueden considerarse equivalentes entre sí para los fines de cierto análisis. Clasificar o separar en clases una familia de objetos resulta sumamente útil. En efecto, analizando una familia más pequeña, formada por un representante de cada clase, se puede conocer propiedades de la familia entera [6].

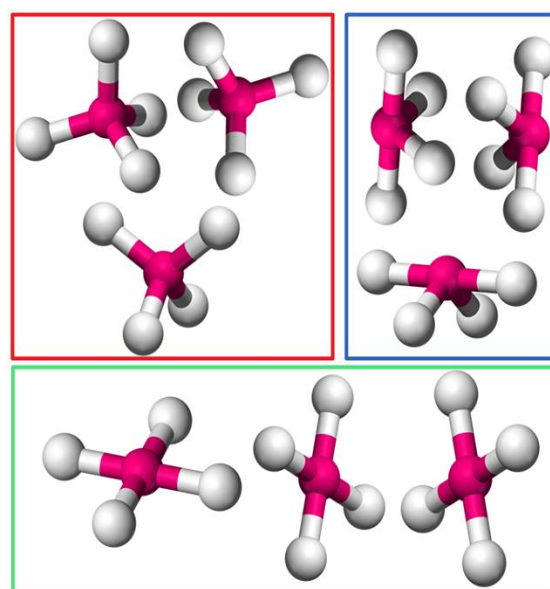


Figura 1: Clases de equivalencia [18].

En la **Figura 1** podemos ver cómo se separan los nueve objetos de un conjunto en tres clases al considerar la relación de equivalencia dada por las rotaciones en el espacio. De esta manera, se puede trabajar con tres elementos en lugar de nueve. Cabe mencionar que versiones más refinadas de estas ideas resultan en las llamadas técnicas de reducción que son fundamentales a la hora de obtener conclusiones a partir de grandes volúmenes de datos en diversas disciplinas.

ALGO DE SIMETRÍAS EN GEOMETRÍA

La matemática está tan impregnada de simetrías que sería muy difícil describir todos los escenarios donde ellas se presentan, pero muchas de las simetrías que aparecen muy naturalmente son de naturaleza geométrica. La geometría es quizás la rama más antigua de la matemática y una de sus especialidades se dedica al plano y al espacio (que son casos particulares de lo que en matemática se denominan *espacios euclídeos*). En particular, aborda el estudio de las propiedades de líneas, planos, ángulos, figuras planas y sólidos tridimensionales y las distancias y relaciones entre ellos. En este análisis aparecen numerosas simetrías y las más comunes son las asociadas a las rotaciones, traslaciones, reflexiones y combinaciones de estos tres tipos de transformaciones.

La llamada *simetría rotacional* se relaciona con algunas o con todas las rotaciones en el plano o en el espacio, mientras que la *simetría traslacional* está definida a partir de las traslaciones en alguna dirección fija. La *simetría de reflexión* está dada por la operación de reflejar un objeto respecto de una recta fija (o un plano en el espacio). Es sencillo convencerse de que estos conjuntos de transformaciones cumplen los axiomas de grupo. Algunas combinaciones de estas familias de simetrías son las *simetrías de reflexión con desplazamiento* (asociadas a una reflexión seguida de una traslación) y las *de rotorreflexión*, que consisten en una rotación sobre un eje combinada con la reflexión en un plano perpendicular a ese eje.

Se puede observar que si uno elige dos puntos arbitrarios del plano o del espacio y les aplica algunas de estas transformaciones, obtiene dos puntos que están a la misma distancia que los anteriores. Este tipo de simetrías son llamadas *isometrías*. También existen simetrías que no tienen esta propiedad y son llamadas no

isométricas. Un ejemplo de este tipo de simetrías es la llamada simetría de escala. Las transformaciones asociadas a estas simetrías son llamadas *homotecias*, donde lo que define a una de éstas es un número llamado la razón de la homotecia. Coloquialmente, decimos que un objeto es el resultado de aplicarle una homotecia a otro si ambos están a escala y ese factor de escala es la razón de la homotecia. Volviendo a la idea de separar una familia de objetos en clases, podemos considerar la familia de todas las circunferencias del plano con las transformaciones dadas por las homotecias y las traslaciones. Se puede ver que, bajo estas transformaciones, todas las circunferencias se relacionan entre sí. Dicho de otra manera, dadas dos circunferencias, siempre podemos tomar una de ellas y obtener la otra aplicando una traslación (para que pasen a tener el mismo centro) y una homotecia (para que pasen a tener el mismo radio). Es decir que desde este punto de vista, todas las circunferencias son iguales. En el fondo de esto se encuentra que todas las circunferencias tienen una relación interna escondida, la razón entre su longitud y su radio, que es el famoso número *Pi*. Si en cambio consideramos el conjunto de todos los triángulos y la familia de transformaciones dada por todas las homotecias, traslaciones, rotaciones y reflexiones, dos triángulos van a estar en la misma clase si son lo que se llama semejantes. Entre otras cosas, los triángulos semejantes deben tener los mismos tres ángulos internos.

La *simetría de escala* está relacionada con algo que no deja de maravillar a quien los observa y son los fractales. Un *fractal* es un objeto geométrico cuya estructura básica, fragmentada o aparentemente irregular, se repite en diferentes escalas; esencialmente, observando un fractal, en cualquier escala, se ve lo mismo. Es notable la presencia de la fractalidad en la naturaleza ya que, entre otras cosas, muchas plantas, las nubes, las montañas, el sistema circulatorio del hombre, los copos de nieve y las líneas de una costa son fractales naturales. En Matemática, la definición de fractal fue desarrollada en los años 1970 dando unidad a una serie de ejemplos, algunos de los cuales se remontaban a un siglo antes. A fines del siglo XIX, aparecieron la llamada función de Weierstrass (como ejemplo de función continua pero no diferenciable en ningún punto) y los conjuntos de Cantor, cuyas representaciones gráficas hoy consideraríamos fractales. En la década del año 1920, los matemáticos franceses Pierre Fatou y Gastón Julia presentan los

conocidos conjuntos de Julia, que son otro ejemplo de fractales. En 1982, Mandelbrot que es considerado el padre de la geometría fractal, dio una definición de fractal y dijo que un objeto es autosimilar o autosemejante si sus partes tienen la misma forma o estructura que el todo, aunque pueden presentarse a diferente escala y pueden estar ligeramente deformadas. En la **Figura 2** se puede observar los primeros pasos de la construcción de un fractal llamado la Alfombra de Sierpinski, que es una versión bidimensional del famoso conjunto (ternario) de Cantor. La autosimilaridad de la figura es evidente cuando uno se concentra en uno de los nueve cuadrantes en los cuales se subdivide un cuadrado en un paso para pasar al siguiente.

LAS SIMETRÍAS EN LA FÍSICA

Una simetría física representa los rasgos característicos de un sistema físico que, bajo ciertas transformaciones, se mantienen invariantes para un observador particular. Es decir, es una propiedad que no se modifica cuando se producen algunos cambios en el sistema. Desde épocas remotas se han usado argumentos de simetría en el estudio de las leyes de la física y la naturaleza toda, en algunos casos de manera implícita. En la Antigua Grecia, por ejemplo, Aristóteles relata en su obra "*Sobre el cielo*", como Anaximandro justifica la inmovilidad de la Tierra debida a su posición central en un cosmos esférico (teoría geocéntrica) ya que "no se puede favorecer ninguna dirección para su movimiento". De esta manera, hace referencia a lo que en términos actuales llamamos *isotropía*, que es la característica de algunos fenómenos cuyas propiedades no dependen de la dirección en que son observadas (es decir, presentan una simetría axial).

Durante la Edad Media, los estudiosos consideraban la noción de simetría vinculada a Dios. Tal como los antiguos, ellos percibían el mundo como una creación armoniosa, ordenada y proporcionada por disposición divina y, como en todos los tiempos, buscaban describir el espacio y encontrar las leyes de la naturaleza. Algunos científicos como el italiano Telesio (1509-1588) y el francés Gassendi (1592-1655) utilizan argumentos de simetría para describir las características del espacio. Una vez más, ciertos argumentos de simetría son fundamentales en la descripción del mundo. Así, el astrónomo y matemático Nicolás Copérnico (1473-1543) coloca el Sol como centro de

un universo isótropo considerando las órbitas de los planetas como trayectorias circulares aunque los datos obtenidos por el astrónomo sueco Tycho Brahe (1546-1601) no coincidían con las trayectorias concéntricas de Copérnico. Luego fueron las tres leyes de Kepler, matemático y astrónomo alemán (1571-1630), las que describieron el movimiento de los planetas poniendo en evidencia notables simetrías y proporciones.

Con el correr de los siglos fueron cambiando los modelos para comprender mejor la naturaleza y sus fenómenos, pero en muchas de las teorías que se formularon estuvo presente la noción de simetría. En la actualidad, se reconoce que todo cambia pero al mismo tiempo muchas teorías físicas se basan, entre otras cosas, en al menos un principio de conservación. Lo que no cambia se suele llamar *invariante de una teoría* y puede ser un objeto, una propiedad o una relación del sistema. Dicho de otra manera, uno de los objetivos de la física es determinar qué transformaciones puede sufrir un sistema (qué simetrías presenta) y cuáles son los objetos, propiedades y relaciones de ella que permanecen invariantes después de aplicar una de estas transformaciones. Así, dada una teoría física, se estudian sus simetrías y sus principios o leyes de conservación.

La estrecha relación entre simetrías y leyes de conservación ha sido estudiada minuciosamente desde principios del siglo pasado pero es sin duda el celebrado teorema de Noether el que arroja luz sobre este vínculo. La matemática alemana Emmy Noether (1882-1935) demostró un importante resultado para la matemática que luce su simplicidad y toda su potencia en la física. A partir de él, se establece que a cada simetría (diferenciable) de un sistema físico le corresponde cierta ley de conservación y que muchas leyes de conservación reflejan la existencia de una simetría. Algunos estudiosos dicen que la validez simultánea de las simetrías y las leyes de conservación permite afirmar que en la naturaleza lo que cambia, cambia porque algo se conserva y lo que se conserva, se conserva en virtud de lo que cambia. Es decir, lo que cambia y lo que es invariante esencialmente son lo mismo.

Este elegante teorema, que según Richard Feynman (1918-1988) es uno de los más bellos y profundos de toda la historia, se ha convertido en una herramienta sumamente valiosa de la física contemporánea. Entre otras cosas, se puede aplicar en numerosos problemas clásicos de la física [7], [8].

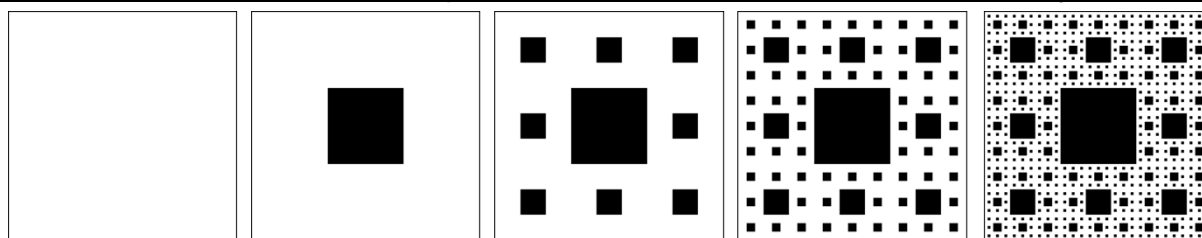


Figura 2: primeros pasos de la construcción de la Alfombra de Sierpinski [18].

En el estudio de los fenómenos electromagnéticos, cuando se analizan las ecuaciones de Maxwell (es decir, las leyes básicas de la termodinámica) se descubre que ellas poseen una simetría interna muy particular que los físicos suelen llamar *invariancia de calibración o de norma*. Gracias al teorema de Noether se puede ver que es esta simetría la que da lugar a la ley de conservación de la carga eléctrica. Por otro lado, este teorema que resulta de fundamental importancia en la física teórica y también tiene aplicaciones a problemas concretos,

luce su poderío en la mecánica clásica [9]. Si se analiza la segunda ley de Newton se encuentra que ella posee varias simetrías de relaciones dadas por las transformaciones: desplazamiento arbitrario de una distancia fija, giro de un ángulo dado y desplazamiento arbitrario del tiempo. Estas invarianzas se corresponden con las propiedades básicas del espacio: homogeneidad, isotropía y uniformidad. El teorema de Noether establece estas correspondencias:

Tabla 1: Casos particulares del Teorema de Noether.

PROPIEDADES	SIMETRÍA	CANTIDAD CONSERVADA
Homogeneidad del espacio	Traslacional en el espacio	Momento lineal
Isotropía del espacio	Rotacional	Momento angular
Uniformidad del tiempo	Traslacional en el tiempo	Energía

Cabe destacar que estas simetrías en el espacio y el tiempo surgen naturalmente ante la importante pregunta de si el resultado de un experimento cambia, o no, cuando se lo realiza en distintas regiones del espacio y distintos momentos.

También es interesante analizar cuándo una ley física presenta simetrías. Consideremos el caso de una simetría de reflexión. Algunas leyes de la física se formulan haciendo uso de la conocida regla de la mano derecha (que claramente cambiaría si reflejamos el espacio intercambiando la izquierda con la derecha) pero no por eso dejan de ser invariantes frente a una reflexión. Esto ocurre porque la invarianza es una característica intrínseca de una ley mientras que la regla de la mano derecha es parte de una formulación matemática de ella. Por ejemplo, se sabe que la fuerza sobre una carga que se mueve en un campo magnético puede formularse como $F=qv \times B$ (donde F es la fuerza, q es la carga con velocidad v y B es el campo magnético). Es notable que si se intercambia lo que se convino como izquierda y derecha se obtiene la misma ley ya que se puede ver que los cambios de

signos en las magnitudes vectoriales se compensan. También señala Feynman que las leyes de gravitación, electricidad y las fuerzas nucleares son simétricas respecto de una reflexión (ver volumen 1, capítulo 52, [10]).

Pero no todo es simetría en la física ya que algunas de sus leyes no son invariantes frente a un cambio de escala. Esto fue descubierto por Galileo (1564 -1642) mientras estudiaba la resistencia de los materiales en relación a sus tamaños. También se puede entender que a nivel macroscópico, ciertos fenómenos físicos no son invariantes por reversiones del tiempo. Con todo esto Feynman plantea que la naturaleza es casi simétrica pero no totalmente simétrica.

También en sus conocidas notas de clase que se convirtieron en tres volúmenes que iluminaron el estudio de una enorme cantidad de estudiantes, Feynman analiza la utilidad de romper ciertas simetrías para lograr una buena descripción de algunos fenómenos. Por ejemplo, supongamos que

se tiene una esfera perfecta en cuya superficie uniformemente blanca se pintan dos puntos de color rojo. Se observa que para describir la posición relativa entre ellos es útil romper la simetría de la esfera fijando, por ejemplo, la noción de norte-sur mediante la elección (arbitraria) de un diámetro orientado. Así, también se valora la ruptura de una simetría.

Por otro lado, es innegable lo útil que puede resultar conocer las simetrías de un sistema físico a la hora de estudiarlo. Por ejemplo, consideremos que se quiere calcular la intensidad del campo gravitatorio que produce cierto planeta. Si se supone que este planeta es perfectamente esférico, es claro que se tiene una magnitud que depende de tres parámetros, la distancia entre el punto y el centro de la esfera y los ángulos respecto a dos ejes. Sin embargo, antes de comenzar con los cálculos que se deben hacer, se puede observar que el sistema tiene una simetría rotacional y al rotar la esfera, el campo gravitatorio debería rotar con ella. Así, resulta evidente que este campo sólo depende de la distancia entre el punto donde se aplica y el centro de la esfera. Es decir, usando esta simetría no es necesario considerar los ángulos.

También es útil considerar simetrías de un sistema a la hora de resolver sus ecuaciones de movimiento. Por ejemplo, si uno busca determinar la dinámica de un sistema sabiendo que sobre sus trayectorias se conserva el momento (lineal o angular) no vale la pena buscar la solución de las ecuaciones de movimiento en todo el espacio de configuraciones. Dado un valor inicial para el momento, se sabe que la trayectoria va a yacer en un subconjunto de las configuraciones posibles (el conjunto de nivel de la aplicación momento para ese nivel inicial) y entonces se puede abordar el problema de buscar la solución en ese conjunto “más chico” (de dimensión menor). Estos procesos suelen llamarse *procesos de reducción* y se remontan a los trabajos de Jacobi (1804-1851), Hamilton (1804-1865) y Routh (1831-1907), entre otros. Desde hace unos años la fuerza de la geometría diferencial ha colaborado para encontrar métodos de reducción más generales que incluyen tanto sistemas forzados y con vínculos como sistemas de orden superior. También se han estudiado métodos llamados *de reconstrucción* que permiten obtener la solución buscada a partir de la solución (reducida) obtenida después de hacer la reducción [11 - 14].

LAS SIMETRÍAS EN LAS CIENCIAS QUÍMICAS

Como ya se sabe, la *ley de la conservación de la energía*, también conocida como la primera ley de la termodinámica, establece que la energía total de un sistema aislado se conserva (la energía no puede ser creada ni destruida, sólo transformada de una forma a otra). Este es un resultado central para comprender los procesos energéticos y es una consecuencia directa del Teorema de Noether (ver **Tabla 1**).

Por otro lado, la *ley de conservación de la materia* establece que la masa total de un sistema cerrado se mantiene constante antes, durante y después de una reacción química. Este principio fue formulado por el químico y biólogo francés Antoine Lavoisier (1743-1794) a finales del siglo XVIII y se convirtió en un punto fundamental en el desarrollo de la química teórica. Esta ley es sumamente importante en el análisis estequiométrico ya que permite predecir las cantidades de reactantes y productos en una reacción química. Además, ayuda a comprender cómo los átomos se combinan, separan y cómo se reorganizan para formar nuevos compuestos y materiales.

Estas dos leyes de conservación son dos principios esenciales que rigen el comportamiento de la naturaleza a niveles micro y macroscópico. Son fundamentales en física y química y están relacionadas entre sí por la famosa fórmula de Einstein: $E=mc^2$. Esta relación que establece la equivalencia entre masa y energía es, sin duda, una de sus contribuciones más significativas de uno de los padres de la física moderna. Así como detrás de la conservación de la energía subyace un grupo de simetrías, es natural preguntarse si la conservación de la masa puede verse como una consecuencia más del celebrado Teorema de Noether.

En química orgánica podemos mencionar las simetrías especulares (o de reflexión). Algunos compuestos químicos presentan una propiedad llamada *isomería*, que indica que la disposición en el espacio de los átomos que conforman las moléculas puede variar (sin tener en cuenta rotaciones y traslaciones). A cada una de estas distintas disposiciones se las llama isómeros. Es decir, la propiedad de isomería da cuenta de la existencia de al menos dos isómeros. Como caso particular de isomería se puede mencionar a los *enantiómeros*, que son pares de compuestos que son imágenes especulares no superponibles el uno

del otro. Dicho de otra manera, si uno refleja una molécula de uno de los enantiómeros, va a obtener una molécula diferente, que es del otro enantiómero. Si bien en este caso estamos hablando de una simetría, los distintos enantiómeros (y en general los distintos isómeros o también llamados *estereoisómeros*) pueden

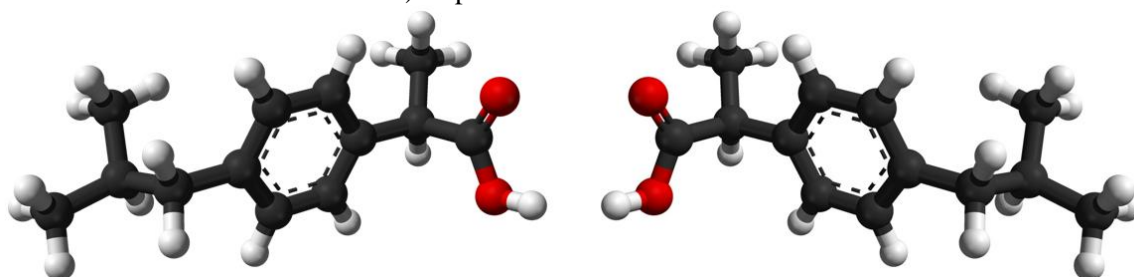


Figura 3: Isómeros *R* y *S* del Ibuprofeno a izquierda y derecha respectivamente [18].

Otra disciplina donde las simetrías juegan un rol destacado es la cristalografía. Siguiendo las nociones básicas expuestas en [15], consideramos que un cristal es un sólido homogéneo que posee un orden interno tridimensional que, bajo ciertas condiciones favorables, puede expresarse externamente por la formación de superficies planas y pulidas. La cristalografía es el estudio de estos sólidos y las leyes que gobiernan su crecimiento, su forma externa y estructura interna. Si bien ella se desarrolló como una rama de la mineralogía (estudia las propiedades físicas y químicas de los minerales que se encuentran en el planeta en sus diferentes estados) adquirió identidad propia y se convirtió en una herramienta poderosa en química, física y metalurgia ya que se ha usado para resolver problemas relativos a fármacos, semiconductores y aleaciones, entre otros.

