



Academia de Catálisis A.C.

Boletín de la Academia de Catálisis A.C.

www.acat.org.mx

N°19
Marzo 2023

Contenido

2 Editorial

Notas de Divulgación

3 ¿Cómo mejorar la reproducibilidad de la investigación en catálisis heterogénea?

Aline Villareal

9 Hablemos en serio de la ceria

Daniel González Araiza

Promoción de Posgrados con Líneas de Investigación en Catálisis

12 *Programas de Posgrado que ofrece la Universidad Veracruzana*

El *Boletín ACAT* es una publicación periódica editada por el Consejo Directivo de la Academia de Catálisis, A. C. **Comité Editorial:** Dora Solís Casados, Juan Carlos Fierro González, Alejandra Elvira Espinosa de los Monteros Reyna, Carolina Solís Maldonado, Rafael Huirache Acuña y Javier Rivera De la Rosa. **Encargado de este número:** Rafael Huirache Acuña.

Informes y envío de contribuciones a acat.boletin@gmail.com

Editorial

En este número 19 del Boletín de la Academia de Catálisis (ACAT), A.C. se presentan dos notas de divulgación científica de jóvenes investigadores con un presente destacado y un futuro promisorio en el Campo de la Catálisis. Adicionalmente, se incluye una nota de difusión de programas de posgrado en México que ofertan estudios relacionados con la Catálisis. La primer nota de divulgación tiene como título: ¿Cómo mejorar la reproducibilidad de la investigación en catálisis heterogénea?. En esta nota se describen de manera ágil y clara, las posibles razones que pueden comprometer la reproducibilidad de las investigaciones y se proponen posibles soluciones para evitar extraer conclusiones de los resultados experimentales sin validez estadística. La segunda nota se titula “hablemos en serio de la ceria”, y a manera de juego de palabras el autor va llevando poco a poco al lector en el fascinante mundo de este material con variedad de aplicaciones científicas y tecnológicas. Finalmente, se muestra una nota de “Difusión de programas de Posgrado” en donde se muestra información relevante de los Posgrados que ofrece la Universidad Veracruzana, ubicada en el estado de Veracruz la cual cuenta con cinco sedes regionales: Xalapa, Veracruz, Orizaba-Córdoba, Poza Rica-Tuxpan y Coatzacoalcos-Minatitlán. Se incluye información relacionada con sus líneas de investigación, datos de contacto y la página donde se puede encontrar información académica y administrativa útil para aspirantes.

Es muy gratificante para nosotros mostrarles el Boletín No. 19, seguimos abiertos a sus recomendaciones, comentarios y sugerencias para continuar fortaleciendo esta publicación.

Rafael Huirache Acuña

Notas de Divulgación

¿Cómo mejorar la reproducibilidad de la investigación en catálisis heterogénea?

Aline Villarreal

Departamento de Físicoquímica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México,
Cd. Universitaria, México DF 04510, México.

aline.vime@gmail.com

Hasta ahora, la ciencia es la mejor manera que tenemos los seres humanos para encontrar los principios fundamentales y comunes a los que se adhiere el mundo físico, nos ha permitido alcanzar hitos enormes como especie, garantizar la alimentación de una gran población, incrementar el tiempo de vida, transformar el medio ambiente el que vivimos, etc. Una definición de ciencia la da Tamayo [1]:

“la ciencia es el conjunto de conocimientos racionales, ciertos y probables, obtenidos metódicamente, sistematizados y verificables, que hacen referencia a objetos de una misma naturaleza”

Uno de los pilares de la investigación científica es la reproducibilidad. Por sí mismo, el conocimiento tiene un cierto nivel de incertidumbre, por lo que hallazgos repetidos de resultados comparables son los que confirman la certeza de una conclusión científica. De la misma forma, el fallo sistemático en la repetición de los experimentos que llevaron a esa conclusión la ponen en duda.

En años recientes, la comunidad científica en general ha identificado que en varias ramas de la ciencia la reproducibilidad ha sido comprometida por varias razones [2]. Si entendemos que, para que un descubrimiento científico sea reproducible los experimentos (o cálculos en su caso) deben ser replicables, entonces nos encontramos con importantes limitaciones, entre las más importantes, el dinero y el tiempo que se puede tomar el replicar un experimento, o la falta de información sobre cómo y con qué materiales se llevó a cabo (Figura 1).