Hoy se sabe que la característica fundamental que define a los cristales es que las partículas que los forman están ubicadas de manera ordenada en el espacio y resulta interesante estudiar la geometría de la distribución de estas unidades llamadas *celdas* pero la fascinación por el hermoso aspecto exterior de los cristales es antiquísima. Estas celdas son unidades elementales con forma de paralelepípedo (cuerpos con seis caras paralelas dos a dos) llamadas celdas fundamentales y su tamaño es increíblemente pequeño, las diez millonésimas avas partes de un milímetro. También es cierto que en la naturaleza no todo es orden; existen minerales cuyas partículas se encuentran en desorden debido, en general, a que sufrieron un proceso de formación muy rápido que no permitió

presentar propiedades muy distintas. Por ejemplo, la molécula de ibuprofeno presenta isomería y los enantiómeros *S* y *R* tienen dos efectos farmacológicos distintos: uno tiene efecto antiinflamatorio y el otro no (ver **Figura 3**).

que siguieran alguna regla para su distribución. El vidrio, por ejemplo, es un sólido amorfo inorgánico que tanto se encuentra en la naturaleza como puede ser producido por el hombre. La falta de orden en su estructura impide que la luz se transmita de manera regular y ésto lo hace transparente. Por otro lado, la disposición desordenada de sus átomos lo hace más resistente a la corrosión que otros materiales cristalinos.

Ahora, si se quiere hacer un breve recorrido por la historia de la cristalografía (ver [16]) se debe notar que, aunque las primeras referencias históricas sobre el uso de los cristales parece que se remontan a los antiguos sumerios (cuarto milenio a.C.), recién en los siglos XVII y XVIII aparecen las primeras hipótesis científicas sobre la naturaleza interna de los cristales, y todo ello basándose exclusivamente en la observación de su morfología. El matemático, astrónomo y astrólogo Johannes Kepler no pudo menos que maravillarse cuando notó que un copo de nieve que aterrizó sobre su chaqueta mostraba una perfecta simetría de seis puntas. En 1611 Kepler escribió su tratado "*El Copo de Nieve de Seis Esquinas*", la primera descripción matemática de los cristales. En este ensayo Kepler se preguntaba: ¿Por qué los copos de nieve individuales, antes de que se enreden con otros copos, siempre aparecen con seis esquinas? ¿Por qué no caen copos con cinco o siete esquinas? A pesar de su modesta extensión, el ensayo de Kepler es extraordinariamente rico en ideas. También basándose en la mera observación de las formas, entre el investigador danés Niels Stensen (1638-1686) y el mineralogista Jean-Baptiste Louis Romé de l'Isle (1736-1790) que es considerado

uno de los padres de la cristalografía moderna avanzaron en la comprensión de los cristales. En particular, establecieron la denominada *ley de la constancia de ángulos* (interfaciales) entre caras en los diferentes ejemplares de una misma especie mineral que da cuenta de una cantidad conservada (que quizás sea producto de alguna simetría de escala). Es decir, esta ley establece que los ángulos diedros formados por pares de caras equivalentes son constantes en cristales de la misma clase, independientemente de su desarrollo. O sea que durante el crecimiento cristalino, lo que sucede es un desplazamiento paralelo de las caras, de manera simétrica, conservando la forma primitiva y variando sólo el tamaño.

Con todo ésto, el mineralogista francés René Just Haüy (1743-1822) llegó a la conclusión de que los cristales estaban constituidos por el apilamiento ordenado de pequeños ladrillos o celdillas elementales, todas idénticas. Años más tarde, en el siglo XIX, se usó la idea de simetría como la de repetición de motivos alrededor de un punto, alrededor de un eje o de repeticiones por traslación para describir este tipo de estructura. En 1830, el médico alemán Johann Friedrich Christian Hessel (1796-1872) se basó en las deducciones de René Just Haüy y demostró que las diferentes posibles morfologías de los cristales se pueden combinar para dar exactamente 32 combinaciones diferentes de elementos de simetría (los llamados 32 grupos puntuales o clases cristalinas) ya que demostró que sólo pueden existir ejes de rotación de orden 2, 3, 4 y 6. Esto es, que 2, 3, 4 y 6 son las veces que se puede obtener, durante un giro completo (de 360°) alrededor de dicho eje, un objeto geométrico idéntico al original. En 1848 el físico francés Auguste Bravais (1811-1863) descubrió que, en el espacio de tres dimensiones, las repeticiones periódicas por traslación sólo pueden realizarse de 14 modos diferentes (las denominadas 14 redes de Bravais), ya que estas traslaciones tienen que ser compatibles con las 32 clases cristalinas.

Unos 50 años más tarde, las 14 redes de Bravais y las 32 clases cristalinas fueron las limitaciones entre las que se debatieron las ideas del matemático, mineralogista y cristalógrafo ruso Evgraf Fedorov (1853-1919) y, de forma independiente, del matemático alemán Arthur Schoenflies (1853-1928), para deducir entre 1890 y 1891 los llamados *grupos espaciales*, que son los 230 modos posibles a los que se restringen las distribuciones repetitivas de las unidades de construcción de los cristales (átomos, iones y moléculas). Pero fue sin duda el descubrimiento de

los rayos X realizado por Wilhelm Conrad Roentgen (1845-1923) a finales del siglo XIX lo que revolucionó el antiguo campo de la Cristalografía, que hasta ese momento sólo había podido estudiar la morfología de los minerales (ver detalles en [16]).

Es notable cómo los distintos modos de empaquetamiento de los átomos o moléculas en un cristal dan lugar a las llamadas *fases polimórficas*, que confieren a los cristales (y en definitiva, a los materiales) distintas propiedades. Por ejemplo, son bien conocidas las distintas apariencias y propiedades del elemento químico Carbono, que se presenta en la naturaleza en dos formas cristalinas muy diferentes, el diamante y el grafito, cuyas estructuras sub-microscópicas (a nivel atómico) dan cuenta de sus diferencias. También se conoce el grafeno, material muy resistente, que es un alótropo del carbono que posee un teselado hexagonal plano, parecido al grafito, formado por átomos de carbono y enlaces covalentes debidos a la superposición de los híbridos sp^2 de los carbonos enlazados. En realidad, la estructura del grafito corresponde a una gran cantidad de láminas de grafeno superpuestas.

En el diamante, cada átomo de carbono está unido a otros cuatro en forma de una red tridimensional muy compacta (cristales covalentes), de ahí su extrema dureza y su carácter aislante. Sin embargo, en el grafito los átomos de carbono están distribuidos en forma de capas paralelas separadas entre sí mucho más de lo que se separan entre sí los átomos de una misma capa. Debido a esta unión tan débil (fuerzas de Van der Waals e interacciones de los orbitales π de los átomos de carbono) entre las capas atómicas del grafito, los deslizamientos de unas frente a otras ocurre sin gran esfuerzo, y de ahí su capacidad lubricante, su uso en lápices y su utilidad como conductor.

Muchas cosas se pueden discutir en ciencia, pero seguramente todos coincidimos en la belleza silenciosa de los cristales que se manifiesta en su exterior pero tiene su origen en el interior y está estrechamente vinculada a la simetría que presentan.

FINALMENTE...

Las simetrías, vistas como transformaciones, pueden entenderse de manera abstracta pero

muchas de las que tienen importancia en ciencia y de las que uno se percata en la vida cotidiana son de naturaleza geométrica. Es por eso que la noción de simetría está inevitablemente asociada a la geometría.

Jaime Buhigas Tallón dice en *La divina geometría*: “Qué tienen en común músicos, matemáticos, arquitectos, pintores, diseñadores, ingenieros, biólogos, filólogos, geólogos, sacerdotes y místicos? Que todos, lo sepan o no, son geómetras.

En un mundo como el actual, en el que el saber está dividido y especializado en exceso, la capacidad integradora de la geometría es el mejor camino para llegar a un conocimiento universal, único y verdadero. No en vano, la realidad es geométrica y desentrañar su misterio nos permitirá comprender el orden que rige en el universo” [17].

REFERENCIAS

- [1] F. Lafarga, *Breve diccionario etimológico de términos geométricos*, Jornadas de Educación Matemática de la comunidad valenciana, 2010.
- [2] Aristóteles, *Metafísica*, Libro XIII.
- [3] R.C. Castillo Ochoa, *Significado y uso de la noción de simetría en física: una reconstrucción desde el mundo griego hasta la edad moderna*, Editorial Académica Española, 2018.
- [4] M.À. Cuevas-Diarte, L. Bayés-García, T. Calvet-Pallas, *Simetrías del cristal y mucho más*, 2022, Tierra y tecnología nº 60.
- [5] D.M. Bishop, *Group Theory and Chemistry*, Dover Publications, Inc. New York, 1973.
- [6] L. Oubiña, *Introducción a la Teoría de Conjuntos*, Eudeba Manuales, 1965.
- [7] L. de la Peña Auerbach, *Simetría y leyes en la conservación de la física*, 1965, Revista de la Universidad de México.
- [8] J. Roche, *A critical study of symmetry in physics from Galileo to Newton*, 1987, Symmetries in physics (1600-1980).
- [9] H. Vucetich, *Introducción a la Mecánica Analítica*, Eudeba, ISBN 9789502315881, 2010.
- [10] R. Feynman, R.B. Leighton, M.L. Sands, *Física*, Volúmenes 1, 2 y 3, Addison-Wesley Iberoamericana, 1971-1972.
- [11] V.I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, 2a Edición, Springer, 1989.
- [12] J.E. Marsden, T. Ratiu, *Introduction to Mechanics and Symmetry*, 2a Edición, Texts in Applied Mathematics vol. 17, Springer-Verlag, 1999.
- [13] H. Cendra, J.E. Marsden, T.S. Ratiu, Lagrangian reduction by stages. *Mem. Amer. Math. Soc.* 2001, 152 (722), 1-108.
- [14] H. Cendra, J.E. Marsden, T.S. Ratiu, *Geometric mechanics, Lagrangian reduction and nonholonomic systems*, Mathematics Unlimited-2001 and Beyond, (B. Enguist and W. Schmid, eds.), Springer-Verlag, New York, 2001; 221-273.
- [15] Dana-Hurlbut, *Manual de Mineralogía, Tratado moderno para la enseñanza en universidades y escuelas especiales y para guía de ingenieros en minas y geólogos*, 2a. Edición, Editorial Reverte, 1956.
- [16] CSIC, Depto. de Cristalografía y Biología Estructural, España.
<https://www.xtal.iqf.csic.es/Cristalografia/index.html>
- [17] J. Buhigas Tallon, *La divina geometría*, Editorial La esfera de los libros, ISBN 9788497347440, 2008.
- [18] Los gráficos fueron obtenidos de distintos artículos de Wikipedia.

La Calidad desde el punto de vista del laboratorio de análisis clínicos

Liliana E D'Agostino, Jorge J Bruno, Fernando D Ventimiglia

Laboratorio D'Agostino-Bruno. Calle 14 N°280, La Plata, Buenos Aires, Argentina.

www.dagostino-bruno.com.ar

E-mail: Liliana D'AGOSTINO <liliana@dagostino-bruno.com.ar> ,

Resumen:

La práctica de análisis clínicos es fundamental para garantizar una atención médica segura y efectiva. Los laboratorios deben asegurar que las pruebas seleccionadas proporcionen información clínica relevante y de utilidad en el diagnóstico médico. La calidad analítica, es esencial para garantizar la confiabilidad de los resultados, que deben ser entregados oportunamente al paciente.

El 70% de las decisiones médicas en la actualidad están basadas en resultados de pruebas de laboratorio. Este artículo explora la importancia de la implementación de los programas de gestión de la calidad y el uso de herramientas de seguimiento para garantizar la seguridad y satisfacción del paciente.

La ISO 9001:2015, que es específica para laboratorios de análisis clínicos, define a la calidad como el grado en que un conjunto de características cumple con los requisitos, enfocándose en la satisfacción del cliente a través de la mejora continua. En los laboratorios clínicos, la calidad impacta directamente en la seguridad del paciente, desde la recolección de muestras hasta la comunicación de resultados.

La implementación de normas de calidad y la acreditación de laboratorios con normas específicas, como la ISO 15189 y los programas nacionales como el PAL y OAA, son esenciales para garantizar la fiabilidad de los resultados y la mejora continua.

Los laboratorios deben cumplir con estándares como tener personal capacitado, equipos de calidad, control de calidad interno y externo, procedimientos estandarizados, gestión de residuos, confidencialidad de información y un sistema de mejora continua basado en el

ciclo PDCA. Metodologías como Six Sigma y Lean también son aplicables para la optimización de procesos y la reducción de errores.

La implementación de un sistema de gestión de calidad requiere de la planificación, el establecimiento de políticas documentadas, organización de los recursos humanos en base a responsabilidades y la capacitación continua del personal. Las auditorías internas y externas, así como el uso de herramientas como el ciclo PDCA, son cruciales para identificar procesos susceptibles a la mejora.

Finalmente, los avances tecnológicos y el advenimiento de la inteligencia artificial, mejora la precisión, rapidez y seguridad de los resultados, contribuyendo a la excelencia en los servicios de laboratorio clínico.

Abstract:

The practice of clinical analysis is essential for safe and effective medical care. Laboratories must ensure that the tests selected provide relevant clinical information that is useful for medical diagnosis. Analytical quality is essential to achieve the reliability of results, which must be delivered in a timely manner to the patient.

Currently, 70% of medical decisions are based on laboratory test results. This article explores the importance of implementing quality management programs and using monitoring tools to warrant patient safety and satisfaction.

The ISO 9001:2015 standard, specific to clinical analysis laboratories, defines quality as the degree to which a set of characteristics meets requirements, focusing on customer satisfaction through continuous improvement. In clinical laboratories, quality directly

impacts patient safety, from sample collection to communication of results.

The implementation of quality standards and the accreditation of laboratories with specific standards, such as ISO 15189 and national programs such as PAL and OAA, are essential to ensure the reliability of results and continuous improvement.

Laboratories must comply with standards such as having trained personnel, quality equipment, internal and external quality control, standardized procedures, waste management, confidentiality of information, and a continuous improvement system based on the PDCA cycle. Methodologies such as Six Sigma and Lean are also applicable for process optimization and error reduction.

The implementation of a quality management system requires planning, the establishment of documented policies, the organization of human resources based on responsibilities and continuous staff training. Internal and external audits, as well as the use of tools such as the PDCA cycle, are crucial to identify processes susceptible to improvement.

Finally, technological advances and the arrival of artificial intelligence improve the accuracy, speed and safety of results, contributing to excellence in clinical laboratory services.

Introducción:

Quiénes están involucrados en la práctica de los análisis clínicos en el laboratorio, están convencidos de su valor para que la atención del paciente sea segura y efectiva. Las pruebas que se seleccionan para tal fin, deben ser adecuadas para la obtención de información clínica relevante, así como también, los comentarios interpretativos que se incluyen en el informe de resultados deben cumplir con la finalidad de facilitar y orientar el diagnóstico médico. Las determinaciones bioquímicas que se efectúan deben contar con un estricto aseguramiento de la calidad analítica, siguiendo los lineamientos de las instituciones científicas que establecen límites o requisitos de calidad para asegurar la confiabilidad de los resultados en relación a la exactitud, veracidad e imprecisión de los mismos. Otro requisito indispensable que se debe cumplir es

que el laboratorio debe asegurar que el resultado llegue oportunamente al paciente.

Muchos artículos que buscan promover el valor de la medicina de laboratorio hacen uso de lo que se conoce como la "afirmación del 70%". Esta se presenta de varias formas, más comúnmente como "Los datos de la medicina de laboratorio influyen en más del 70% de las decisiones clínicas", o con variaciones menores alrededor de esta cifra (60-80%). Esto debe interpretarse como que el setenta por ciento de todas las decisiones médicas importantes que afectan la vida de un paciente involucran una prueba de laboratorio clínico o de patología.

El objetivo de este artículo es explorar la importancia de los programas de garantía de calidad y su aplicación en laboratorios de análisis clínicos. Se discutirá la definición de calidad según la ISO y su relevancia para la elaboración de información bioquímica útil para la práctica clínica. Además, se abordará la implementación de una planificación adecuada, el desarrollo de herramientas de seguimiento apropiadas y la aplicación de las mismas para obtener información utilizable con el fin de lograr la seguridad y satisfacción del paciente.

Definiciones:

Concepto de calidad en el contexto de los laboratorios clínicos. Impacto de la calidad en los resultados de los pacientes lo que se expresa como: seguridad del paciente.

La definición de calidad según la norma ISO 9001:2015 se refiere al grado en que un conjunto de características inherentes de un objeto cumple con los requisitos. Estos requisitos pueden ser necesidades o expectativas establecidas, generalmente implícitas u obligatorias. En el contexto de la ISO 9001:2015, la calidad se enfoca en la satisfacción del cliente mediante la mejora continua de los procesos y el cumplimiento constante de los requisitos. Los clientes más importantes en el caso de los laboratorios clínicos, son los pacientes, pero también lo

son los profesionales médicos, los bioquímicos que tercerizan estudios en un laboratorio de referencia.

Los laboratorios de análisis clínicos, brindan servicios a la comunidad de pacientes a la que pertenecen, elaborando información clínicamente relevante para la prevención, el diagnóstico, pronóstico de una enfermedad determinada y seguimiento de un tratamiento. Un aspecto deseable y por el cual se está trabajando intensamente en la actualidad es la medicina de precisión para colaborar con la prevención de enfermedades. Por esta razón la calidad de los resultados deben ser expresados con alto grado de cumplimiento con los requisitos de error admisible para los métodos analíticos de medida que se utilizan en el laboratorio clínico.

Por lo expresado anteriormente, se define la seguridad del paciente en el laboratorio clínico como la implementación de prácticas, procedimientos y políticas que garantizan la correcta gestión de muestras, el uso adecuado de equipos, la precisión en los resultados de las pruebas y la protección contra errores y riesgos que puedan causar daño al paciente. Esto incluye desde la recolección de muestras hasta la comunicación de resultados, asegurando que todas las etapas del proceso analítico se realicen de manera segura, eficiente y precisa para minimizar el riesgo de errores diagnósticos y terapéuticos que puedan afectar negativamente la salud del paciente.

El Dr. René Favalaro en referencia a la calidad de atención en salud dijo que: *“los profesionales y en especial, quiénes trabajamos en el área de la salud tenemos la obligación de mejorar la calidad de vida de la gente.”*

Estándares y Normativas de Calidad:

En relación a esta importante misión que tienen los laboratorios clínicos, las normas de calidad constituyen herramientas esenciales para la mejora continua y para garantizar una de las características esenciales de todo

laboratorio: la fiabilidad de los resultados de las pruebas médicas. La acreditación es uno de los principales aspectos que contribuye al cumplimiento del principal objetivo del laboratorio clínico que es cuidar de la salud del paciente y del medio ambiente.

Acreditación:

Obtener acreditaciones de organismos reconocidos internacionalmente, como la Norma ISO 15189, demuestra que el laboratorio cumple con altos estándares de calidad y competencia técnica. En el ámbito nacional se cuenta con el Programa de Acreditación de Laboratorios (PAL) de la Fundación Bioquímica Argentina y el Organismo Argentino de Acreditación (OAA).

Algunos estándares comunes que los laboratorios clínicos deben incluir y que son criterios de acreditación:

1. **Personal capacitado:** Contar con un personal bien entrenado, con las calificaciones y competencias técnicas adecuadas para realizar las pruebas de forma precisa y segura.
2. **Calidad de los equipos:** Utilizar equipos calibrados y mantenidos regularmente para garantizar la precisión y fiabilidad de los resultados de las pruebas. También resulta importante en este punto la actualización profesional y los esfuerzos que se realizan en función de la innovación tecnológica.
3. **Control de calidad interno y externo:** Realizar pruebas de control de calidad internas y participar en programas externos de evaluación de la calidad para monitorear la precisión y exactitud de las pruebas. El Control de Calidad Interno, permite monitorear la fiabilidad del método analítico diariamente y estimar su error aleatorio. Los programas de Evaluación Externa de la Calidad permiten la realización de comparaciones entre laboratorios y por lo tanto, detectar errores sistemáticos. Programas

Nacionales son por ejemplo: el Programa de Evaluación Externa de Calidad (PEEC) de la Fundación Bioquímica Argentina, el Programa del CEMIC, Programa Nacional de Calidad (ANLIS Malbrán); estos programas cubren varias áreas del laboratorio clínico y existen otros programas que permiten realizar comparaciones intralaboratorias de diferentes proveedores internacionales.

4. Manuales y procedimientos estandarizados: Está recomendado desde la normativa de calidad la implementación de manuales con protocolos y procedimientos estandarizados para cada tipo de prueba, desde la recolección de muestras hasta la interpretación de resultados.

5. Gestionar adecuadamente los residuos y la bioseguridad: El cumplimiento de normas y legislación relacionada a los laboratorios, incluyen las normas de seguridad e higiene y manejo de desechos biológicos para proteger al personal, pacientes y el medio ambiente.

6. Confidencialidad de la información del paciente: Garantizar la privacidad y confidencialidad de la información del paciente de acuerdo con las leyes y regulaciones de protección de datos.

7. Seguimiento y mejora continua: Se basa en la aplicación del ciclo de mejora continua PDCA. Realizar encuestas de satisfacción, auditorías internas y externas, utilizar indicadores para el análisis y revisión regular de los procesos y resultados, y tomar medidas correctivas para mejorar continuamente la calidad del laboratorio.

Cumplir con estas normas y estándares es fundamental para asegurar la calidad y la confiabilidad de los servicios de un laboratorio clínico y garantizar la seguridad, satisfacción y el bienestar de los pacientes.

Además de los organismos mencionados, existen otras guías o normativas

internacionales como las elaboradas por CLIA (*Clinical Laboratory Improvement Amendments*) y CAP (*College of American Pathologists*), que pueden adoptarse en nuestro medio.

CLIA y *CAP* son dos entidades importantes en el ámbito de la regulación y acreditación de laboratorios clínicos en los Estados Unidos. *CLIA* es un programa federal de regulaciones desarrollado por los Centros de Servicios de Medicare y Medicaid (CMS) que establece estándares para la calidad y la competencia de los laboratorios clínicos. El objetivo principal de *CLIA* es garantizar que los laboratorios clínicos produzcan resultados de pruebas precisos y confiables para la atención médica de los pacientes. Regula aspectos como la calibración y control de equipos, la competencia del personal, la gestión de calidad y la documentación de procedimientos.

CAP es una organización médica sin fines de lucro compuesta por patólogos, que se dedica a la acreditación y a la mejora de la calidad de los laboratorios clínicos y de patología. La acreditación del *CAP* es reconocida internacionalmente y demuestra el compromiso de un laboratorio con la calidad y la excelencia en los servicios de laboratorio.

Implementación de Sistemas de Gestión de Calidad:

La planificación y organización de un sistema de calidad en un laboratorio es crucial para asegurar que todos los procesos y resultados sean consistentes, precisos y fiables.

Para planificar es necesario definir los Objetivos del Sistema de Calidad.

- **Objetivo principal:** Asegurar la precisión, veracidad y confiabilidad de los resultados de laboratorio.
- **Sub-objetivos:** Cumplir con las normativas y estándares internacionales, mejorar la

eficiencia operativa, y garantizar la seguridad y satisfacción del personal y los clientes.

Los laboratorios de análisis clínicos de nuestro país pueden adoptar diferentes estándares de Calidad :

- **ISO 17025:** La norma internacional más reconocida para la competencia de los laboratorios de ensayo y calibración.
- **ISO 15189:** Específica para laboratorios clínicos.
- **MA3-PAL:** Es una norma nacional para la acreditación de laboratorios, de la Fundación Bioquímica Argentina.

Establecer una Política de Calidad en la cual figure una declaración de compromiso con la Calidad, lo cual debe estar documentado.

Objetivos de calidad: Establecer metas medibles para la mejora continua.

Designar un Responsable de Calidad: En general la Dirección del laboratorio es la principal responsable, sin su compromiso es imposible llevar adelante un programa de mejora continua.

Coordinador de calidad: Designar a una persona o equipo responsable de implementar y mantener el sistema de calidad. Quién o quiénes se ocuparán de desarrollar la documentación del Sistema de Calidad.

Control de Calidad y Mejora Continua:

El control de la calidad analítica, constituye el registro del proceso analítico y permite el monitoreo del desempeño del mismo. Está formado por el Control de Calidad Interno (CCI) y la Evaluación Externa de la Calidad

(EEC). Se fundamentan ambos en el procesamiento de muestras elaboradas para tal fin y el tratamiento estadístico de los resultados obtenidos para la detección y cuantificación de la magnitud de los errores analíticos.

En los métodos analíticos cuantitativos, es decir, aquellos en los cuales su resultado es numérico, el error total está compuesto por la suma del error sistemático y del aleatorio.

El CCI se realiza en el propio laboratorio y el análisis de sus resultados, permite conocer si el método está en condiciones para el procesamiento de muestras de los pacientes y la estimación del error aleatorio en forma de imprecisión a largo plazo. Para este tipo de control pueden utilizarse muestras comerciales elaboradas por el mismo fabricante del instrumento de medida (primera opinión), elaboradas por otra empresa diferente al fabricante del instrumento (tercera opinión) o elaboradas en el propio laboratorio (controles fabricados en el mismo laboratorio). Existen fabricantes de controles de primera y tercera opinión que permiten la comparación de los resultados de los laboratorios con un grupo par de laboratorios, que poseen el mismo instrumento o marca o la misma metodología, por lo que también permiten estimar el error sistemático (estudios interlaboratoriales).

En la EEC, se pretende simular la frecuencia con la que un paciente concurre al laboratorio (puede ser mensual, trimestral, semestral, anual, etc). Los laboratorios participantes procesan las muestras e informan los resultados a un organismo organizador. Se llama EEC porque es un organismo externo quién elabora los datos estadísticos. Las muestras utilizadas como controles, pueden ser comerciales o elaboradas por el propio programa de evaluación externa. La EEC permite la estimación a largo plazo del error sistemático y se mide en forma de sesgo.

Es por este motivo que mediante el uso del CCI y de la EEC para cada analito medido en el laboratorio, puede estimarse el error total

del método y por lo tanto, trabajar para minimizarlo.

Para cumplir con la mejora continua es necesario establecer programas de capacitación y formación del personal: Para ejecutar los estándares analíticos mencionados es fundamental la formación y capacitación del personal para adquirir las competencias necesarias para el desempeño de su trabajo. Luego de la capacitación se realizan evaluaciones periódicas para asegurar que el personal mantiene sus habilidades y conocimientos. Se debe impulsar el desarrollo de competencias. Los programas pueden ser dictados internamente o por instructores externos siempre que se cumplan los objetivos establecidos por la Dirección del laboratorio.

Otro tema que forma parte de la capacitación del personal es la gestión de instrumentos y materiales. Se trata de la Calibración y Mantenimiento: Programas regulares para asegurar que todos los mismos funcionen correctamente. Así como también el control de inventario o stock, gestión eficiente de reactivos y materiales para evitar interrupciones en el trabajo.

Como parte de la mejora continua, es necesario realizar revisiones periódicas, por eso se instituyen auditorías internas y externas que son observaciones periódicas del sistema de calidad para identificar áreas de mejora, en las mismas se investigan las no conformidades o incidencias, se establecen las acciones correctivas y preventivas (CAPA) para corregir los problemas y prevenir su recurrencia.

Herramientas de Mejora continua: ciclo PDCA, metodologías Six –sigma y Lean:

El ciclo de mejora continua de la calidad PDCA (también conocido como ciclo de Deming o ciclo de Shewhart) es una metodología utilizada para la mejora continua de procesos y productos en la gestión de la

calidad. Sus siglas corresponden a las palabras en inglés *Plan*, *Do*, *Check* y *Act*, que representan las cuatro etapas del ciclo:

1. **Plan** (Planificar):

- Identificar y analizar el problema o la oportunidad de mejora.
- Establecer objetivos y metas específicos.
- Desarrollar un plan de acción detallado que incluya las estrategias y recursos necesarios para alcanzar los objetivos.
- Definir los criterios de éxito y cómo se medirán.

2. **Do** (Hacer):

- Implementar el plan de acción en un entorno controlado o a pequeña escala.
- Ejecutar las actividades planificadas y recopilar datos relevantes para su análisis.
- Asegurarse de que todos los involucrados entiendan sus roles y responsabilidades.

3. **Check** (Verificar):

- Revisar y evaluar los resultados obtenidos durante la fase de implementación.
- Comparar los resultados con los objetivos y metas establecidos en la fase de planificación.
- Identificar cualquier desviación o problema y analizar las causas subyacentes.
- Documentar los hallazgos y las lecciones aprendidas.

4. **Act** (Actuar):

- Tomar decisiones basadas en los resultados de la fase de verificación.
- Si los objetivos se han alcanzado, estandarizar y documentar las mejores prácticas para su implementación a mayor escala.

- Si los objetivos no se han alcanzado, realizar ajustes y modificaciones en el plan de acción.
- Prepararse para iniciar un nuevo ciclo PDCA con las mejoras identificadas, fomentando la cultura de mejora continua.

El ciclo PDCA es iterativo, lo que significa que una vez que se completa una ronda, se debe comenzar nuevamente desde la fase de planificación, utilizando la información y las experiencias obtenidas en el ciclo anterior. La implementación de éste permite a las organizaciones mejorar continuamente sus procesos y productos, aumentando la eficiencia, la calidad y la satisfacción del cliente.

Otra metodología que se utiliza como herramienta de mejora continua es la metodología *six-sigma*, que consiste en un enfoque basado en datos para mejorar la calidad mediante la identificación, eliminación de defectos y variabilidad en los procesos. *Six Sigma* utiliza herramientas estadísticas y técnicas de gestión de proyectos para lograr mejoras significativas y sostenibles en el rendimiento de los procesos. El objetivo es alcanzar un nivel de calidad que se traduce en un máximo de 3,4 defectos por millón de oportunidades (DPMO), lo cual corresponde a un nivel de calidad muy alto. Por lo expuesto, se deduce que no fue ideada para laboratorios de Análisis Clínicos, sin embargo es aplicable ya que sus principios abarcan todos los aspectos que consideramos en la mejora continua y calidad de los análisis clínicos.

1. Enfoque en el Paciente:

- La calidad del servicio se define desde la perspectiva del paciente y del médico solicitante.
- Se busca cumplir con las expectativas en cuanto a precisión, rapidez y

confiabilidad de los resultados.

2. Gestión Basada en Datos y Hechos:

- Las decisiones se toman basadas en el análisis de datos precisos y objetivos de los procesos del laboratorio.
- Se utilizan herramientas estadísticas para comprender y controlar la variabilidad en los resultados de los análisis.

3. Mejora de procesos:

- Se identifican y eliminan las causas raíz de los errores y variabilidad en los resultados de los análisis.
- Se optimizan los procesos para aumentar la eficiencia, reduciendo el tiempo de entrega de resultados y minimizando errores.

4. Compromiso de la Alta Dirección:

- El liderazgo y el compromiso de la alta dirección del laboratorio son esenciales para el éxito de *Six Sigma*.
- La alta dirección proporciona los recursos necesarios y apoya las iniciativas de mejora.

5. Colaboración y Trabajo en Equipo:

- Se fomenta la colaboración entre diferentes departamentos y niveles dentro del laboratorio.
- Se forman equipos multidisciplinarios para abordar problemas específicos y mejorar los procesos.

Sistema Lean: El Sistema Lean, también conocido como *Lean Manufacturing* o Producción Lean, es una metodología de gestión y mejora de procesos que se centra en maximizar el valor para el cliente mediante la reducción del desperdicio y la optimización de todos los procesos de producción. Originado en el Sistema de Producción de Toyota,

Lean se ha extendido a diversas industrias y sectores, incluyendo laboratorios de análisis clínicos.

Los principios del sistema Lean están en concordancia con todo lo que venimos planteando sobre la calidad en los laboratorios de análisis clínicos, así como también en conjunto con las mencionadas normas ISO; ésto es:

Definir el Valor desde la Perspectiva del Cliente:

- Identificar lo que es valioso para el cliente y concentrarse en mejorar esos aspectos.
- En un laboratorio de análisis clínicos, el valor podría ser la precisión, rapidez y confiabilidad de los resultados.

Identificar el Flujo de Valor:

- Mapear todos los pasos y procesos que participan en la entrega del producto o servicio.
- En el contexto de un laboratorio, ésto incluye desde la recolección de muestras hasta la entrega de resultados.

Crear Flujo:

- Eliminar interrupciones y cuellos de botella para que los procesos fluyan sin problemas.
- Asegurarse de que las muestras se procesen de manera eficiente y sin demoras innecesarias.

Implementar un Sistema Pull:

- Producir sólo lo que el cliente necesita cuando lo necesita, en lugar de sobreproducir.
- Asegurar que los recursos del laboratorio (personal, equipos) se utilicen de manera eficiente en función de la demanda actual.

Buscar la Perfección a través de la Mejora Continua (Kaizen):

- Fomentar una cultura de mejora continua donde todos los empleados busquen constantemente formas de mejorar los procesos y eliminar el desperdicio.
- Involucrar a todo el personal del laboratorio en la identificación y resolución de problemas.

Desafíos y oportunidades

Las normas de calidad son de aplicación voluntaria, es decir que no son obligatorias. Sin embargo su uso está recomendado para la mejora continua de la calidad en los laboratorios, como así también en todo tipo de organizaciones.

Cada laboratorio debe establecer dentro de su misión y visión qué tipo de herramientas utilizará para mejorar su desempeño y para ello debe contar con tecnología de apoyo que permita llevar a cabo todos sus procedimientos, hoy por hoy es imprescindible contar con sistemas de IT (Tecnología de la Información) que se refieren a la combinación de hardware, software, redes y servicios necesarios para gestionar, procesar, almacenar y comunicar información, ya que facilitan una amplia gama de actividades, desde operaciones diarias hasta la toma de decisiones estratégicas.

Adaptación al cambio, costos y recursos

En nuestro país, es fundamental realizar un análisis de los riesgos y oportunidades que se presentan a los laboratorios como integrantes del Sistema de Salud de la Nación.

La planificación en todo tipo de laboratorios, del ámbito público o privado, resulta de la mayor importancia para lograr cumplir con la finalidad y los objetivos mencionados anteriormente. El correcto análisis de los costos de los diferentes componentes, reactivos, insumos permitirá garantizar el desarrollo sustentable de las actividades y la disponibilidad de los recursos.

En el escenario cambiante en el cual se desarrolla la actividad, un aspecto relevante resulta la adaptación al cambio. En nuestra experiencia, la flexibilidad y adaptación a los cambios son valores que debe poseer la organización, así como también debe ser compartido por todos los integrantes del staff del laboratorio.

Avances tecnológicos, enfoques emergentes en la gestión de calidad, Inteligencia Artificial.

Los grandes avances tecnológicos realizados en los métodos diagnósticos proporcionan grandes ventajas gracias a la mejora de la automatización: En la disminución de errores analíticos; el aumento en la seguridad del paciente gracias a al uso de sistemas informáticos que imprimen y leen etiquetas con códigos de barras garantizando la trazabilidad de la información y evitando errores de transcripción; el aumento de la velocidad de procesamiento de muestras; la disminución del volumen de muestra requerido; disminución del riesgo biológico en la manipulación de los especímenes; en la mayor cantidad de pacientes que pueden ser atendidos y en la disminución del tiempo de informe de resultados (TAT: *turn around time*).

En este punto es importante destacar que todos estos avances técnicos deben ser analizados bajo criterios éticos profesionales.

Más recientemente, el uso de la Inteligencia Artificial, permite mediante la configuración de criterios bioquímicos para la comparación de resultados del mismo paciente. La clasificación de aquellos que resultan patológicos o críticos (están tan alejados de los puntos de regulación homeostáticos que ponen en riesgo la vida del individuo) basados en algoritmos informáticos, son informados al profesional mediante alertas visuales para el profesional en la revisión final del reporte, aportando seguridad para el paciente y aviso al médico tratante en caso de riesgo para la salud del mismo.

Conclusiones:

Un sistema de calidad bien planificado y organizado en un laboratorio no sólo asegura la precisión, veracidad, exactitud y confiabilidad de los resultados, sino que también mejora la eficiencia operativa, la satisfacción del personal y de los clientes.

El laboratorio clínico no sólo produce información clínicamente relevante a través de los resultados de laboratorio, sino que también forma parte del sistema de salud del que es integrante y como tal tiene un importante rol en la sociedad por lo que debe cumplir con el requisito de informar resultados fiables.

Implementar estándares nacionales e internacionales como ISO 17025 o ISO 15189, y seguir prácticas recomendadas en la bibliografía relevante, es fundamental para el éxito continuo del laboratorio.

Por último, una característica que creemos de la mayor relevancia para quienes trabajamos en salud en búsqueda de la excelencia en nuestro servicio es justamente, el amor al trabajo bien realizado.

Bibliografía

F.W. Breyfogle, *Implementing Six Sigma: Smarter Solutions Using Statistical Methods*. John Wiley & Sons, 2003.

N. Busso, Los eventos adversos y la calidad de atención Estrategias para mejorar la seguridad de los pacientes pediátricos. *Archivos Argentinos de Pediatría* 2004, 102(5), 402-410.

W. Edwards Deming, *Out of the Crisis*. MIT Press, 1986.

Eurachem/CITAC. *Guide to Quality in Analytical Chemistry: An Aid to Accreditation*. Eurachem, 2012. Disponible en www.eurachem.org (Consultado junio 2024).

M.J. Hallworth, The '70% claim': what is the evidence base? *Ann Clin Biochem* 2011, 48, 487-488.

M.J. Harry, R. Schroeder, *Six Sigma: The Breakthrough Management Strategy R2*

evolutionizing the World's Top Corporations. Currency, 2005.

Masaaki Imai, *Gemba Kaizen: A Commonsense Approach to a Continuous Improvement Strategy*. McGraw-Hill, 1997.

International Organization for Standardization. *ISO 15189:2012 - Medical laboratories - Requirements for quality and competence*. ISO. Ginebra, 2012.

International Organization for Standardization. *ISO 9000:2015 - Quality management systems — Requirements*. ISO. Ginebra, 2015.

International Organization for Standardization. *ISO/IEC 17025:2017 - General requirements for the competence of testing and calibration laboratories*. ISO. Ginebra, 2017.

J.K. Liker, *The Toyota Way: 14 Management Principles from the World's Greatest Manufacturer*. McGraw-Hill, 2004.

J.C. Miller, J.N. Miller. *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry*. Pearson Education, 2010.

OMS. *Sistema de gestión de la calidad en el laboratorio: manual*. Organización Mundial de la Salud, Ginebra, 2016. ISBN 978 92 4 354827 2

W.P. Oosterhuis, A. Coskun, *Practical Clinical Chemistry: Core Concepts*. Elsevier, 2014.

D.J. Paustenbach, *The Practice of Occupational and Environmental Health*. John Wiley & Sons, 2015.

T. Pyzdek, P. Keller, *The Six Sigma Handbook: A Complete Guide for Green Belts, Black Belts, and Managers at All Levels*. McGraw-Hill Education, 2014.

M. Rother, J. Shook, *Learning to See: Value Stream Mapping to Create Value and Eliminate Muda*. Lean Enterprise Institute, 1999.

W.A. Shewhart, *Statistical Method from the Viewpoint of Quality Control*. Dover Publications, 1986.

Sociedad Española del laboratorio clínico. *La inteligencia artificial mejora la precisión del laboratorio clínico*. Nota de prensa, 2023.

Disponible en www.seqc.es (consultado en junio de 2024).

J.O. Westgard. *Basic QC Practices*. Westgard Quality Corporation. Four edition, 2016.

J.O. Westgard. *Basic Method Validation*. Westgard Quality Corporation. Four edition, 2020.

J.P. Womack, D.T. Jones. *Lean Thinking: Banish Waste and Create Wealth in Your Corporation*. Simon & Schuster, 2003.

J.P. Womack, D.T. Jones, D. Roos. *The Machine That Changed the World: The Story of Lean Production-- Toyota's Secret Weapon in the Global Car Wars That Is Now Revolutionizing World Industry*. Free Press, 1990.

QUÍMICA Y ARTE.
PRESERVACIÓN DEL
PATRIMONIO CULTURAL

LOS COLORES DE LA PATAGONIA ANTIGUA. EL USO DE HERRAMIENTAS QUIMICAS COMBINADAS PARA EL ESTUDIO DE PIGMENTOS EN CONTEXTOS ARQUEOLOGICOS DEL NORDESTE DE LA PROVINCIA DE CHUBUT, ARGENTINA

Marcia Mazzuca^{*1}, Marta Maier², Celeste Gurin¹, Julieta Gomez Otero³

1- *Facultad de Ciencias Naturales y Ciencias de la Salud, Departamento de Qu(mica, UNPSJB I Instituto de Biociencias de la Patagonia, UNPSJB - CONICET - Km. 4 (9000) Comodoro Rivadavia, Chubut.*
mazzucam@unpata.edu.ar.

2- *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de Qu(mica Organica, UBA I Unidad de Microanálisis y Métodos F(sicos en Qu(mica Organica, UBA - CONICET.*
3- *Facultad de Humanidades y Ciencias Sociales, UNPSJB I Instituto de Diversidad y Evolución Austral, CENPAT - CONICET - Almirante Brown 2915 (U9120) Puerto Madryn, Chubut.*

Resumen:

El trabajo muestra cómo la colaboración interdisciplinaria y el uso de técnicas analíticas avanzadas pueden proporcionar información detallada sobre la composición química de materiales arqueológicos, sus tecnologías de producción, aplicación y las fuentes de aprovisionamiento. En el estudio de pigmentos presentes en materiales arqueológicos del nordeste del Chubut, Patagonia Argentina, se han utilizado combinaciones de métodos instrumentales como la espectroscopia infrarroja, la espectroscopia Raman, la difracción y fluorescencia de rayos X, y la cromatografía gaseosa acoplada con espectrometría de masas. Las estrategias metodológicas empleadas han permitido identificar tanto componentes inorgánicos como orgánicos de los pigmentos. Al combinar estas herramientas con la contextualización proporcionada por el conocimiento arqueológico, el análisis químico brinda valiosos aportes a la arqueología y a la conservación del patrimonio cultural. En

conjunto, la utilización de herramientas analíticas combinadas para el estudio químico de materiales arqueológicos pigmentados aporta claridad al conocimiento sobre la utilización y circulación de pigmentos en la Patagonia prehistórica, revelando aspectos clave de la vida, la tecnología y las interacciones sociales en la región.

Palabras clave: pigmentos minerales; arqueometría; Patagonia.

Abstract:

The work shows how interdisciplinary collaboration and the use of advanced analytical techniques can provide detailed information about the chemical composition of archaeological materials, including their production technologies, applications, and sources of supply. In the study of pigments present in archaeological materials from northeastern Chubut, Patagonia, Argentina, combinations of instrumental methods such as infrared spectroscopy, Raman spectroscopy, X-ray diffraction and fluorescence, and gas chromatography coupled with mass spectrometry have been used. The methodological strategies employed have allowed the identification of both inorganic and organic components of the pigments. By combining these tools with the contextualization provided by archaeological knowledge, the chemical analysis offers valuable contributions to archaeology and the conservation of cultural heritage. Together, the use of combined analytical tools for the chemical study of pigmented archaeological materials brings clarity to our understanding of pigment use and circulation in prehistoric Patagonia, revealing key aspects of life,

technology, and social interactions in the region.