Conceptos clave

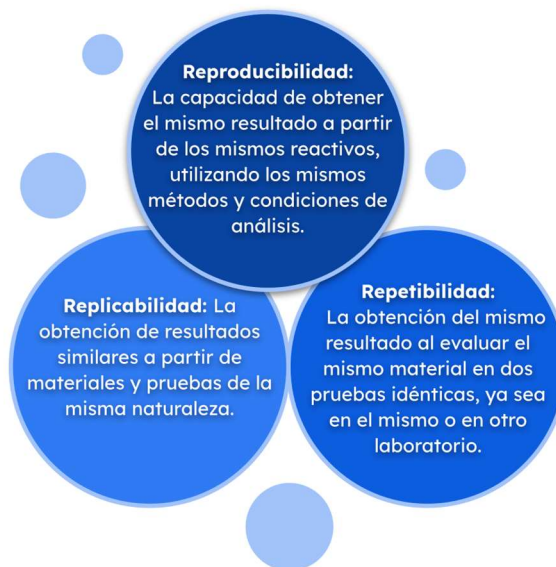


Figura 1. Conceptos clave

En el área de catálisis heterogénea experimental se han identificado dos grandes retos en cuanto a reproducibilidad [3]: a) durante la síntesis de los materiales y b) durante la evaluación catalítica (Figura 2).

Retos principales para la reproducibilidad en las investigaciones

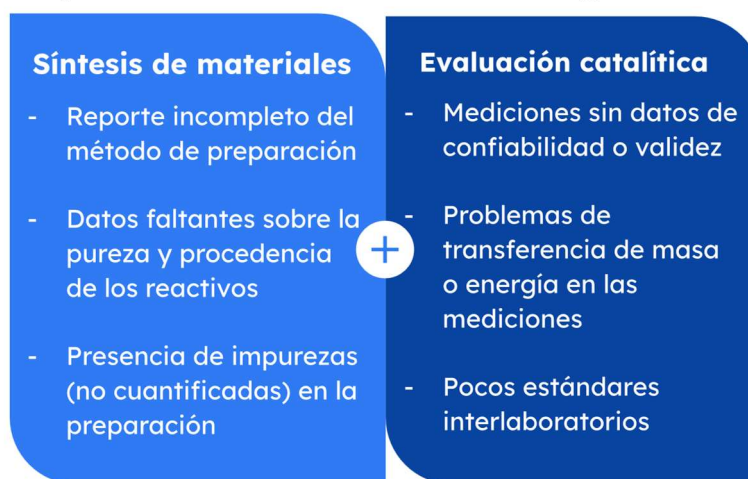


Figura 2. Resumen de los retos principales para la reproducibilidad en las investigaciones

El inicio de la mayor parte de los artículos en el área de catálisis heterogénea es la síntesis de materiales que exhiben propiedades catalíticas superiores, mismas que son posteriormente caracterizadas por diversas técnicas, y contrastadas con los resultados de actividad catalítica para obtener alguna relación entre la estructura y composición con su actividad.

En este sentido aparecen dos grandes problemas que pueden llevar a la falta de reproducibilidad de los materiales sintetizados: a) el reporte incompleto del procedimiento de preparación, incluyendo la pureza y procedencia de los reactivos, b) la presencia de especies en cantidades ínfimas, defectos y sitios no coordinados en la superficie que pueden ser responsables de la actividad catalítica observada [4]. En cuanto al primer problema, se citarán dos ejemplos que ilustran el problema.

El uso de barras magnéticas cubiertas de PTFE (tereftalato de polietileno) es rutinario en la síntesis de materiales en laboratorios químicos. Las ventajas de la protección de PTFE permiten usar las barras una gran cantidad de veces a través de distintos procedimientos químicos, simplemente lavándolas. Anakinov y colaboradores [5] encontraron que la superficie de las barras magnéticas es susceptible a la aparición de defectos microscópicos en los cuales se pueden incrustar impurezas provenientes de las síntesis anteriores. De manera general, encontraron que una variedad de metales como Pd, Pt, Au, Fe, Co, etc., se almacenan en los micro defectos de las barras y pueden ser lixiviados hacía la mezcla de reacción, o bien, formar sitios con alta actividad catalítica que alteran los resultados de manera sustantiva.

En cuanto a la falta de reproducibilidad de las síntesis reportadas, cabe resaltar el caso de la síntesis de MOFs (Metal Organic Frameworks). La investigación en este tipo de materiales con porosidad elevada es de los más activos en la actualidad, con decenas de miles de artículos publicados. Cabe esperar que en tan vasta literatura los procedimientos para la obtención de estos materiales hayan sido probados exhaustivamente. En el *Reporte Anual de Ingeniería Química y Biomolecular* [3] los autores examinaron 16 MOFs, incluidas en la Cambridge Structural Database (CSD). En los materiales escogidos, más de un cuarto de ellos (5/16) no habían sido sinterizados nuevamente, y más de la mitad (9/16) solo habían sido sintetizados por el mismo grupo de autores que reportaron la síntesis inicial. Solo tres materiales habían sido replicados (es decir, sintetizados en las mismas condiciones exactamente) más de dos veces y solo uno de estos materiales fue replicado por un grupo distinto al que originalmente reportó la estructura.