Keywords: mineral pigments; archaeometry; Patagonia.

Introducción:

Patagonia fue poblada por sociedades humanas hace aproximadamente 13.000 años AP [1].

Desde esos tiempos iniciales y hasta fines del siglo XIX, sus habitantes vivieron de la caza y la recolección, aprovechando las rocas, minerales, plantas y animales propios de cada ambiente: costa marina, meseta y cordillera. Entre los recursos que formaron parte de su vida cotidiana se encuentran los pigmentos, cuya utilización pudo determinarse desde el

Holoceno temprano [1, 2, 3]. El color más representado es el rojo, aunque también se han identificado pigmentos blancos, negros, amarillos y verdes, entre otras tonalidades.

La arqueología da cuenta de la presencia de pigmentos en diversidad de sitios y materialidades; no obstante, su mayor representación se encuentra en las pinturas rupestres [1]. Si bien estas evidencias demuestran el uso de fuentes minerales, también se habría recurrido a plantas y animales, de manera similar a como lo describen numerosos relatos etnohistóricos [2]. Este sesgo en el registro arqueológico puede deberse a elecciones humanas, pero asimismo a procesos tafonómicos, dado que los colorantes de origen orgánico raramente perduran.



Figura 1 - Costa atlántica norte y valle inferior del Río Chubut y sitios de hallazgo de muestras pigmentadas: (1) molino plano, (2) bolita de pigmento y (3) pinturas rupestres.

En numerosos sitios de la costa atlántica y el valle inferior del Río Chubut (Figura 1), se han hallado diversas materias primas y bienes no locales, lo que sugiere intercambios y circulación entre distintas regiones, algunas alejadas de la Patagonia. Los materiales incluyen pigmentos minerales, cuentas de valva y caracoles, cañía colihue, obsidias, granitos, pizarras, hematita y basaltos vesiculares, lo que evidencia contactos

directos o indirectos entre diferentes grupos. Un hallazgo notable es el de un hacha de bronce, confeccionada por fundición, en el sitio enterratorio Rawson. Esta hacha es similar a las hachas ceremoniales de los 1000 a 500 años AP de los valles Calchaquies del noroeste argentino [3]. Estudios fisicoquímicos sobre la circulación de obsidiana, roca utilizada para confeccionar herramientas liticas, han identificado cinco de

las once fuentes que se usaron en la provincia [4]. De esas fuentes dos - Telsen / Sierra Negra (T/SN) y Sacanana (S) se encuentran en la meseta centro-norte de Chubut, a 170 y 300 km de distancia respectivamente, y la tercera -Pampa del Asador (PDA)- en el

centro-oeste de la provincia de Santa Cruz, a 700/800 km [5] (**Figura 2**)

Estas investigaciones han comenzado a delinear potenciales rutas de distribución en tiempo y espacio.

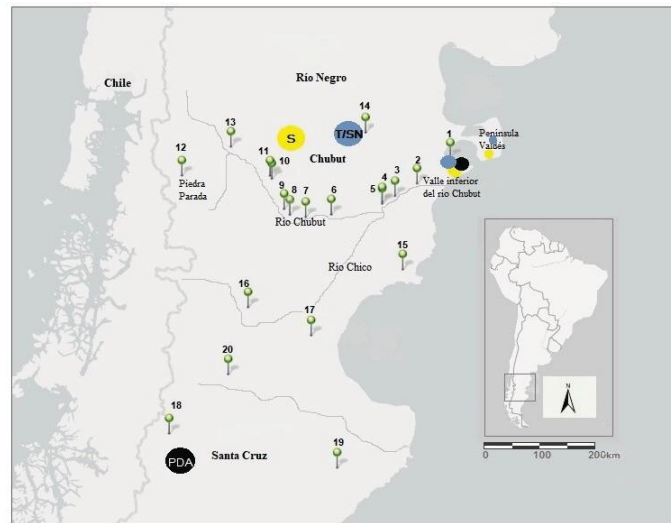


Figura 2 - Ubicación geográfica de los afloramientos naturales analizados. Chubut : 1) Cantera Playa Parana, 2) Gaiman-Dolavon, 3) Al este del Dique Ameghino, 4) Al oeste del Dique Ameghino, 5) Bajada Las Plumas, 6) Las Plumas, 7) Los Altares, 8) Al este de Paso de los Indios, 9 - 11) Camino a Paso del Sapo, 12) Piedra Parada-Gualjaina, 13) Paso de los Indios, 14) Telsen, 15) Camarones, 16) Ruta 26 km 199. Santa Cruz: 17) Cerro Castillo, 18) Lago Posadas, 19) Tres Cerros, 20) Río Pinturas. Referencias de fuentes de obsidianas: T/SN (Telsen/Sierra Negra), S (Sacanana) y PDA (Pampa del Asador).

Los trabajos arqueológicos también permitieron identificar y recuperar pigmentos en múltiples contextos, entre ellos, entierros humanos, artefactos de molienda y cerámica y pinturas rupestres [6]. En cuanto a las potenciales fuentes de aprovisionamiento, se comprobó la ausencia de oferta local. Un dato que llama la atención es que varios sitios de hallazgo de los materiales arqueológicos pigmentados se encuentran a más de 300 km de afloramientos naturales pigmentados

conocidos en la actualidad. A lo largo de la cuenca del Río Chubut, que cruza a esta provincia de este a oeste y en otras potenciales vías de distribución de las obsidianas [5] se han encontrado afloramientos naturales de pigmentos (**Figura 3**), lo que indicaría como hipótesis que su adquisición pudo ser por traslado directo a los lugares de residencia o mediante intermediarios



Figura 3 - Afloramientos naturales del valle medio del Rio Chubut. (a) afloramiento rojo oscuro, Paso de los Indios; (b) afloramiento blanco, Las Plumas; (c) afloramiento amarillo, Paso del Sapo.

Los contextos de hallazgo en la costa norte y el valle inferior del Rio Chubut han sido siempre desfavorables para la preservación de objetos arqueológicos: sitios de superficie expuestos al viento, la lluvia, las mareas o inundaciones, la luz solar, la bioturbación y la acción antrópica. No obstante, el material pigmentado ha permanecido durante miles de años adherido a los soportes, en estos casos roca, piedra, huesos y arcilla.

Para abordar el estudio químico de materiales arqueológicos, la utilización de múltiples técnicas analíticas es un factor crucial, ya que permite aprovechar las ventajas y superar las limitaciones de las técnicas individuales. Esto posibilita una identificación más precisa de los componentes de las muestras. Además, en este tipo de trabajos en donde la química desempeña un papel central, la comunicación interdisciplinaria es clave, ya que el conocimiento arqueológico asociado a los distintos hallazgos provee información relevante tanto para la planificación de las metodologías de análisis como para la interpretación de los resultados obtenidos.

A continuación, se presentan tres casos de estudio químico de materiales arqueológicos pigmentados en donde se aplicaron técnicas combinadas de análisis instrumental. El primero es el de un molino plano hallado en un sitio de superficie que posiblemente haya servido como paleta para el mezclado o la

preparación de pigmentos, el segundo es el de una bolita de pigmento encontrada durante la excavación de un sitio de ocupación, y el tercero es el de pinturas rupestres de la localidad La Angostura, en el valle inferior del Rio Chubut (**Figura 1**). Además, se discuten los resultados del análisis químico de 22 muestras de afloramientos naturales coloreados que fueron recolectadas a lo largo del curso del Rio Chubut y en sitios coincidentes con rutas de intercambio de obsidiana señaladas por Stern en 2017 [5].

La **Figura 4** muestra la secuencia en la que utilizamos las distintas técnicas y el tipo de información que puede obtenerse con cada una de ellas. La espectroscopia infrarroja con reflectancia total atenuada (FTIR-ATR), junto con la espectroscopia Raman (RS), son dos de las herramientas analíticas más poderosas para estudios arqueológicos, dado que posibilitan el análisis tanto de material inorgánico como orgánico. Además, estas técnicas no requieren de una preparación previa de las muestras, como en los análisis por espectroscopia infrarroja de transmitancia tradicional [7] y posibilitan estudiar el material inorgánico en estado amorfo. Esta última es una ventaja significativa porque los análisis por difracción de rayos X (DRX) tienen limitaciones en este aspecto. En los últimos años, la RS ha experimentado un

crecimiento progresivo en el campo del patrimonio cultural, especialmente impulsado por el uso de equipos portátiles que facilitan las mediciones *in situ* [8]. Tanto FTIR-ATR como RS permiten la identificación molecular de compuestos según los rangos de absorción

de sus enlaces químicos en distintas regiones del espectro. Los resultados que brindan ambas técnicas contribuyen a planificar las metodologías en etapas subsiguientes del análisis y respaldar la identificación de los compuestos en base a las evidencias que aportan los otros procedimientos analíticos.

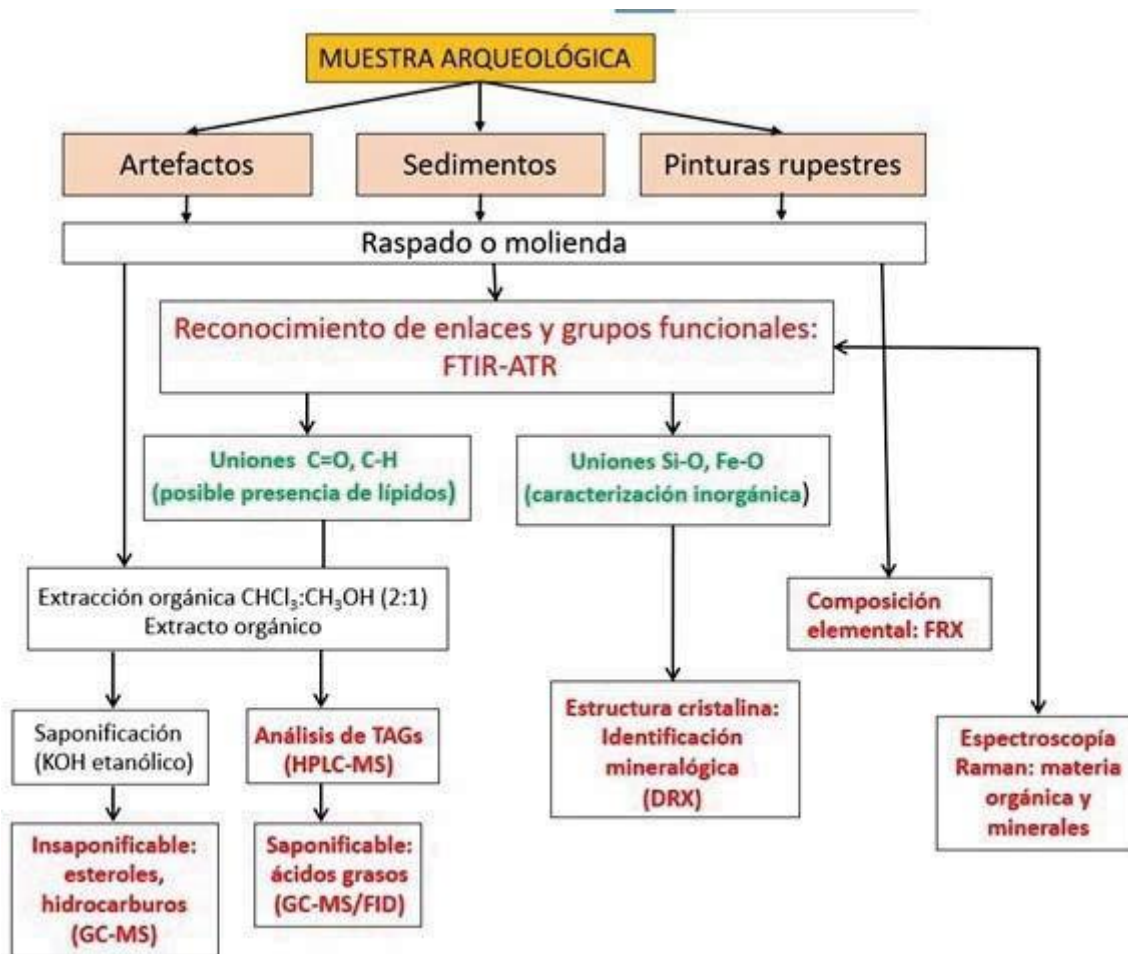


Figura 4 - Metodología de análisis de materiales arqueológicos pigmentados.

La DRX permite la caracterización de minerales en estado cristalino de forma muy precisa a través de la comparación de los resultados con bases de datos de referencia que integran la mayoría de los softwares del equipo. Si bien esta técnica es muy utilizada cuando la cantidad de material disponible para el análisis no es un factor limitante, existen actualmente equipos de micro-difracción de rayos X que posibilitan el

análisis de áreas muy pequeñas de una muestra, sin necesidad de una preparación previa y de manera no destructiva [9]. Por su parte, la fluorescencia de rayos X (FRX) proporciona información química elemental de los materiales inorgánicos. A su vez, el uso de equipos portátiles es útil tanto para mediciones *in situ* como para el análisis de pequeños fragmentos de pigmento previo a la realización de otros análisis químicos,

convirtiéndose de este modo en una técnica no invasiva, rápida y fácil de usar [10].

Cuando se tienen indicios de la presencia de compuestos orgánicos en las muestras, la espectrometría de masas es una de las técnicas más empleadas debido a su alta sensibilidad y la posibilidad de acoplarse con técnicas cromatográficas, lo que posibilita la separación y caracterización de los componentes en mezclas complejas. Estas técnicas combinadas han permitido la identificación de una amplia variedad de compuestos orgánicos provenientes de recursos naturales de origen animal y vegetal, tales como grasas, aceites, ceras, pigmentos, proteínas y sustancias psicoactivas en una numerosa variedad de materiales arqueológicos [11]. La información obtenida es valiosa para la reconstrucción de las tecnologías utilizadas para la adhesión de los pigmentos a los materiales de soporte, la impermeabilización de artefactos o para indagar sobre los usos de materiales cerámicos para el almacenaje y la cocción de alimentos.

Los ácidos grasos son componentes esenciales de muchos lípidos y tienen la particularidad de ser más resistentes que otras moléculas a los largos periodos deposicionales [12]. Al ser hidrofóbicos, en general no son lixiviados por el agua y en las cerámicas permanecen retenidos en los poros de sus matrices [13]. La composición de los lípidos varía según provengan del reino animal o vegetal y existen lípidos específicos según la fuente [12].

Molino plano

El molino plano (Figura 5) fue hallado junto con un esqueleto humano y otros artefactos en un contexto de superficie a cielo abierto en la localidad El Progreso (Península Valdes) con su cara pigmentada hacia abajo. La datación del esqueleto del individuo fue de 2160 ± 60 años ^{14}C AP [14].

La hipótesis que se planteó sobre el molino es que podría haberse utilizado como paleta para la preparación de pigmentos con fines decorativos (pintura corporal y/o de vestimenta). Como en la costa norte de Chubut no se han encontrado representaciones rupestres se descarta la preparación de pinturas con estos fines.

Se realizó un raspado de los pigmentos rojo (a) y negro (b) y de la piedra del molino (c) de un pequeño sector de la superficie del artefacto. Estas muestras (27, 8 y 63 mg de muestra respectivamente) se analizaron por FTIR-ATR, FRX y DRX. Posteriormente, las muestras fueron extraídas con solvente orgánico y analizadas por cromatografía gaseosa con detector de ionización de llama (GC-FID).

La **Figura 5** muestra las etapas del procedimiento analítico realizado y la información obtenida con cada una de las técnicas empleadas.

El análisis por FTIR-ATR mostró señales compatibles con cuarzo (SiO_2), calcita (CaCO_3) y aluminosilicatos en todos los raspados del molino. En el pigmento rojo (a) se identificó además hematita (Fe_2O_3) mientras que en el raspado del pigmento negro (c) no se identificó ningún compuesto responsable del color por esta técnica.

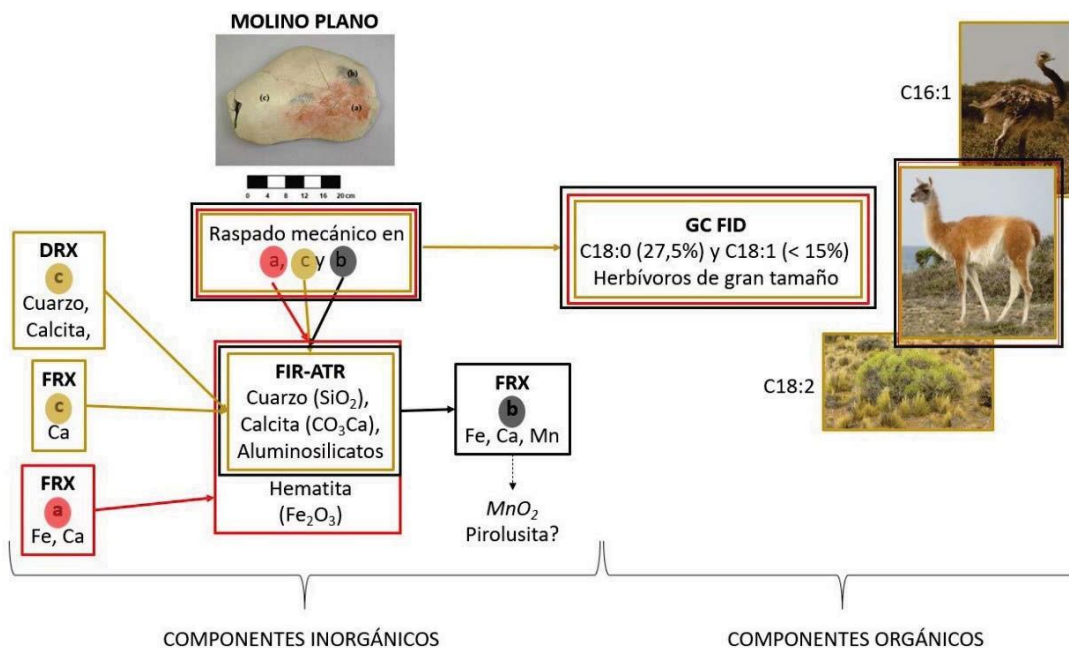


Figura 5 - Resultados obtenidos a partir de cada una de las metodologías aplicadas al análisis del molino plano.

Debido a las limitaciones en la cantidad de muestra coloreada, los análisis por DRX sólo se realizaron sobre el raspado de piedra del molino (c). Así se confirmó la presencia de cuarzo y calcita, pero no se identificaron aluminosilicatos cuyas bandas fueron observadas en el espectro infrarrojo. El análisis por FRX de las 3 muestras indicó Ca como elemento mayoritario en el raspado de la piedra del molino (c), Fe y Ca en el raspado del pigmento rojo (a) y Ca y Mn en el raspado del pigmento negro (b). En la muestra b) la identificación de Mn indicaría la presencia de pirolusita (MnO_2), un mineral de color negro que ha sido encontrado con frecuencia en contextos arqueológicos en Patagonia [15]. Por su parte, la identificación de cuarzo y calcita en el raspado de la piedra del molino (c) y en los pigmentos coloreados, sugiere que estos minerales conforman la estructura de la piedra.

La hipótesis de que el pigmento rojo pudiera provenir de alguno de los afloramientos naturales analizados previamente fue descartada por comparación de los espectros infrarrojo y de fluorescencia de rayos X de la muestra roja raspada (b) con los de los afloramientos naturales que contenían hematita. Como ejemplo, en la se comparan los espectros infrarrojos del raspado rojo del molino (b) con uno de los afloramientos naturales, N° 15). Este afloramiento presentaba mucha similitud con el raspado del molino: el mismo código de color según la tabla Munsell y la presencia de hematita, cuarzo, calcita y aluminosilicatos en su composición. La diferencia principal radica en la ausencia de bandas características de arcillas y la menor cantidad relativa de cuarzo y aluminosilicatos en el raspado (b).

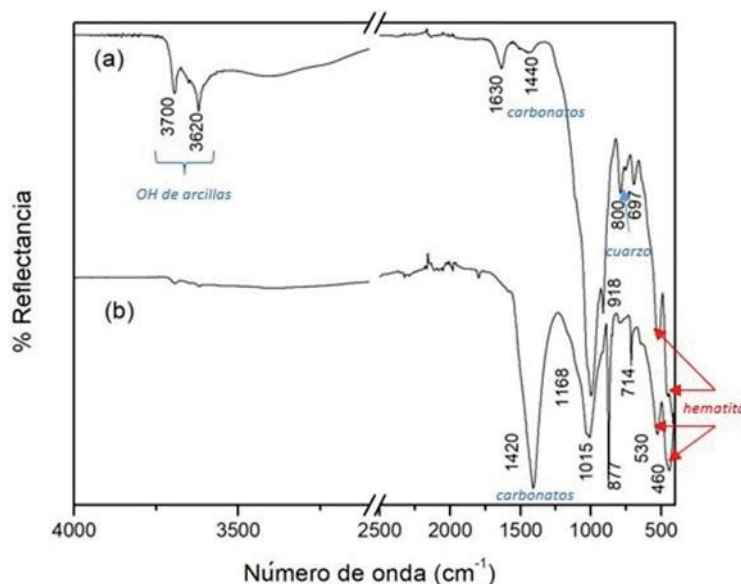


Figura 6 - Espectros infrarrojos de (a) un afloramiento natural rojo, (b) pigmento rojo del molino plano.

Como consecuencia de estas observaciones, surge la hipótesis sobre la posibilidad de uso de tecnologías de purificación previa del pigmento, aprovechando por ejemplo las diferentes propiedades de solubilidad o hidratación y flotación diferencial de los componentes en agua u otros procedimientos mecánicos, tales como el tamizado o la clasificación por gravedad, en caso de que tengan diferentes densidades. Las arcillas, por ejemplo, podrían ser separadas del resto de los componentes por diferencias en el tamaño de las partículas y la velocidad de sedimentación, dado que la hematita, el cuarzo y los aluminosilicatos son en general más pesados y sedimentarían más rápido. También el tamizado podría ser efectivo, ya que la caolinita es menos densa y luego de una trituration se convierte en un polvo de menor tamaño de partícula que el resto. También es posible que los antiguos cazadores-recolectores hubieran combinado varios de estos métodos. Por ejemplo: trituration de la mezcla de minerales, tamizado para eliminar las partículas más grandes, mezcla con agua para decantar y separar partículas más finas como caolinita y

dejar reposar y decantar varias veces para mejorar la pureza.

Se extrajeron y analizaron los lípidos de los 3 raspados en la búsqueda de una posible incorporación de aglutinantes. La cantidad de lípidos totales por gramo de muestra en los raspados rondó entre los 9,5 y los 18,2 mg.g⁻¹ de muestra. Esta masa es considerablemente mayor a la detectada en los afloramientos naturales analizados en este trabajo (< 0,8 mg. g⁻¹ de muestra). Esto evidencia un contacto del molino plano con material lipídico. Los ácidos grasos identificados por GLC-FID y GC-MS en los 3 raspados (a, b y c) mostraron altas proporciones de ácidos grasos saturados (SFA). Esto posiblemente se debe a que los ácidos insaturados son químicamente más reactivos y de fácil degradación [12, 13]. No se detectaron ácidos dicarboxílicos (C4 a C10) que, según algunos autores, resultan de la degradación oxidativa de los ácidos grasos poliinsaturados (PUFA) [13]. De todos modos, al momento de efectuar la interpretación de los resultados, hay que tener en cuenta que la ausencia de estos ácidos podría deberse al contexto de hallazgo, ya que este molino ha estado

expuesto en el tiempo a la lixiviación del agua y el ambiente y los ácidos dicarboxílicos son más solubles en agua que otros lípidos. La proporción relativa del ácido estearico (18:0) es elevada en las 3 muestras (pigmentos y raspado de roca). Adicionalmente, en el raspado de la piedra del molino (c) se detectaron los ácidos palmítico (16:1) y linoleico (18:2). Investigaciones realizadas [16] señalan que proporciones mayores al 27,5% de ácido estearico (18:0) junto con la presencia de ácido oleico (18:1) en cantidades menores al 15%, constituyen un fuerte indicador de la presencia de lípidos provenientes de herbívoros de gran tamaño. Los registros arqueofaunísticos indican que la especie herbívora más consumida por los cazadores recolectores era el guanaco patagónico [3]. Cruzando esta información con el banco de datos de animales regionales construido a efectos del desarrollo de esta investigación [17] los únicos tejidos grasos que presentan una elevada proporción de los ácidos grasos 18:0 y 18:1 son los de médula y grasa de guanaco, lo que resulta coincidente con lo planteado por Malainey y col. [16]. Adicionalmente, la detección de los ácidos palmítico (16:1) y linoleico (18:2) presentes en el raspado de la piedra del molino (c), sugieren el contacto de este artefacto con sustancias o mezclas de sustancias lipídicas de diferente origen. El ácido 16:1 ha sido identificado en la mayoría de los tejidos grasos de los animales regionales analizados en nuestras investigaciones [17] y también han sido informados en grasa de llama (*Lama glama*), grasa y médula de choique (*Pterocnemia pennata*) y grasa de guanaco (*Lama guanicoe*) [18]. Por su parte, el ácido 18:2 ha sido identificado mayormente en aceites vegetales [19], aunque también se lo ha identificado en proporciones considerables en grasa de peludo y yema de huevo de choique [17]. Por otro lado, el valor del índice 16:0/18:0 obtenido para las 3 muestras no se aproxima a los obtenidos para las grasas de referencia analizadas. Hay que tener en

cuenta que la comparación de índices con muestras de referencia presenta limitaciones cuando los materiales arqueológicos han estado en contacto con mezclas de sustancias de distinto origen [12]. Esto sustenta la hipótesis de que las sustancias lipídicas utilizadas en la preparación de las pinturas corresponderían a mezclas de diversos orígenes, tanto animales como vegetales.

Bolita de pigmento

Una bolita de pigmento de aproximadamente 7 u 8 mm de diámetro fue hallada en zaranda (tamiz) durante los trabajos de relevamiento arqueológico llevados a cabo en el sitio Las Ollas 1 [14, 20]. Este sitio pertenece a la localidad arqueológica Punta Cormoranes, la cual está conformada por 7 sitios con evidencias arqueológicas. Las Ollas 1 es un sitio extenso, localizado entre relieves dunarios, a 20 metros de altura s.n.m. y representa una base residencial. En los trabajos arqueológicos se identificaron restos de huesos de guanaco y pinguino, cáscaras de huevo de choique y valvas de cholgas, artefactos líticos y tres concentraciones abundantes de tuestos cerámicos, de los que se recolectaron más de 60 fragmentos. Se realizaron dos dataciones de muestras de valvas que arrojaron las edades radiocarbónicas de 610 ± 40 años ^{14}C AP y 640 ± 40 años ^{14}C AP. Se registró además la presencia de rocas no locales (obsidiana, hematita y basalto vesicular) que indican la circulación de materias primas en un radio de entre 100 y 300 km [14]. En este contexto fue encontrada la bolita de pigmento. Las hipótesis planteadas sobre su utilidad son varias. Teniendo en cuenta las actividades realizadas por los antiguos pobladores del territorio en una base residencial, podría haberse utilizado como pintura del engobe exterior de cerámicas, pintura corporal o de cueros. Se descarta que la bolita sea parte de una preparación para aplicar en pinturas rupestres porque no se ha constatado su presencia en Península Valdes.

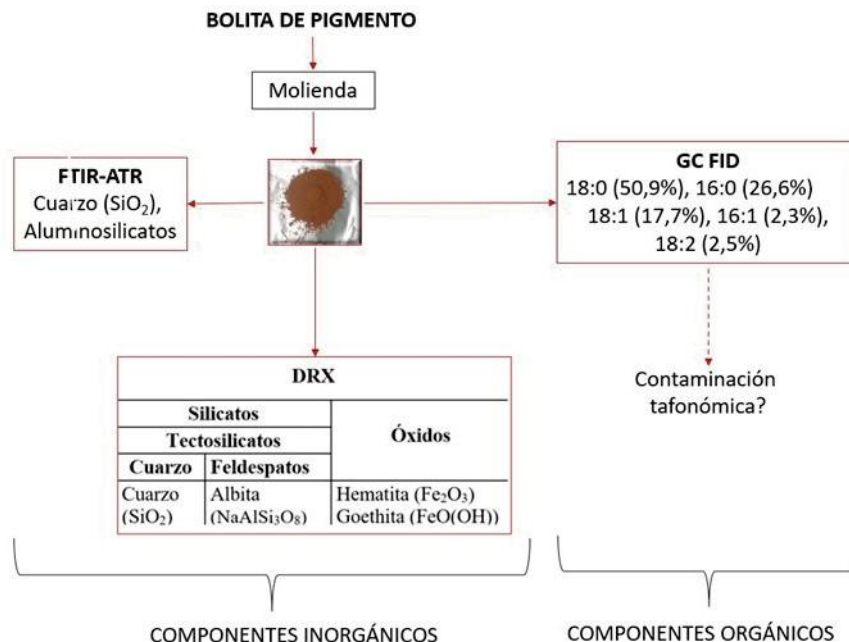


Figura 7 - Estrategia metodológica y resultados del análisis químico de la bolita de pigmento

La muestra la estrategia metodológica utilizada. El espectro infrarrojo de esta muestra registró únicamente bandas características de cuarzo y de aluminosilicatos. Estos resultados no aportan información sobre la fuente responsable de la pigmentación de la bolita. Fue el análisis por DRX quien reveló la presencia de hematita y goethita, esta última representada por una única señal del patrón de difracción característico, junto con cuarzo y albita. Los resultados de los análisis de esta muestra destacan nuevamente la relevancia de la utilización de métodos analíticos combinados para la identificación de los pigmentos. En este caso, las bandas características del cuarzo y los aluminosilicatos hidratados, enmascaran las bandas principales de la hematita y la goethita en el espectro infrarrojo. Por otra parte, no se observaron otras bandas características de la goethita lo que reforzaría la baja proporción de este mineral detectado en la muestra por DRX. Para interpretar este resultado, hay que tener en cuenta que es común identificar ambos minerales cuando se deshidrata goethita por calentamiento para obtener hematita [21].

Diferentes reportes señalan que a partir de los 200 °C la goethita empieza a transformarse en hematita y que entre 280 y 350 °C, en presencia de oxígeno, es posible esta transformación [15]. En base a esta hipótesis y sumado al hecho de que no se han encontrado hasta el momento afloramientos naturales que presenten ambos óxidos de hierro [17], es posible que el pigmento de la bolita sea producto de la deshidratación parcial de goethita.

Los análisis por GC-FID y GC-MS del extracto lipídico (6,6 mg/g de muestra) de la bolita de pigmento registraron altas proporciones relativas de los ácidos 16:0, 18:0 y 18:1, junto con una proporción menor de 16:1 y 18:2. Dado que la composición en ácidos grasos mayoritarios no se asemeja a los valores registrados para los tejidos grasos de animales regionales [17], no es posible inferir si los ácidos grasos identificados provienen de la incorporación de alguna sustancia lipídica para mezclar con el pigmento o si son resultado de una contaminación tafonómica. Un dato relevante es que, como parte de este trabajo, se han analizado engobes coloreados de fragmentos

ceramicos hallados en el mismo sitio que la bolita de pigmento [17]. Sin embargo, no se encontraron similitudes en la composición mineral ni en la de los ácidos grasos encontrados en el raspado externo del engobe, por lo que se puede inferir que el material procedente de esta bolita no integró la materia prima del engobe analizado.

Pinturas rupestres del sitio arqueológico La Angostura

El análisis de muestras de pinturas rupestres del sitio La Angostura distante a 50 km de la ciudad de Gaiman [6] es un claro ejemplo de la utilidad de la espectroscopia Raman, en combinación con otras técnicas analíticas, para la identificación de componentes pigmentados en muestras arqueológicas. Estas pinturas se encuentran distribuidas, junto con algunos grabados, en un conjunto de aleros y paredones con diversas topografías (cuevas, aleros, paredones, bloques aislados). Se observan diferentes estilos: pinceladas con motivos abstractos sencillos (paralelas, punteados, zigzags, círculos, cruces), salpicaduras y brochazos, y pinceladas gruesas. Aunque no se puede deducir una antigüedad precisa, la información arqueológica disponible sugiere que las manifestaciones rupestres de este sitio podrían haber sido plasmadas en distintas épocas desde principios del Holoceno hasta 1500 años AP. De este contexto se extrajeron y analizaron pequeños fragmentos con pintura roja, verde y negra, además de muestras de

rocas soporte sin pigmento, cercanas a las zonas pigmentadas. En este análisis se descartó el uso de DRX por limitaciones con el tamaño de las muestras.

La observación macro y microscópica de dos de las muestras de pigmentos rojos pintados sobre un panel de superficie rugosa y ondulada (M1 y M2), permitió distinguir dos subcapas de color bien diferenciadas; una superior roja (a) y una inferior blanca (b) (Figura 8). Mediante micro-espectroscopia Raman se identificaron hematita y yeso ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) en todas las subcapas, pero en diferentes proporciones. Se observó el predominio de hematita en las subcapas rojas y, además, en una de las dos muestras, la coexistencia de yeso y anhidrita (CaSO_4) en ambas subcapas. La hematita no pudo ser confirmada por espectroscopia infrarroja, posiblemente por una baja proporción en la muestra, aunque sí el yeso y la anhidrita. Por su parte, los espectros de FRX confirmaron los resultados, mostrando presencia de Fe, Ca y S que son elementos que componen los minerales mayoritarios identificados. El análisis de una muestra de la roca soporte (RS) por micro-espectroscopia Raman permitió identificar cuarzo (SiO_2) y anatasa (Ti_2O), no presentes en el material pigmentado. La roca soporte mostró una banda débil en el espectro Raman, característica de yeso. Esto sugiere que el yeso es un componente menor del soporte rocoso, no obstante, si se considera que esta muestra fue tomada a una distancia relativamente cercana de la muestra pigmentada, su presencia también podría atribuirse a restos de su uso como componente de las pinturas rupestres.



Figura 8 -Estrategia metodológica y resultados de 2 muestras de pintura roja y su roca soporte. Sitio geológico La Angostura. En negrita los elementos mayoritarios detectados por FRX. MOD: materia orgánica degradada.

La identificación de yeso y anhidrita como componentes principales en las subcapas blancas de las muestras rojas permite plantear la hipótesis de que la presencia de sulfato de calcio no es una contaminación del soporte rocoso y que probablemente se haya aplicado como capa de imprimación entre la roca y estas pinturas. Esto habría facilitado la fijación de la pintura roja en la superficie corrugada de ese panel. Por otro lado, la identificación de yeso y anhidrita también en la subcapa roja podría indicar el uso de sulfato de calcio como aditivo en la preparación de la pintura roja. Existen reportes de la identificación de yeso en motivos rupestres rojos y verdes generado por la acumulación en la superficie de las pinturas como producto de la descomposición de las superficies rocosas [8], aunque en este caso no se observó yeso acumulado en la superficie de la pintura. Por su parte, la anhidrita natural, denominada CaSO_4 (II) o P- CaSO_4 , se encuentra con frecuencia junto con el yeso en depósitos de evaporación y predomina en climas secos [22]. El predominio de la anhidrita sobre el yeso en una de las muestras rojas puede originarse en la composición de los depósitos de sulfato de calcio. Además, en la región, caracterizada por su clima árido y seco, existen depósitos naturales de sulfato de calcio [23]. Teniendo en cuenta estas consideraciones y que la deshidratación directa del yeso a anhidrita no se logra fácilmente [22], es muy probable que

este recurso natural fuera utilizado para la preparación y aplicación de las pinturas. El contenido de materia orgánica de las 2 muestras de pinturas rojas ($3 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$) fue menor que el de la respectiva roca soporte ($4 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$ muestra), por lo que su presencia podría deberse a la degradación de algún aglutinante por exposición a condiciones ambientales desfavorables (clima seco, soleado y frío) o a degradación de la microbiota natural y que en cuyo caso se haya usado agua como aglutinante.

El espectro Raman también puede indicarnos el grado de cristalinidad de los minerales, y esto es de mucha utilidad en la exploración de posibles fuentes de aprovisionamiento o el uso de tecnologías para la preparación de pigmentos. Como ejemplo, en otra de las muestras rojas analizadas en este contexto se observaron bandas de hematita muy estrechas lo que sugiere un alto grado de orden cristalino ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$), en contraste con los óxidos de hierro desordenados típicos del ocre [24]. Este hallazgo, junto con el bajo contenido de cuarzo y la ausencia de minerales arcillosos como la caolinita, comúnmente presentes en mezclas de ocre [25], sugiere una fuente mineral para la hematita. Pero este estado cristalino puede deberse también a un tratamiento térmico de óxidos de hierro como la goethita o la limonita, los cuales pueden convertirse en hematita con una estructura ordenada mediante calentamiento a 300°C

[24]. Ambas posibilidades son plausibles: afloramientos naturales de goethita en sitios costeros de Puerto Madryn podrian haber sido utilizados, aunque no se ha encontrado un afloramiento natural de hematita con este nivel de cristalinidad.

La pintura negra analizada por micro-espectroscopia Raman, registró una banda compatible con el estiramiento Mn-O de un óxido de manganeso. El analisis elemental por FRX de la muestra indicó la presencia de Fe como el elemento principal junto con Mn,

K, Ca, Si, Ti y Ni. Pero en este caso, la composición elemental del pigmento fue muy similar a la de la roca soporte, lo que sugiere que la penetración de rayos X a través de la fina capa de pintura negra tambien brindó información sobre la composición del soporte. Realizando una operación de resta entre ambos espectros de FRX [10] se determinó claramente que el pigmento negro estaba compuesto principalmente por manganeso (Mn) (**Figura 9**)

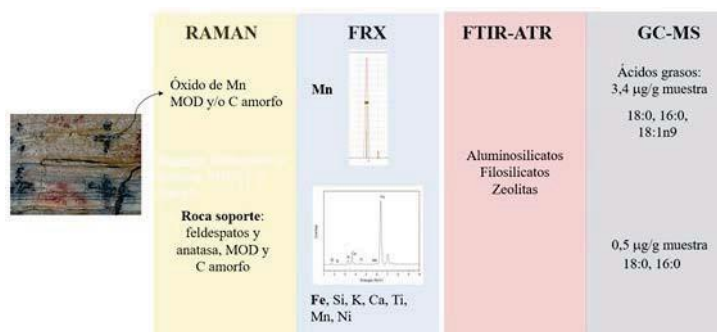


Figura 9 - Estrategia analítica y resultados del análisis de la pintura negra y la roca soporte. En negrita los elementos mayoritarios en los espectros de FRX. MOD: materia orgánica degradada. C: carbono.

El análisis de óxidos de manganeso por espectroscopia Raman es complejo debido a la inestabilidad que presentan estos compuestos cuando son irradiados por el laser y la coexistencia de mezclas de óxidos en la naturaleza [26]. El manganeso existe en varios estados de oxidación (II, III, IV o mixto) y sus óxidos se presentan en diferentes formas mineralógicas, como manganita ($MnOOH$), pirolusita ($P-MnO_2$), bixbita (Mn_2O_3) y hausmanita (Mn_3O_4). Esto confiere cierto grado de incertidumbre en la interpretación de los resultados. Las bandas que se observaron en este espectro podrian indicar la presencia de pirolusita, pero no puede descartarse la presencia de hausmanita o una mezcla de ambas, si se considera además que la hausmanita es la fase estable formada por la reducción de la mayoría de los óxidos de manganeso expuestos al rayo laser en espectroscopia Raman [27]. Es oportuno comentar que todas las muestras

analizadas en este contexto, tanto pigmentadas como de roca soporte, presentaron bandas en el espectro Raman características de materia orgánica degradada y/o carbono amorfo. Esta información descarta la presencia de un pigmento a base de carbono -que ha sido reportado como pigmento negro en varios sitios de arte rupestre- y refuerza el uso de un óxido de manganeso para la pintura negra.

La espectroscopia Raman desempeñó tambien un papel fundamental en la identificación de tierras verdes conformadas por celadonita $K[(Al, Fe^{+3})(Fe^{+2} Mg)](AlSi_3, Si_4)O_{10}(OH)_2$ y glauconita $(K, Na)(Fe^{+3}, Al, Mg)_2(Si, Al)_4O_{10}(OH)_2$ en la muestra obtenida de la pintura verde sobre un soporte de roca lisa y homogénea. Durante este análisis se presentó la dificultad de diferenciar las señales de las tierras verdes de las de enlaces

0-Ti-0 de la anatasa -una de las formas del TiO_2 -. El analisis por Raman de la roca soporte permitió confirmar la presencia de anatasa en la roca. Cuando la capa de pintura es muy fina, se pueden detectar elementos del sustrato rocoso en la pintura. Como sucedió con la muestra negra, en esta muestra, las composiciones elementales por FRX del pigmento y la roca soporte fueron similares, pero el espectro resultante de la operación de sustracción de las señales de elementos

presentes en la pintura y la roca mostró el predominio de Fe y picos para K y Si, de acuerdo con la composición elemental de las tierras verdes (**Figura 10**). Una desventaja de la tecnica de FRX utilizando un equipo portatil es la baja detección de elementos ligeros como Na y Mg [28], presentes en los minerales que conforman las tierras verdes. Por ultimo, el analisis por FTIR-ATR de la muestra de pintura verde confirmó los datos obtenidos por Raman y FRX.

	RAMAN	FRX	FTIR-ATR	GC-MS
	Verde Cuarzo (SiO_2) Glauconita Celadonita Anatasa (TiO_2), MOD y C amorfo	Fe, Si, K, Ca, Ti, Mn	Celadonita aluminosilicatos	Ácidos grasos: 2,3 $\mu g/g$ muestra 18:0, 16:0
	Roca soporte: Cuarzo (SiO_2) feldespatos Anatasa (TiO_2), MOD y/o C amorfo	Fe, Si, K, Ca, Ti, Mn	Cuarzo aluminosilicatos	Ácidos grasos: 1,2 $\mu g/g$ muestra 18:0, 16:0, 18:1n9

Figura 10 - Tecnicas analíticas aplicadas a las muestras de pintura verde y roca soporte y resultados obtenidos. En negrita los elementos mayoritarios en los espectros de FRX. MOD: materia organica degradada. C: carbono.

Como se mencionó arriba, se encontró que todas las muestras de los aleros analizadas mediante micro-espectroscopia Raman presentaban bandas características de materia organica degradada y/o carbono amorfo. Por otro lado, el analisis por espectroscopia infrarroja no mostró señales típicas de lípidos o proteínas que podrían indicar la presencia de aglutinantes como grasa animal, aceites o huevo [29]. El uso de la cromatografía gaseosa acoplada a espectrometría de masas (GCL- MS) resultó una herramienta clave debido a su capacidad para separar e identificar los componentes de la mezcla, incluso en cantidades mínimas. En las muestras verde y negra, se observó un contenido de ácidos grasos significativamente mayor que en sus respectivas rocas soporte, siendo 2 y 7 veces superior respectivamente y mucho más alto que el encontrado en los afloramientos naturales analizados ($< 0,8 \mu g/g$). El perfil cromatográfico de la muestra verde mostró una proporción similar entre los ácidos grasos 16:0 y 18:0 respecto a su roca soporte y no se pudo determinar una fuente específica de origen para estos ácidos.