A pesar de estos interesantes resultados, los reportes de la síntesis de estructuras modificadas exceden por mucho a la síntesis de las réplicas. Cabe resaltar que puede ser que en cada uno de los artículos en los que se sintetizaron los materiales modificados se haya sintetizado el material original, pero los autores decidieron no reportarlo. Lo anterior muestra que la comunidad científica en general tiene mayor interés por la novedad que por la reproducibilidad de los resultados.

Otra característica importante de los catalizadores heterogéneos es que son dependientes de los tratamientos que se dan durante la activación y que pueden modificar la estructura superficial de las especies. Por este motivo, para asegurar en lo posible la replicabilidad, se sugiere ser exhaustivo en el reporte de los flujos, composiciones y demás características de los tratamientos térmicos por los que pasa el catalizador antes de iniciar la reacción [6].

La otra piedra fundamental en la que se soportan los estudios de catálisis heterogénea son las mediciones de actividad catalítica. Nuestras mediciones de actividad son función de las condiciones de reacción: temperatura, presión, composición, flujos, etc. A menudo, se reportan conversiones, energías de activación, sin indicar si las diferencias observadas son estadísticamente confiables [7].

Asimismo, la actividad catalítica puede verse fuertemente afectada por problemas de transferencia de masa y energía (Figura 3), lo que hace difícil reproducir las mediciones sin contar con información sobre las dimensiones de las partículas catalíticas.

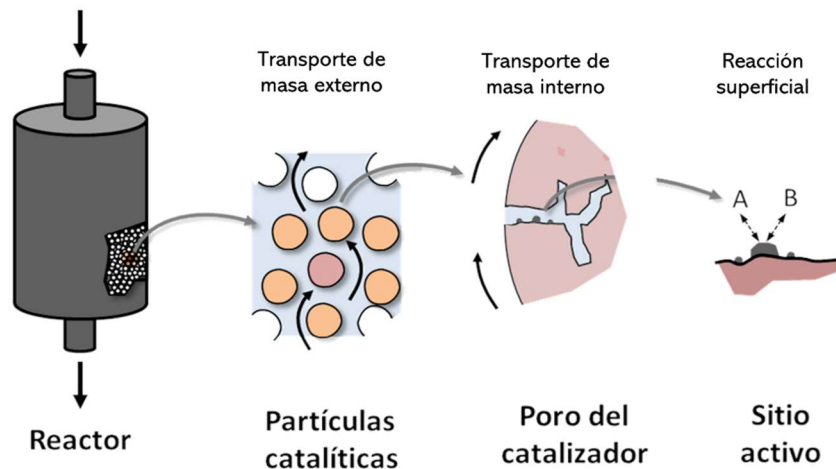


Figura 3. Diferentes escalas en un reactor catalítico (sólido-gas o sólido-líquido) y fenómenos de transferencia de masa asociados, adaptado de [9].

Ya que los experimentos que se realizan para asegurar la ausencia de problemas de transferencia de masa y energía se realizan de forma rutinaria y, por lo general, no se reportan en los artículos, es probable que los investigadores debutantes no consideren estas simples pruebas dentro de su planeación de experimentos. Además, como comunidad se debe hacer énfasis para lograr que aún los más novatos sepan que pasos seguir para asegurar la calidad de sus mediciones. Algunos excelentes consejos se pueden encontrar en [8, 9].

Si bien hasta el momento no existe una guía para asegurar la reproducibilidad dentro de la comunidad catalítica, ya se han llevado a cabo algunos pasos para mejorar y garantizar la reproducibilidad de experimentos en catálisis heterogénea. Por ejemplo, el uso de materiales estandarizados como punto de referencia para conocer si los sistemas que utilizamos para determinar la actividad catalítica están “calibrados”, comenzó en 1980 en algunos laboratorios europeos con los catalizadores EuroPt-1 (5 wt % Pt/SiO₂, Jonhson Matthey) y el EuroNi-1 (5 wt % Ni/SiO₂, EUROCAT). Posteriormente, en 2002, el World Gold Council comisionó la preparación de materiales de Au soportados en TiO₂, Fe₂O₃ y C [10] que permiten a los investigadores comparar el desempeño de sus catalizadores con los estándares.