Por otro lado, en la fracción insaponificable de esta muestra no se detectaron hidrocarburos, alcoholes lineales de cadena larga ni esteroides, compuestos típicos de pinturas rupestres que podrían contribuir a la identificación de su origen. En cuanto a la muestra negra, además de una relación similar entre los ácidos grasos 16:0 y 18:0 con respecto a su roca soporte, se identificó la presencia del ácido 18:1 [6]. El estilo de pintura negra, con líneas trazadas en cruz, sugiere el uso de un aglutinante para facilitar su aplicación. Si bien la presencia de ácidos grasos en las muestras verde y negra en composiciones diferentes a las de sus rocas soporte, respalda la hipótesis del uso de aglutinantes lipídicos en la preparación de la mezcla pigmentaria, se requieren estudios adicionales para determinar si estos ácidos grasos están presentes como glicéridos o ácidos grasos libres. La presencia de triglicéridos permitiría una asignación más precisa de la fuente de ácidos grasos mediante un analisis por cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas y

comparación con referencias. Por otro lado, no se puede descartar el uso de otros aglutinantes orgánicos, como gomas vegetales o materiales proteicos, que requieren metodologías adicionales para su separación y detección a partir de una misma muestra.

La ruta del pigmento hacia el valle inferior del Río Chubut y la Península Valdés

La hipótesis sobre la circulación y el intercambio de pigmentos surge a partir de su hallazgo en contextos arqueológicos, algunos distantes a más de 300 km de posibles fuentes de aprovisionamiento. Ciertos motivos, técnicas y colores de las pinturas rupestres del este del Río Chubut presentan similitudes con el arte rupestre del oeste del valle medio del Río Chubut [30]. Esto podría indicar que el río funcionó como un corredor de circulación de personas, ideas, diseños, métodos y materias primas, entre ellas pigmentos. No obstante, las rutas específicas de circulación de los pigmentos en la Patagonia no han podido ser completamente establecidas.

Nuestro grupo ha investigado 22 muestras de pigmentos rojos, verdes, amarillos y blancos provenientes de afloramientos naturales en tres potenciales rutas de

distribución de obsidias descritas por Stern [5]. Los resultados obtenidos [6, 17] son útiles para identificar posibles fuentes de aprovisionamiento. Por otra parte, los afloramientos y/o sedimentos naturales suelen contener materia orgánica, con lo cual es importante su identificación al momento de determinar el origen de los lípidos en pigmentos arqueológicos para evaluar si son naturales o introducidos por el hombre [31]. Esto permite también descartar problemas de contaminación tafonómica en las muestras arqueológicas, es decir, la identificación de material orgánico proveniente del ciclo de vida natural de algún organismo del ecosistema que no fue introducido de forma intencional en el material a analizar. La caracterización del contenido lipídico de los afloramientos naturales y su comparación con el de los pigmentos hallados en contextos arqueológicos es indispensable para determinar si hubo una incorporación intencional del material en la preparación de los pigmentos arqueológicos. Estos resultados también constituyen un banco de datos de referencia para futuros estudios en la región patagónica. La **Figura 2** muestra los sitios de muestreo de los afloramientos naturales seleccionados mientras que en la **Figura 11** se detalla la estrategia de análisis empleada.

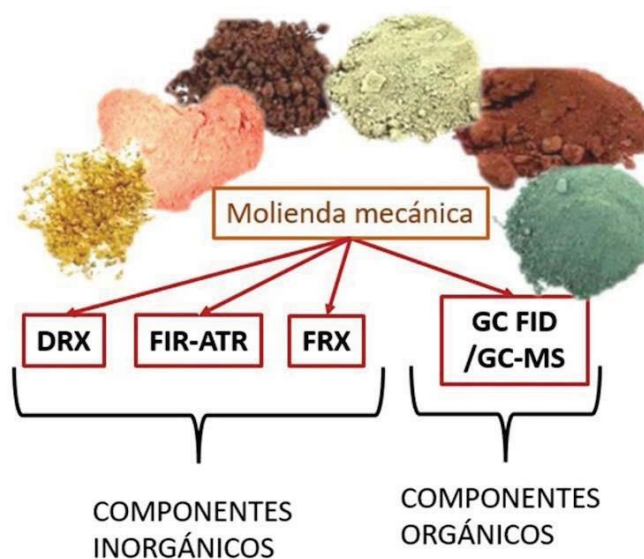


Figura 11 - Metodología empleada para el análisis de los afloramientos naturales pigmentados.

Para este estudio, en donde la cantidad de muestra no es un factor limitante, la DRX es una herramienta eficaz para la identificación de diferentes minerales de una mezcla en un único difractograma. De todas formas, es importante contar con los métodos complementarios para confirmar los resultados obtenidos, por ejemplo, en 3 de los afloramientos rojos analizados, la hematita no fue detectada por DRX, aunque sí por FTIR-ATR. Hay que tener en cuenta que todas las muestras de afloramientos analizadas presentaban cuarzo y si este se encuentra en altas proporciones, suele saturar el difractograma, no permitiendo ver las señales de otros minerales que se encuentren en menor cantidad. Hemos observado también que cuando el cuarzo está en alta proporción en presencia de hematita, algunas bandas del cuarzo solapan a las de hematita en un espectro infrarrojo. Sin embargo, en esos casos, la presencia de hematita fue confirmada por DRX. Por otro lado, en dos de las muestras en las que se registró la presencia de yeso ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) por DRX en muy baja concentración (una única señal en el difractograma), no fue posible observar las bandas correspondientes en el espectro infrarrojo, aunque la presencia de azufre y calcio pudo confirmarse por FRX.

Como resultado general, en todos los pigmentos naturales analizados se determinó por DRX la presencia de cuarzo y aluminosilicatos como acompañantes de los pigmentos. En varias muestras se identificaron feldespatos, tales como albita y sanidina, y arcillas como caolinita. En algunas muestras se identificaron zeolitas, como faujacita, heulandita y estilbita, además de yeso y calcita en otras. Respecto del contenido en lípidos, todas las muestras presentaron menos de 1 mg por gramo de muestra. Este es un dato relevante al momento de discutir la posible incorporación de lípidos como aglutinantes de pigmentos identificados en materiales arqueológicos.

Conclusiones

En este trabajo hemos mostrado el uso de minerales de color rojo, negro y verde como pigmentos, ya sea como vestigios en un molino utilizado para su molienda, así como en la manufactura del arte rupestre de Chubut. También se evidenció la necesidad de combinar distintas técnicas analíticas, como difracción de rayos X, fluorescencia de rayos X y micro-espectroscopia Raman para caracterizar los componentes responsables del color y los minerales accesorios que los acompañan. Una pregunta recurrente refiere a las fuentes de aprovisionamiento de los pigmentos. Un primer acercamiento a esta cuestión es el análisis de afloramientos naturales pigmentados cercanos a los sitios de hallazgo de artefactos arqueológicos y manifestaciones de arte rupestre. Sin embargo, las composiciones de los afloramientos distan, en la mayoría de los casos, de las de los pigmentos, planteando como posibilidades el intercambio de materiales y/o la transformación química y la purificación de los componentes naturales.

En cuanto a la presencia de componentes orgánicos naturales, como lípidos, incorporados como potenciales aglutinantes en la preparación de mezclas pigmentarias, los procesos de degradación por reacciones de oxidación e hidrólisis condicionan su preservación y la posibilidad de su detección. La identificación de componentes lipídicos, si bien en baja cantidad, en afloramientos naturales, soportes rocosos y sedimentos en sitios arqueológicos, demuestran la necesidad de estudios comparativos para evitar conclusiones erradas.

Referencias

- [1] Politis, G. G. y Borrero, L.A. *The Archaeology of the Pampas and Patagonia*. Cambridge University Press, London, 2024.
- [2] M. M. Podesta, R. Paunero, D. Rolandi, *El arte rupestre de Argentina indígena: Patagonia. Grupo Abierto Comunicaciones*, 2005.
- [3] G. Romero Villanueva, M. Sepulveda, J. Carcamo-Vega, A. Cherkinsky, M. E. de

- Porras, R. Barberena, *Sci. Adv.* (2024), 10, eadk4415.
- [4] M. Sepulveda, *Quat. Int.* (2021), 572, 5-23.
- [5] D. Fiore, M. M. Podesta, Introducción. Las tramas conceptuales del arte rupestre. Tramas en la piedra. *Producción y usos del arte rupestre*, 2006, 13-27.
- [6] L. Prates, *Relaciones Soc. Arg. Antropol.* 2009, XXXIV, 201-229.
- [7] J. Gómez Otero, C. T. Bellelli, La Patagonia central: Poblamientos y culturas en el area de Chubut. En: *Patagonia total, Antartida e Islas Malvinas*. Barcel Baires Ediciones, 2006.
- [8] M. S. Goye, A. E. Perez, J. Gómez Otero, *Cuadernos del INAPL* 2024, 11, 1-27.
- [9] C. R. Stern, *Quat. Int.* 2017, 468 A, 190-205.
- [10] C. Gurin, M. Mazzuca, J. Gómez Otero, M. S. Maier, *Archaeol. Anthropol. Sci.* 2021, 13, 1-21.
- [11] L. Dayet, *Minerals* 2021, 11, 210.
- [12] A. Rousaki, E. Vargas, C. Vazquez, V. Aldazabal, S. Bellelli, M. C. Calatayud, A. Hajduk, O. Palacios, L. Moens, P. Vandenabeele, *Trends Anal. Chem.* 2008, 105, 338-351
- [13] E. Tomasini, V. Palamarczuk, M. M. Zalduendo, E. B. Halac, J.M. P. López, M. C. Fuertes C, *J. Archaeol. Sci. Rep.* 2020, 29, 102-123.
- [14] D. L. Argote, G. Torres, G. Hernandez-Padrón, V. Ortega, P. A. López-García, V. M. Castafio, *J. Archaeol. Sci. Rep.* 2020, 32, 102375.
- [15] I. Lantos, C. Chaile, V. P. Careaga, L. de Salazar, M. S. Maier, *Archaeometry* 2024.
- [6] J. W. Eerkens, GC-MS analysis and fatty acid ratios of archaeological potsherds from the Western Great Basin of North America. *Archaeometry* 2005, 47, 83-10.
- [17] H. L. Whelton, S. Hammann, L. J. Cramp, J. Dunne, M. Roffet-Salque, R. P. Evershed, *J. Archaeol. Sci.* 2021, 132, 105397.
- [18] J. Gómez Otero, S. Dahinten, Bioarqueología de la costa centro-septentrional de Patagonia. En: Cruz I, Caracotche S (eds). *Arqueología de la costa patagónica. Perspectivas para la conservación*. UNPA y Secretaria de Cultura de Santa Cruz, 2008, pag. 82-90
- [19] A. Rousaki, C. Bellelli, M. Carballido Calatayud, V. Aldazabal, G. Custo, L. Moens, P. Vandenabeele, C. Vazquez, *J. Raman Spectrosc.* 2015, 46, 1016-1024.
- [20] M E. Malainey, R. Przybylski, B. L. Sherriff, *J. Archaeol. Sci.* 1999, 26, 95- 10.
- [21] M. C. Gurin (2023) *Tesis Doctoral*. Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco.
- [22] M. S. Maier, D. L. A. de Faria, M. T. Boschín, S. D. Parera, M. F. del Castillo Bernal, *Vib. Spectrosc.* 2007, 44,182-186.
- [23] Colombini, M. P y Modugno, F. *Organic Mass Spectrometry in Art and Archaeology*. John Wiley & Sons, Ltd., 2009, 3-36.
- [24] J. Gómez Otero J, B. Belardi, C. A. Sunico, R. Taylor, *Actas de las 3° Jornadas de Arqueología de la Patagonia*. UNCo. 1999, 393-417.
- [25] C. Vazquez, A. Albornoz, A. Hajduk, A. M. Maury, S. Boeykens. 2008. *Patrimonio Rupestre en el Alero El Maqui, Valle Encantado, Patagonia: Caracterización Química Inorganica de Pigmentos*. Patrimonio Cultural: la gestión, el arte, la arqueología y las ciencias exactas, CNEA.
- [26] A. E. Charola, J. Pühringer, M. Steiger, *Environ. Geol.* 2007, 52, 339-352.
- [27] M. R. Gozalvez, C. J. Herrmann, E. O. Zappettini, 2004. *Minerales Industriales de la Republica Argentina*. Instituto de Geología y Recursos Minerales, Argentina.
- [28] D. L. A. de Faria, S. Venancio Silva, M. T. De Oliveira, *J. Raman Spectrosc.* 1997, 28, 873-878.
- [29] D. Bikiaris, S. Daniilia, S. Sotiropoulou, O. Katsimbiri, E. Pavlidou, A. P. Moutsatsou, Y. Chryssoulakis, *Spectrochim. Acta A Mol. Biomol. Spectrosc.* 2000, 56, 3-18.
- [30] F. Ospitali, D. C. Smith, M. J. Lorblanchet, *J. Raman Spectrosc.* 2006, 37, 1063-1071.
- [31] C. Julien, M. Massot, Lattice dynamics of manganese oxides and their Intercalated compounds. In: Julien C, Pereira-Ramos JP. Momchilov A (eds.) *New trends in: intercalation compounds for energy storage* 2002, 235-252.

[32] A. Bezur, L. Lee, M. Loubser, K. Trentelman, *Handheld XRF in cultural heritage*. J. Paul Getty Trust and Yale University, 2020.

[33] L. C. Prinsloo, A. Tournie, P. Colombari, C. Paris, S. T. J. Bassett, *J. Archaeol. Sci.* 2013, 40, 2981-2990.

[34] C. Aschero, C. Perez de Micou, M. Onetto, C. Bellelli, L. Nacuzzi, A. Fisher,

Arqueologia del Chubut. El valle de Piedra Parada. Dirección Provincial de Cultura del Chubut, Rawson, 1983.

[35] D. Fiore, M. S. Maier, S. Parera, L. Orquera, E. Piana, *J. Archaeol. Sci.* 2008, 35, 3047-3056.

PREMIOS NOBEL

PREMIOS NOBEL Y LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL

En 2024, la Academia de Ciencias de Suecia resolvió destacar, como un avance importante, el desarrollo de la Inteligencia Artificial (IA), hecho que se vio reflejado en las distinciones en Ciencias Químicas, Físicas y Médicas.

Oportunamente, en *Industria y Química* se publicó un artículo donde se explican los conceptos teóricos y las nociones intuitivas que conforman a la Inteligencia Artificial, en especial al Aprendizaje de Máquina basado en Redes Neuronales Artificiales indicando las bases de la IA y sus potenciales aplicaciones (1). Además, en el presente número de *I&Q* se puede leer un artículo relacionado con la metodología del aprendizaje automático (*Machine Learning*) aplicado a problemas de química y biología realizado por un grupo de investigación en la Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes. Con anterioridad, en Nro. 374 de *I&Q* publicamos la contribución del Dr. G. Parisi (UNQ) “*Sobre la doble causación en Biología y el origen de la Bioinformática Estructural de proteínas*” mostrando la potencialidad de estas herramientas propias de la biología informática en la resolución de problemas complejos.

En todos los casos, la AQA ha buscado que las contribuciones realizadas en *I&Q* muestren los avances y desarrollos en el

campo de las Ciencias Químicas por su potencial impacto de estos sobre los futuros profesionales y técnicos que actualmente están en proceso de formación.

PREMIOS NOBEL DE QUÍMICA

La Academia Sueca otorgó esta distinción a los norteamericanos David Baker y John Jumper y al británico Demis Hassabis reconociendo la importancia de la predicción y resolución de la estructura de las proteínas sirviéndose de la inteligencia artificial (IA). Entre sus fundamentos, el Jurado destacó que entre “*una infinidad de aplicaciones científicas, los investigadores ahora pueden comprender mejor la resistencia a los antibióticos y crear imágenes de enzimas que pueden descomponer el plástico*”. Baker, fue reconocido por sus avances sobre el “*diseño computacional de proteínas*”, mientras que Hassabis y Jumper por “*la predicción de las estructuras de las proteínas*”, tal como lo refiere el jurado al enunciar el Premio de Química 2024.



Figura 1: Jurado de la Academia el día del anuncio del Premio Nobel de Química 2024.

Heiner Linke, presidente del Comité Nobel de *Química*, expresó que por su función, las proteínas son las moléculas esenciales para la vida, destacando que la

forma de las proteínas es clave ya que determina su función. "Para entender cómo funciona la vida, primero necesitamos entender la forma de las proteínas".

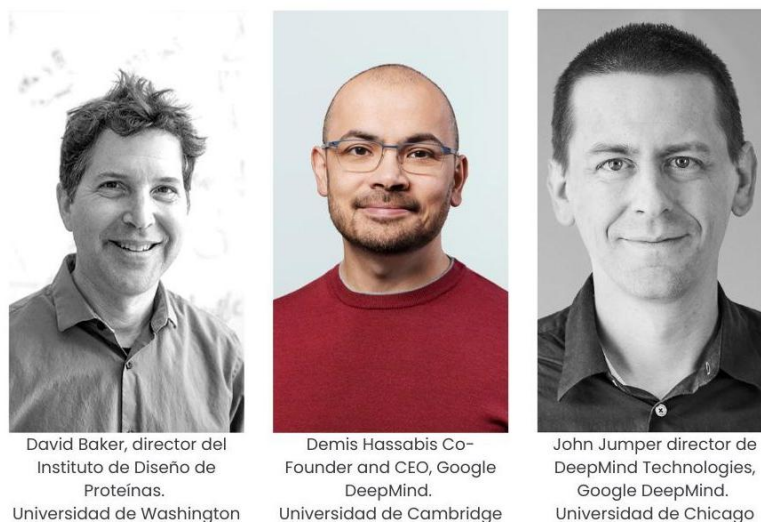


Figura 2: Los galardonados con el Premio Nobel de Química 2024 con motivo de su contribución a la Bioinformática y la Química aplicando las herramientas de la IA.
Fuente: Diseño computacional de proteínas con IA (puntodecorte.net)

David Baker (1962) es un bioquímico y biólogo computacional estadounidense. Es uno de los pioneros en métodos para diseñar proteínas y predecir sus estructuras tridimensionales. Obtuvo su licenciatura en la Universidad de Harvard en 1984. Completó su doctorado en bioquímica en la Universidad de California, Berkeley, en 1989 en el laboratorio de Randy Schekman, donde trabajó en el transporte y tráfico de proteínas en levaduras. En 1993, completó su formación postdoctoral en biofísica con David Agard en la Universidad de California, San Francisco. Es Profesor Adjunto de Ciencias Genómicas, Bioingeniería, Ingeniería Química, Informática y Física en la Universidad de Washington e Investigador del Instituto Médico Howard Hughes. Estos avances se deben a que los nuevos métodos de IA son mucho más poderosos que los tradicionales. Desde 2009, Baker es miembro de la Academia Estadounidense de las Artes y las Ciencias.

En sus estudios, el grupo de Baker desarrolló el *algoritmo Rosetta* o *Rosetta Code*, para la predicción de la estructura de proteínas *ab initio*, que es actualmente una herramienta moderna para el diseño de proteínas. Este código es capaz de realizar un número importante de tareas en distintos

lenguajes. En la literatura se menciona que este algoritmo puede realizar más de 1300 tareas, del orden de 380 borradores de tareas y maneja más de 950 lenguajes de programación. Sobre esta base, desarrolla un proyecto de computación llamado Rosetta@Home. Baker dirigió Rosetta Commons, un consorcio de laboratorios e investigadores que desarrollan software de predicción y diseño de estructuras biomoleculares. (Nota: El nombre Rosetta hace referencia a la famosa estela descubierta en la expedición de Napoleón a Egipto, que, al estar escrito en Jeroglífico, Demótico o lenguaje de los sacerdotes y en griego, sirvió de base, en el siglo XIX, para descifrar el lenguaje de los egipcios antiguos).

Su modelo de IA, AlphaFold, puede predecir la estructura tridimensional de las proteínas en función de sus aminoácidos. Con la ayuda de esta IA, se han logrado predecir la estructura de casi la totalidad de los 200 millones de proteínas.

Baker es un emprendedor muy exitoso, ha cofundado varias empresas de biotecnología, entre ellas *Prospect Genomics*, adquirida en 2001 por una subsidiaria de Eli Lilly hasta que pasó a integrar el grupo de AstraZeneca en 2023.

Por su parte, Demis Hassabis, de 48 años, y John Jumper, 39 años, han contribuido al desarrollo de un modelo de inteligencia artificial para resolver un problema en el campo de la Biología Molecular, al permitir la predicción de las estructuras complejas de las proteínas", según el Jurado de la Academia Sueca.

Demis Hassabis, a temprana edad, inició su carrera en el mundo de la informática, particularmente en el diseño de videojuegos de la empresa Bullfrog Productions. A los 17 años codiseñó y fue líder en el desarrollo del clásico juego *Theme Park*. Este célebre juego de simulación vendió varios millones de copias y ganó el premio Golden Joystick, e inspiró a todo un género de juegos de gestión SIM. Luego de abandonar esta empresa, estudió Ciencias de la Computación en el Queens College, Cambridge, graduándose en 1997. Después de su graduación, Hassabis trabajó como jefe de programación y desarrollo basados en el empleo de la IA y, en 1998, cofundó Elixir Studios un desarrollador de juegos independiente con sede en Londres. En abril de 2005 los derechos de propiedad intelectual y la tecnología fueron vendidos a varios editores y el estudio cerró en 2005. A partir de 2005 continuó sus estudios de posgrado en la Universidad de Londres donde realizó su doctorado en Neurociencia Cognitiva (2009). Estos estudios fueron parte de su interés por sustentar el desarrollo de la IA sobre la base del conocimiento del funcionamiento del cerebro. Continuó su investigación en neurociencia e inteligencia artificial como *Welcome Trust Research Fellow* en la Gatsby Computational Neuroscience Unit (UCL) y como científico visitante en el MIT y en forma conjunta en Harvard.

En 2010 fue cofundador de DeepMind, una empresa emergente (*startup*) de aprendizaje automático con sede en Londres, especializada en la construcción de algoritmos de aprendizaje de propósito general. En enero de 2014, DeepMind fue adquirida por Google en un contrato de aproximadamente \$ 625 millones. Actualmente, Hassabis es vicepresidente de ingeniería líder en proyectos de IA de la ahora Google DeepMind.

Desde 2009 Hassabis es miembro de la Royal Society of Arts (FRSA). Fue galardonado con el prestigioso premio Mullard por la Royal Society en 2014. Fue incluido en la lista de 2013 "Inteligente 50" por Wired, aparece como el tercer londinense más influyente en 2014 por el diario *London Evening Standard*, y fue destacado entre los 50 principales empresarios de Europa de acuerdo con la información del Financial Times (FT).

En 2022 fue galardonado con el Premio Fundación BBVA Fronteras del Conocimiento en la categoría "Biología y Biomedicina". En ese mismo año, fue elegido junto con Geoffrey Hinton, Yann LeCun y Yoshua Bengio para recibir el Premio Princesa de Asturias de Investigación Científica y Técnica.

John Michael Jumper (Arkansas, 1985) es un científico estadounidense y director de *DeepMind Technologies* y con su equipo de investigación desarrolló un modelo de IA para predecir con gran precisión la estructura de proteínas a partir de su secuencia de aminoácidos. A futuro, Jumper tiene previsto publicar 100 millones de estructuras de proteínas. En 2021, *Nature* incluyó a Jumper entre las 10 personalidades más importantes en el campo científico.

Jumper se formó en la Universidad de Chicago, donde obtuvo un Ph.D. en 2017 por una investigación sobre el uso del aprendizaje automático para simular el plegamiento de proteínas y su dinámica. También obtuvo un *Master of Philosophy* en física teórica de la materia condensada, durante su estancia en la Universidad de Cambridge, se licenció en Ciencias en Física y Matemáticas en la Universidad de Vanderbilt.

En 2021, Jumper fue galardonado con el Premio Fundación BBVA Fronteras del Conocimiento en la categoría de "Biología y Biomedicina". En 2022, Jumper recibió el Premio Wiley en Ciencias Biomédicas y en 2023 consiguió el Premio Breakthrough en Ciencias de la Vida por desarrollar AlphaFold, que predice con precisión la estructura de una proteína. En 2023 se le

concedió el Premio Internacional Gairdner de Canadá y el Premio Albert Lasker de Investigación Médica Básica.

Jumper contribuyó al desarrollo de AlphaFold, un algoritmo de aprendizaje profundo desarrollado en DeepMind. Como tal, AlphaFold DB es un programa de inteligencia artificial de acceso libre capaz de predecir la estructura de más de 200 millones en la estructura de las proteínas, acelerando la investigación científica en este campo. Muchos de estos resultados se analizan en el marco de los Critical Assessment of Structure Prediction (CASP).

El término CASP hace referencia a un experimento comunitario para determinar el estado del arte en biología estructural computacional, organizar nuevos avances en este campo y hacer avanzar y proporciona un mecanismo independiente para la evaluación de métodos de modelado de la estructura de proteínas. Sobre la base de la información intercambiada en distintos períodos, se recopilan modelos de proteínas y se procesan y evalúan las decenas de miles de modelos enviados distintos grupos de investigación de distintas partes del mundo. Los evaluadores independientes en cada una de las categorías de predicción aportan información independiente a su evaluación. Las herramientas para ver, comparar y analizar los modelos enviados están disponibles en este sitio web.

En CASP14, AlphaFold fue el método de predicción de la estructura de proteínas mejor clasificado por un amplio margen, produciendo predicciones con alta precisión. Si bien el sistema aún tiene algunas limitaciones, los resultados de CASP sugieren que AlphaFold tiene potencial inmediato para ayudarnos a comprender la estructura de las proteínas y hacer avanzar la investigación biológica.

En noviembre de 2020, AlphaFold fue ganadora del concurso CASP. Esta

competición internacional evalúa algoritmos para determinar cuál de ellos puede predecir mejor la estructura tridimensional de las proteínas. AlphaFold ganó la competición, superando a otros algoritmos y convirtiéndose en el primer algoritmo de aprendizaje automático capaz de predecir con precisión la estructura tridimensional de las proteínas.

Una descripción interesante de los logros basados en el empleo de AlphaFold se puede leer en el trabajo James E. Rothman [1] con motivo del otorgamiento del reconocimiento Lasker Awards.

El premio Albert Lasker Basic Medical Research Award 2023, al reconocer la invención de AlphaFold como un avance revolucionario en la historia de la investigación de proteínas, ya que, por primera vez, la comunidad científica cuenta con la capacidad práctica de predecir con alta precisión la disposición tridimensional de los aminoácidos en la gran mayoría de las proteínas a escala genómica basándose únicamente en la secuencia [2,3].

*“Este logro extraordinario de Demis Hassabis y John Jumper y sus compañeros de trabajo en DeepMind de Google y otros colaboradores se basó en décadas de determinación experimental de la estructura de las proteínas (biología estructural), así como en el desarrollo gradual de múltiples estrategias que incorporan enfoques estadísticos de inspiración biológica. Pero cuando Jumper y Hassabis añadieron a la mezcla una combinación de innovadores métodos de **aprendizaje automático** basados en redes neuronales, los resultados fueron explosivos. Hacer realidad el sueño de hacer medio siglo de predecir la estructura de las proteínas ya ha acelerado el ritmo y la creatividad de muchas áreas de la química, la biología y la medicina”.*

PREMIOS NOBEL DE FÍSICA

La Real Academia Sueca de Ciencias ha decidido otorgar el Premio Nobel de Física 2024 a John J. Hopfield de la Universidad de Princeton, NJ, EE. UU. y Geoffrey Hinton, Universidad de Toronto, Canadá, “por descubrimientos e invenciones

fundamentales que permiten el aprendizaje automático con redes neuronales artificiales” y el entrenamiento de las mismas para su empleo en distintas áreas de la Física.



Figura 3: Hans Ellegren, en el centro de la foto, en carácter de Secretario General, anuncia el Premio Nobel de Física.

Los dos Premios Nobel de Física 2024 han utilizado herramientas de la física para

desarrollar métodos que son la base del poderoso aprendizaje automático actual.

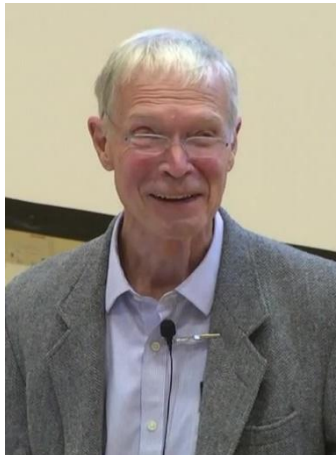


Figura 4: John Hopfield

John Hopfield (**Figura 4**) creó una memoria asociativa que puede almacenar y reconstruir imágenes y otros tipos de patrones en datos. Geoffrey Hinton inventó un método que puede encontrar propiedades

de forma autónoma en los datos y, por lo tanto, realizar tareas como identificar elementos específicos en imágenes.

La idea de inteligencia artificial hace referencia al aprendizaje automático

mediante redes neuronales artificiales. Esta tecnología se inspiró originalmente en la estructura del cerebro (ver Premios Nobel de Química). En una red neuronal artificial, las neuronas del cerebro están representadas por nodos que tienen diferentes valores. Estos nodos se influyen entre sí a través de conexiones que pueden compararse con sinapsis y que pueden hacerse más fuertes o débiles. La red se entrena, por ejemplo, desarrollando conexiones más fuertes entre nodos con valores altos al mismo tiempo. Los galardonados de este año han realizado un importante trabajo con redes neuronales artificiales desde la década de 1980 en adelante.

John Joseph Hopfield (Chicago, EEUU, 1933). Realizó sus estudios superiores en la Universidad de Cornell, alcanzando el doctorado en 1958 en el campo de la mecánica cuántica aplicados al estudio de la constante dieléctrica de cristales. Estuvo vinculado al grupo de teóricos del Laboratorio Bell, trabajando sobre semiconductores y luego en el comportamiento cooperativo de la hemoglobina, acercándolo a la biología molecular. Fue docente en las Universidades de California (Berkeley), de Princeton y en el Instituto Tecnológico de California (Caltech) trabajando en Química y Biología. A partir de 1997 fue Profesor de Biología Molecular, retirándose de la cátedra como Profesor Emérito.

John Hopfield desarrolló una red, que lleva su nombre, utiliza un método para

guardar y recrear patrones. En este modelo, los nodos de la red pueden imaginarse como píxeles. La red de Hopfield utiliza la física que describe las características de un material debido a su espín atómico. La red en su conjunto se describe de una manera equivalente a la energía en el sistema de espín que se encuentra en la física, y se entrena encontrando valores para las conexiones entre los nodos de modo que las imágenes guardadas tengan baja energía. Cuando la red de Hopfield recibe una imagen distorsionada o incompleta, trabaja metódicamente a través de los nodos y actualiza sus valores para que la energía de la red disminuya. De este modo, la red trabaja paso a paso para encontrar la imagen guardada que se parezca más a la imperfecta con la que se la alimentó.

Geoffrey Hinton utilizó el diseño de Hopfield como base para una nueva red que utiliza un método diferente, conocida como la máquina de Boltzmann resultado de sus trabajos en el campo de la física empleando herramientas de la *Física Estadística*. La máquina se entrena alimentándola con ejemplos que es muy probable que surjan cuando se la ejecuta. La máquina de Boltzmann se puede utilizar para clasificar imágenes o crear nuevos ejemplos del tipo de patrón en el que se la entrenó. Hinton se ha basado en este trabajo, ayudando a iniciar el actual desarrollo explosivo del aprendizaje automático.



Figura 5: Geoffrey Hinton

Fuente: <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=153696453>

Geoffrey Hinton (Wimbledon, Inglaterra, 1947) es un científico computacional, científico cognitivo y psicólogo cognitivo británico.

Hinton estudió en el King's College, Cambridge y se graduó en 1970, con un licenciatura en artes en psicología experimental. Continuó sus estudios en la Universidad de Edimburgo, donde le otorgaron un doctorado en inteligencia artificial.

Después de su doctorado, Hinton trabajó en la Universidad de Sussex y, (tras dificultades para encontrar financiación en Gran Bretaña), en la Universidad de California, San Diego y la Universidad Carnegie Mellon (1982-1987). Fue director fundador de la Unidad de Neurociencia Computacional de la Gatsby Charitable Foundation en el University College de Londres. Es profesor en el departamento de informática de la Universidad de Toronto. Ocupa una Cátedra de Investigación de Canadá en Aprendizaje Automático y actualmente es asesor del *Learning in Machines & Programa Brains* del Instituto Canadiense de Investigación Avanzada.

En 2012, Hinton en colaboración con dos de sus estudiantes, Alex Krizhevsky and Ilya Sutskever en la Universidad de Toronto, Canadá, crearon *DNNresearch*, una startup de esa Universidad. En 2013, Google, que financiaba las investigaciones de Hinton, adquirió esta empresa. A partir de ese momento, Hinton se incorporó en un régimen de tiempo parcial a esta empresa con el fin de dividir su tiempo entre la empresa y su trabajo de investigación en la Universidad.

Hinton continuó investigando las maneras de utilizar redes neuronales para aprendizaje de máquina, memoria, percepción y procesamiento de símbolos. En el período de estadía en Carnegie Mellon, junto con David Ackley y Terry Sejnowski fue coinventor de las máquinas de Boltzmann entre otras contribuciones.

Hinton, en 2018, fue galardonado con el Premio Turing junto con Yoshua Bengio y Yann LeCun por su trabajo en el *aprendizaje profundo*.

Hinton, es reconocido como el «padrino» de la inteligencia artificial, aunque en el año 2023, anunció públicamente que decidió renunciar a Google diciendo que quería "hablar libremente sobre los riesgos de la IA"; y agregó que una parte de él ahora se arrepiente del trabajo de su vida (Fuente: <https://academia-lab.com/enciclopedia>).

En resumen, “*el trabajo de los galardonados ya ha sido de gran beneficio. En física, utilizamos redes neuronales artificiales en una amplia gama de áreas, como el desarrollo de nuevos materiales con propiedades específicas*”, expresó Ellen Moons, actuando como Presidente del Comité Nobel de Física: “*Una de las cosas más interesantes de este premio, tiene que ver con la relación entre la física y el aprendizaje automático. Este campo de conocimiento lleva tiempo beneficiándose de las redes neuronales artificiales, y un ejemplo de ello es el descubrimiento en 2012 de la partícula de Higgs, o la búsqueda de exoplanetas*”.

PREMIO NOBEL DE MEDICINA O FISIOLÓGÍA

El Premio Nobel de **Medicina o Fisiología 2024** fue entregado a Victor Ambros y Gary Ruvkun por "*el descubrimiento del microARN, una nueva clase de diminutas moléculas de ARN que desempeñan un papel crucial en la regulación de los genes*".



Figura 6: En la foto superior, el anuncio del Premio Nobel a estos investigadores. La decisión fue anunciada este 7 de octubre por parte del Comité Nobel por el secretario general del Comité del Premio Nobel, Thomas Perlmann, por el descubrimiento del *microARN* y su papel en la regulación postranscripcional de los genes. En la foto inferior, a la derecha abajo, Víctor Ambros (<https://www.rtve.es/noticias>).

Victor Ambros tiene 70 años y realizó sus investigaciones en la Universidad de Harvard (Estados Unidos). Actualmente, es catedrático de Ciencias Naturales en la Facultad de Medicina de la Universidad de Massachusetts.

Gary Ruvkun tiene 72 años, es biólogo y ha avanzado en sus investigaciones trabajando en el Hospital General de Massachusetts y en la Facultad de Medicina

de Harvard, donde también es profesor de Genética,

Tanto Victor Ambros, como Gary Ruvkun, en 1980, coincidieron como becarios postdoctorales en el laboratorio de Robert Horvitz también ganador del Nobel de Medicina en 2002.

En el laboratorio de Horvitz, los jóvenes investigadores estudiaron **un gusano de 1 milímetro de largo**, *Caenorhabditis elegans* (o *C. elegans*), el cual es una

especie de nematodo ampliamente distribuido en la naturaleza. Estos son también descritos como *gusano redondo* o *cilíndrico* debido a la forma de su cuerpo en un corte transversal. En este gusano, los investigadores descubrieron que presentaba numerosos tipos de células especializadas. A partir de esta evidencia, se dieron cuenta de que el diminuto animal podía servir de modelo para investigar cómo se desarrollan y maduran los tejidos en organismos multicelulares. El estudio de este gusano dio origen a 6 Premios Nobel en este campo.

Así, Ambros y Guy Ruvkun comenzaron una investigación que dio sus primeros frutos en 1993, cuando descubrieron un nuevo principio de regulación génica, esto es, el conjunto de procesos que modulan la actividad de los genes. Esta regulación génica estaba mediada por un tipo de ARN previamente desconocido: el *microARN*. Los resultados del estudio fueron publicados hace 31 años en la revista *Cell*. Actualmente, como señaló el Comité Nobel, “*Los microARN están demostrando ser fundamentalmente importantes para el desarrollo y el funcionamiento de los organismos*”. En el sitio oficial del Premio Nobel, se explica que “*un microARN es una nueva clase de pequeñas moléculas de ARN que desempeñan un papel crucial en la regulación de los genes*” y prosigue que ahora “se sabe que el **genoma humano codifica más de mil microARN**”.

El descubrimiento realizado por estos científicos es importante porque al profundizar en los estudios genéticos del ARN es posible entender mejor cómo funciona la regulación de los genes. “Si no funciona correctamente, puede dar lugar a enfermedades graves como el cáncer, la diabetes o la autoinmunidad. Por ello, comprender la regulación de la actividad de los genes ha sido un objetivo importante durante muchas décadas”, concluye el artículo sobre los galardonados con el Premio Nobel de Medicina.

Referencias generales

- [1] James E. Rothman, *Starting at Go: Protein structure prediction succumbs to machine Learning*, *PNAS*, 2023, **120** (39), e2311128120, <https://doi.org/10.1073/pnas.2311128120>
- [2] J. Jumper *et al.*, *Nature* 596, 583–589 (2021).
- [3] K. Tunyasuvunakool *et al.*, *Nature* 596, 590–596 (2021).

HOMENAJES

SEMBLANZA

Juan Carlos Espector Yebra en el recuerdo

El 4 de noviembre de 2021 falleció Juan Carlos Espector Yebra a la edad de 95 años, tras una amplia trayectoria en el campo de la industria química, investigación y desarrollo aplicado a ese sector. Fue un gran colaborador de la Asociación Química Argentina (AQA).

Hijo de madre española y padre ucraniano, nació el 7 de febrero de 1926 en la ciudad de Buenos Aires. Cursó sus estudios en la Escuela Industrial de la Nación Otto Krause egresando en 1944 con el título de Técnico Químico, con medalla de oro al mejor egresado de su promoción. Esta distinción le abrió la oportunidad de obtener su primer trabajo en los laboratorios de La Sulfúrica de la firma Duperial. Con posterioridad, entre 1950 y 1953, realizó estudios en la Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, aunque, como él lo comenta en sus escritos, no alcanzó ningún título. En este período conoció al Dr. Roberto Recorder, en cuyo nombre, posteriormente, propuso en el seno de la AQA, la creación del Premio destinado a los alumnos de nivel secundario egresados como Técnicos Químicos.

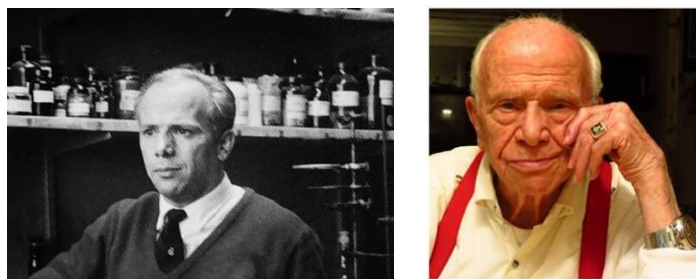


Figura 1: *Izquierda:* Juan C. Espector Yebra estudiante. *Derecha:* Juan C. Espector Yebra empresario y poeta.

Su actividad profesional estuvo centrada al ámbito empresarial, donde se destacó por su carácter emprendedor, volcando su interés en desarrollar estudios, investigaciones y síntesis de sustancias para mejorar la calidad de la producción en su especialidad.

Desde muy joven se caracterizó por realizar numerosas acciones con entusiasmo y optimismo. A los dieciséis años se asoció a la Asociación Química Argentina, cuando esta tenía sus instalaciones en la calle Hipólito Irigoyen.

Participó en la fundación del Centro de Químicos Industriales (CQI) del que fuera su presidente durante varios años y gracias a sus gestiones, logró integrarlo a la Asociación Química Argentina. Esto permitió la incorporación de los técnicos químicos, tanto como socios activos y también como miembros de su Comisión Directiva, actuó como Tesorero de la misma y en el Consejo Asesor de la revista *Industria y Química* de la AQA.

En 1954, como socio N° 15, se incorporó como Socio Plenario a la Asociación Argentina de Químicos y Coloristas Textiles (AAQCT), donde también realizó una importante serie de actividades. Fue Director de la Revista *Galaxia*.

Fue socio de la Sociedad Científica Argentina.

Su vinculación con el sector productivo la inicia no bien completó sus estudios secundarios. Entre 1944-1950 se desempeñó en diversos establecimientos de la Dirección General de Fabricaciones Militares. En 1950-1961 tuvo a su cargo la Dirección Técnica de la empresa *José Franchini Ltda.*, pionera en la producción de agentes tensoactivos, la que, en 1967, fuera adquirida por la empresa internacional Henkel y Cía. Posteriormente, en 1962, junto a su hermano, Héctor Rodolfo Espector, compraron Prosina S.A., cambiando su nombre por el de *Prosintex Química SRL*, dando inicio a la producción de detergentes sintéticos “*Minimax*”, de uso doméstico. Luego dirigió su interés hacia la

producción de sustancias requeridas por el sector industrial. En el año 1995 su hermano vendió su parte a los hijos de Espector Yebra, quienes continúan hasta el presente, con el manejo de Prosintex Química SRL”

Publicó sus trabajos cubriendo distintos aspectos de su actividad profesional y empresarial, participó en conferencias y presentación de comunicaciones en reuniones nacionales e internacionales. Fue conferencista en Congresos Internacionales de Química Textil de la Federación Latino Americana de Química Textil (FLAQT).

Enfaticó la difusión de la química, tanto en libros como en revistas de esta especialidad. También fue autor de poemas publicados distintos libros, como “*Territorio Sur*”, “*Letras Argentinas de Hoy* (2003)”, “*Nueva Literatura Argentina* (2005-2013)”, “*Letters On Paper* (Letras Sobre Papel), *Antología II Bilingüe* (2011-2013)”. Algunos de sus escritos los realizó bajo el seudónimo Omar Gikay, apellido que abreviaba a dos de sus autores preferidos, el escritor Khalil Gibran y de Omar al Khayyam, científico y poeta árabe del siglo XI. Recibió varias distinciones por sus obras de poesía, debiendo mencionar la 1ra Mención que recibiera en el certamen de “*Químicos Poetas*”, organizado por la AQA en 1980, así como el Diploma y Medalla al Mérito (2003 a 2011) por la publicación de sus poemas en diversas antologías.

Publicó el libro “*Destinos. Cuando las paredes se encuentran*” de la Editorial de los Cuatro Vientos. La radiodifusión fue otra de sus ya múltiples actividades.

En el marco del Centenario de la creación de la AQA, colaboró en la organización del libro “*La Química en la Argentina*”, publicado en 2011 y editado por la Dra. Lydia Galagovsky, donde escribiera un resumen de su trayectoria bajo el título: “*Memoria de mi vocación y desempeño como profesional químico. 84 años de vida y 61 años como socio de AQA*”.

Varias de sus contribuciones literarias fueron presentadas en *Nueva Literatura Argentina* y *Letters on papers*, de la Editorial de los cuatro Vientos, y también presentados en las ferias del libro entre 2002 a 2016.

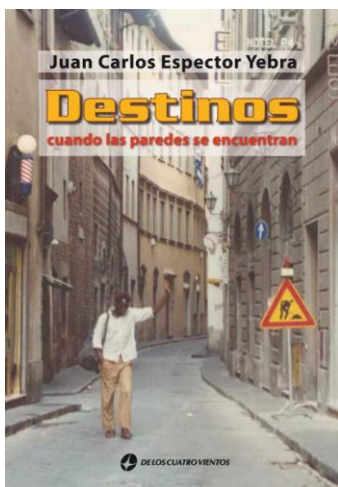


Figura 2: Portada del libro “*Destinos. Cuando las paredes se encuentran*” de la Editorial de los Cuatro Vientos, que publicara Juan C. Espector Yebra en calidad de autor.

Sus actividades de gestión fueron amplias. Integró la comisión de Normas para Auxiliares Textiles, Detergentes, Jabones y grasas, del Instituto Argentino de Racionalización de Materiales. Fue expresidente de la Comisión de Ensayos del Comité Argentino de Detergencia. También integró el Consejo de la Fundación Otto Krause.

Obtuvo la Medalla de Oro AAQCT-1974 al mejor desempeño técnico.

La AQA, en reconocimiento a su destacada labor, en 2015 le otorgó el Premio *Dr. Ladislao Reti* destinado a empresarios de la industria química que se hayan destacado por su empuje y creatividad.



Figura 3: (A) *De izquierda a derecha, abajo:* Dr. Máximo Barón (Director de Biblioteca), Dr. Eduardo A. Castro, Dr. Carlos Azize, Dra. Noemí Walsöe de Reca, Dr. Arturo A. Vitale (Tesorero). *De izquierda a derecha, arriba:* Dra. Irene Dasso (Vicedirectora de Biblioteca), Lic. Raúl F. Laba (Secretario CD), Dra. Lydia Galagovsky, Lic. María Mercedes Rodríguez Goñi, Dra. Rosa Muchnik de Lederkremer, Dr. Alberto Viale (Director de *Industria & Química*), Tco. Qco. Claudio Salvador, Dr. Héctor S. Arux y Tco. Qco. Juan C. Espector Yebra. (B) Se muestra al Tco. Qco. Juan Carlos Espector Yebra al recibir el Premio *Dr. Ladislao Reti 2015* bajo la presidencia del Dr. Eduardo Castro.

Claudio Salvador

HOMENAJES – *IN MEMORIAM*

Prof. Dr. Enrique J. Baran (1940-2024)



Con el fallecimiento del Dr. Enrique J. Baran, la comunidad científica argentina y en particular AQA pierde a una de las personalidades de alto perfil en el campo de la Química y Físicoquímica Inorgánica.

Nació en la ciudad de Olavarría en julio de 1940. Sus padres eran inmigrantes de origen austríaco. Su familia se instaló en Bernal donde vivió hasta hace un par de años. Completó el secundario y se inscribió en la entonces Facultad de Química y Farmacia. Quienes tuvimos la oportunidad de conocerlo como alumnos y luego colegas, recordamos su diario derrotero entre la Facultad y la Estación Central de La Plata para realizar el trayecto ida y vuelta entre Bernal y La Plata. En diciembre de 1964 obtuvo el título de Licenciado en Química (Orientación Físicoquímica y Química Nuclear) en el marco del plan de estudios 1953, siendo el primero de su promoción en completar esta carrera. Su trabajo de tesis doctoral la realizó bajo la dirección del Prof. Dr. Pedro J. Aymonino estuvo orientada a la Química Inorgánica de sólidos, inaugurando una línea de trabajo en la Cátedra de Química Inorgánica. El Prof. Aymonino, cuya formación era el estudio de procesos químicos en fase gaseosa, le dio la libertad necesaria para que el joven becario encarara estos estudios en esta área. Su trabajo versó sobre propiedades espectroscópicas de tetraoxometalatos, estableciendo las bases de una nueva línea de investigación. sentando las bases de los estudios del Dr. Baran en su futura actividad. Defendió su tesis en 1967. Posteriormente el Dr. Baran viajó a Alemania con una Beca de Investigación de la Fundación Alexander von Humboldt.

Realizó estudios posdoctorales en el Instituto de Química Inorgánica de la Universidad de Göttingen, Alemania (1968-70) y en el Instituto de Química de la Universidad de Dortmund, Alemania (1974) bajo la dirección del Prof. Dr. Achim Müller, en ambas oportunidades, como becario de la Fundación Alexander von Humboldt. En 1979, esta Fundación lo invitó a realizar una serie de visitas informativas y a dictar conferencias en diversas Universidades alemanas y en 1988 le otorgó una nueva beca para realizar tareas de investigación, durante tres meses, en la Universidad de Bielefeld y visitar otros Centros de investigación. Asimismo, realizó otras estadias breves de trabajo en Alemania (1982, 1985, 1995, 1999, 2004) y en España (1989, 1991, 1998, 2000, 2004), en el marco de proyectos conjuntos con colegas de esos países y, desde 1990, mantuvo un contacto regular con los docentes e investigadores de la Cátedra de Química Inorgánica de la Universidad de la República, Uruguay, desarrollando proyectos conjuntos de investigación y formación de recursos humanos.

En 1970 ingresó a la Carrera del Investigador Científico del CONICET, donde alcanzó la jerarquía de Investigador Superior en 1993. Su trayectoria le llevó a ser reconocido a nivel nacional e internacional. Así, fue Académico Titular de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales (1996) y de la Academy of Sciences for the Developing World, TWAS (1997).

Fue Investigador Superior del CONICET, Profesor Titular de Química Inorgánica, Profesor Emérito de la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP, y se desempeñó como Director del CEQUINOR entre los años 2001 y 2006. Integró, desde el año 1997, la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales como Académico Titular.

Fue galardonado con el “Premio Rafael Labriola” de la Asociación Química Argentina (1982), el “Premio Hans J. Schumacher” de la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales en Química Inorgánica y Fisicoquímica (1993), el el Diploma al Mérito de la Fundación Konex por labor científica destacada en la década 1983/92 y el Premio Konex de Platino a la figura más relevante en el área de Fisicoquímica y Química Inorgánica (1993), el Premio TWAS-Award in Chemistry-1996 (Premio en Química de la Academia de Ciencias del Tercer Mundo), Trieste, el Premio “Cincuentenario de la Asociación Química Argentina para el Progreso de las Ciencias” (1997) y el “Premio Horacio Damianovich” en Química Inorgánica de la Asociación Química Argentina (2004).

Fue miembro de Comisiones Asesoras Honorarias en el CONICET en distintas ocasiones (1983, 1994-97, 2002 2004), en la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (1998) y en la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires (1978-99). Entre 1984 y 1987 fue Asesor Honorario de la Presidencia con categoría de Director y Presidente de la AH en Ciencias Químicas. Fue consultor de la CONEAU en el Área de Ciencias Básicas (1998-2002). Ha sido miembro de diversas Comisiones Asesoras en el ámbito de la Facultad de Ciencias Exactas y de la U.N.L.P. Se desempeñó como Consejero Académico de esta Facultad (1992-94).

Impulsó el desarrollo de la Química Bioinorgánica incorporando esta temática en los cursos de grado, y autor del primer libro de “*Química Bioinorgánica*” publicado en idioma castellano. Contribuyó a formar numerosos recursos humanos de gran trayectoria a nivel nacional e internacional.

A lo largo de su carrera científica publicó más de 600 artículos. Se destacan la formación de recursos humanos y sus colaboraciones con grupos de distintas universidades de Europa y América del Sur.

Falleció a los 83 años el día 27 de mayo de 2024.

Prof. Dr. Walter E. Triaca (1939-2024)



Nació en la ciudad de La Plata el 25 de mayo de 1939. Completó sus estudios secundarios en el Colegio Nacional “Rafael Hernández” de la UNLP. En 1956 ingresó a la entonces Facultad de Química y Farmacia (actualmente Facultad de Ciencias Exactas) donde se recibió como Licenciado en Química en 1962 y alcanzó el grado de Doctor en Química en 1963 bajo la dirección del Dr. A. J. Arvia defendiendo la tesis “*La electrólisis de nitratos fundidos. Estudio cinético de la reacción*”

anódica”, trabajo que fuera premiado por la Comisión de Cultura de la Provincia de Buenos Aires (1964). Fue Post-Doctoral Fellowship del *John Harrison Laboratory of Chemistry*, en la Universidad de Pennsylvania trabajando sobre celdas de combustible en medios fundidos. En 1965 ingresó a la Carrera del Investigador del CONICET, jubilándose como Investigador Superior.

Su trayectoria académica y científica siempre estuvo unida a la Facultad donde desarrolló actividades docentes en las cátedras de Fisicoquímica I, Fisicoquímica II y desde 1979, los cursos de Procesos Electroquímicos Fundamentales y de Procesos Electroquímicos hasta su jubilación en 2005, año a partir del cual fuera designado Profesor Emérito de la UNLP.

Fue titular de dos patentes de invención en el área de electrodos facetados (1985). Fue reconocido en reiteradas oportunidades por sus investigaciones y desarrollos científicos en el ámbito de la electroquímica. Ha realizado contribuciones reconocidas internacionalmente sobre conversión y almacenamiento de energía, tecnologías del hidrógeno, ciencia y tecnología de materiales y electroquímica, incluyendo actividades de desarrollo y/o transferencia de tecnología en el área de almacenadores de energía avanzados para misiones espaciales.

Se desempeñó como Director Científico de las actividades cooperativas entre INIFTA y la Comisión Nacional de Actividades Espaciales (CONAE) que comprendieron investigaciones sobre el funcionamiento, desempeño y mecanismos de falla de baterías avanzadas de níquel-hidrógeno tipo CPV para su uso en el satélite SAC-C en el marco del Acuerdo Específico CONAE-CIC (Provincia de Buenos Aires). A él y a su grupo de colaboradores se debe la elaboración de un “*Manual de comportamiento en operación de baterías de níquel-hidrógeno para misiones espaciales*”, que incluye normas de control y de seguridad para una operación confiable del sistema de conversión y almacenamiento de energía del satélite SAC-C (2000), así como el procesamiento y análisis de datos telemétricos relacionados con el funcionamiento de las baterías del satélite SAC-C, en el marco de un convenio entre el INIFTA, CONICET y CONAE. Entre los logros alcanzados en esta fase del proyecto se debe destacar la determinación de indicadores de criterio de diagnóstico que permiten evaluar el estado operativo actual del sistema de potencia de la misión espacial. Su contribución, junto a su equipo de trabajo, permitieron el incremento de la vida útil del satélite.

Colaboró intensamente en actividades de asesoramiento en organismos de planeamiento, promoción o ejecución de Ciencia y Tecnología en el país. En efecto, ha sido en numerosas oportunidades Miembro de la Comisión Asesora Honoraria de Ciencias Químicas del CONICET (1991–1998), Miembro de la Comisión Asesora del Programa Nacional Prioritario de Materiales, Secretaría de Estado de Ciencia y Tecnología (SECYT) (1991–1996), Miembro de la Comisión Asesora de Seguimiento y Apoyo a Unidades Funcionales (CASAUF–Química Teórica y Aplicada) del CONICET (1992–1996), Miembro de la Comisión Asesora Honoraria de Ciencias Químicas de la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires (CIC) (1993–1999).

Ha sido miembro de Comisiones Organizadoras de distintos eventos científicos en el campo de la energía, entre los que cabe destacar la *XII World Hydrogen Energy Conference* (1998). Fue Coordinador del Comité Científico de la Reunión “*Hidrógeno y la Energía del Futuro*”, realizada en Buenos Aires entre el 22 y 23 de marzo de 2004, organizada por la Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales y la Academia Nacional de Ingeniería, siendo también coeditor del libro “*Hidrógeno y la Energía del Futuro* (2004).

El Dr. Triaca contribuyó, aún después de su jubilación, a la formación continua de recursos humanos en el campo de su especialidad. Bajo su Dirección se formaron numerosos investigadores argentinos y del exterior, becarios, tesis y profesionales de Argentina, Chile, Brasil y Uruguay.

Fue Vicedirector del INIFTA entre 1988 y 2003 cumpliendo funciones de dirección durante las prolongadas estadías del Dr. Arvia en el exterior, quien estaba trabajando en la técnica de microscopía de efecto túnel para luego incorporarla en ese instituto.

Su actividad científica está claramente documentada en las numerosas publicaciones que ha realizado en el país y en el exterior, particularmente en la introducción de la tecnología a base de hidrógeno. Ha sido autor de tres capítulos de libros y dos libros, uno sobre “*Electrocatalisis*” y el otro, sobre “*Hidrógeno y energía del Futuro*”.

En resumen, el Dr. Triaca *"fue un referente en la utilización de tecnologías basadas en el uso de hidrógeno como fuente de energía alternativa"*.

Falleció 19 de enero de 2004 en la ciudad de La Plata.

Prof. Dra. Noemí Elisabeth Walsøe de Reca (1937-2024)

Nació en Buenos Aires el 7 de febrero de 1937. Estudió Química en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales-FCEN de la Universidad de Buenos Aires (UBA). Finalizada la carrera obtuvo una beca en el Instituto de Ciencias de los Materiales de la CNEA dirigido por el Prof. Jorge Sabato. Allí trabajó en la aplicación de radioisótopos en problemas metalúrgicos. En 1964 alcanzó el grado de Dra. de la Universidad de Buenos Aires, área Química, bajo la dirección de los Dres. César Libanati y Sonia Nasif (CNEA).

Realizó estudios de posgrado en Alemania en el Technische Hochschule der Universität (Beca IAEA-International Atomic Energy Agency-Wien) y posteriormente en el Centre d'Études Nucleaires-Service de Recherche Scientifique Physique et Chimique de Saclay.

En 1966 ingresó al CONICET institución alcanzó la jerarquía de Investigador Superior. Sus actividades las desarrolló en la Unidad de Investigación y Desarrollo Estratégico para la Defensa (UNIDEF, CONICET-Ministerio de Defensa). Fue directora del Departamento de Investigación en Sólidos de CITEDEF y contribuyó a la formación de recursos humanos.

En el Instituto de Investigaciones Científicas y Técnicas para la Defensa (CITEDEF), desde el grupo de Materiales desarrolló en el Programa de Investigaciones en Sólidos (PRINSO) en el CITEFA, el Centro de Investigaciones en Sólidos (CINSO), y luego en la Unidad de Investigación y Desarrollo Estratégico para la Defensa (UNIDEF, CONICET-Ministerio de Defensa). Hasta su retiro en el año 2020, su actividad en todas estas dependencias fue múltiple y la encontró a la cabeza de muchas iniciativas en el campo de la Ciencia de los Materiales y en la Química y Físicoquímica de Sólidos, así como sistemas materiales nanoestructurados. En estas líneas de trabajo, dirigió tesis e investigadores, quienes continuaron avanzando e introduciendo nuevas metodologías en estas temáticas. Varios de sus discípulos continuaron su trabajo en distintas instituciones nacionales y en el exterior.



Discurso con motivo del Premio Mercosur de Ciencia y Tecnología -Categoría Integración- con la que ella y su equipo de colaboradores fueron distinguidos en el año 2005 (Fuente: Archivo fotográfico del Dr. Alberto L. Capparelli).

Fue un destacado miembro de la AQA, Directora de la revista *Anales de la Asociación Química Argentina*, integrando su Comisión Directiva en distintos niveles incluyendo la de haber sido su Vicepresidente.

Falleció el 3 de mayo de 2024.

Prof. Dra. Lucía C. Kordich (1936-2024)



<https://nexciencia.exactas.uba.ar/>

Doctora en Ciencias Químicas, egresada de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FCEN) de la Universidad de Buenos Aires (UBA), quien recibiera el Premio Consagración “Dr. Luis F. Leloir 2018” de esta Asociación en el área de Química Biológica. Fue Socia Honoraria de AQA en reconocimiento por sus investigaciones y formación de recursos humanos.

Ejerció la docencia e investigación en FCEN en el Área de Análisis Biológicos del Departamento de Química Biológica, dirigiendo el Laboratorio de Hemostasia y Trombosis, tema en el que fuera pionera en el país y en América Latina, llegando a ser Profesora Titular Consulta e Investigadora Principal de la Carrera de Investigador Clínico de CONICET. Recibió varios Premios y Distinciones en el país y en el extranjero por sus innovadoras investigaciones.

Inició su labor profesional en el Instituto Municipal de Hematología del Hospital J. M. Ramos Mejía en la sección Hemostasia y Trombosis, y también en el Hospital Privado Güemes. Fue Miembro Fundadora del Grupo Cooperativo Latinoamericano de Hemostasia y Trombosis y del Grupo Cooperativo Argentino de Hemostasia y Trombosis.

Siempre se desempeñó en sus actividades académico-profesionales con dedicación, responsabilidad y exigencia, con calidez en el trato a colaboradores.

Falleció el 30 de julio de 2024.

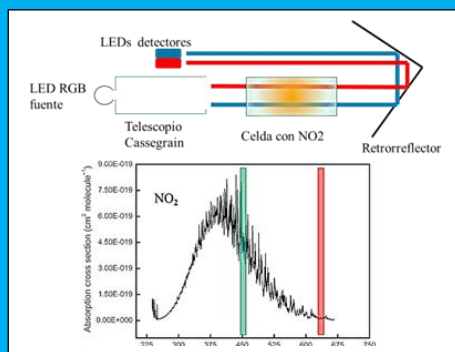
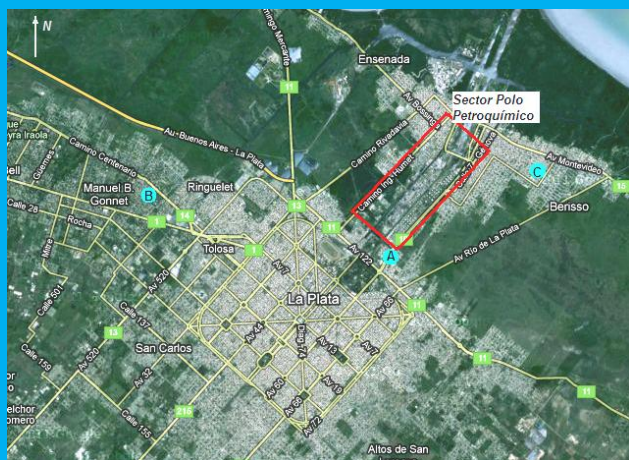
INDUSTRIA & QUÍMICA

ISSN 0368-0819

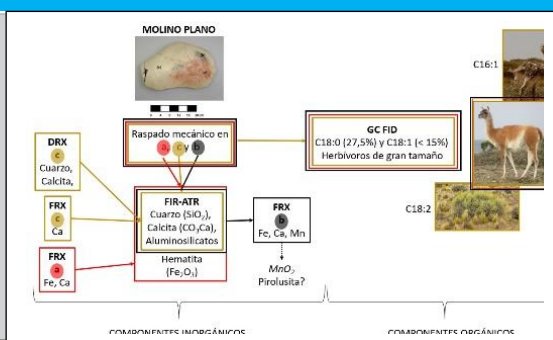
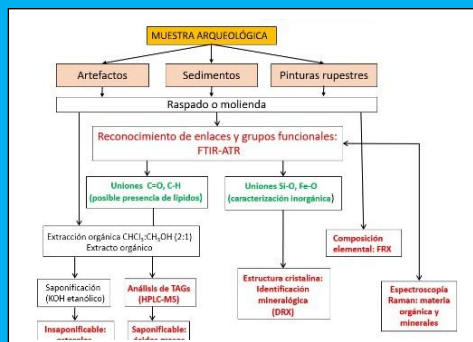
Diciembre 2024 – Nº 375

PUBLICACIÓN DE LA ASOCIACIÓN QUÍMICA ARGENTINA

MONITOREO DE AIRE EN EL ÁREA INDUSTRIAL-AGRÍCOLA DEL GRAN LA PLATA



QUÍMICA Y ARQUEOLOGÍA EN LA PATAGONIA



Av. Santa Fe 1145, 4º Piso – C1059ABF Ciudad Autónoma de Buenos Aires- Argentina

WhatsApp: +54 9 11 5569 9881 – aqa@aqa.org.ar