A manera de pensamiento final, aumentar la reproducibilidad en el campo de la catálisis heterogénea requiere que los editores de las revistas del área y los comités científicos de los congresos tomen la delantera y exijan a los investigadores reportes minuciosos de las condiciones experimentales que los llevaron a obtener los resultados que se presentan en los artículos, en lo posible de manera estandarizada y tabular para facilitar el minado de datos y la construcción de bases de datos, así como incentivar el reporte de la síntesis y evaluación de materiales estandarizados o que están siendo replicados. Más aún, este esfuerzo debe pasar por las agencias encargadas de proveer financiamiento quienes deberían impulsar proyectos interlaboratorios que permitan que los investigadores puedan replicar y repetir experimentos con la finalidad de construir y reportar conclusiones robustas que permitan que la ciencia avance a pasos firmes.

Como investigadores podemos hacer que nuestras investigaciones sean más reproducibles proveyendo la información exhaustiva acerca de los pasos y reactivos que se usaron para hacer la síntesis de los materiales reportados, incluyendo en la medida de lo posible información multimedia (fotos, videos, etc.). En cuanto a las medidas de actividad es conveniente incluir barras de error que muestren la variabilidad de nuestras mediciones y eviten extraer conclusiones sin validez estadística. Por último, una práctica recomendada, es sintetizar suficiente material e invitar a otros laboratorios a que lo evalúen, esto puede evitar situaciones en donde detalles que parecen superfluos tienen un gran efecto en el resultado final y refuerza la validez de nuestras conclusiones.

Referencias

- [1] Tamayo M. El proceso de la investigación científica. México: Limusa, 2006.
- [2] National Academies of Sciences, Engineering, and Medicine 2019. Reproducibility and Replicability in Science. Washington, DC: The National Academies Press. doi: 10.17226/25303

- [3] Han R, Walton K S, Sholl D S., Does Chemical Engineering Research Have a Reproducibility Problem? *Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering*. 2019; 16: 12.1-12.15. **doi:**10.1146/annurev-chembioeng-060718-030323
- [4] Scott S L, Gunnoe T B, Fornasiero P, Crudden C M, To Err is human; to reproduce takes time. *ACS Catalysis*. 2022; 12 (6) 3644-3650 **doi:** 10.1021/acscatal.2c00967
- [5] Pentsak E O, Eremin D B, Gordeev E G, Anakinov V P. Phantom Reactivity in Organic and Catalytic Reactions as a Consequence of Microscale Destruction and Contamination-Trapping Effects of Magnetic Stir Bars. *ACS Catalysis*. 2019; 9 (4) 3070-3081 **doi:** 10.1021/acscatal.9b00294
- [6] Ferdi S, Ward M, Buriak J M, Common Pitfalls of Catalysis Manuscripts Submitted to Chemistry of Materials. *Chemistry of Materials*, 2018; 30 (11) 3599–3600 **doi:** 10.1021/acs.chemmater.8b01831
- [7] Sholl D S, Five Easy Ways to Make Your Research More Reproducible. *Langmuir*, 2019; 35 (41) 13257–13258 **doi:** 10.1021/acs.langmuir.9b02963
- [8] Hickman D A, Degenstein J C, Ribeiro F. Fundamental principles of laboratory fixed bed reactor design. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 2016; 13:1–9 **doi:** 10.1016/j.coche.2016.07.002
- [9] Villarreal A, Cuevas-García R. Obtención y análisis de expresiones de cinética química. I. Obtención de datos cinéticos y criterios para evitar los problemas de transferencia de masa y energía utilizando catalizadores heterogéneos. *Mundo nano. Revista interdisciplinaria en nanociencias y nanotecnología*, 2021; 14 (26) 1-23 **doi:** 10.22201/ceiich.24485691e.2021.26.69638
- [10] Bligaard T, Bullock R M, Campbell C T, Chen J G, Gates B C, Gorte R J, Jones C W, Jones W D, Kitchin J R, Scott S L. Toward Benchmarking in Catalysis Science: Best Practices, Challenges, and Opportunities. *ACS Catal*. 2016, 6 (4), 2590–2602. **doi:** 10.1021/acscatal.6b00183.

Hablemos en serio de la ceria

Daniel González Araiza

Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, Universidad Nacional Autónoma de México,

Ciudad de México, C.P. 04510, México

daniel.araiza@icat.unam.mx

Al leer el título de este artículo el lector quizás pensará que el dióxido de cerio (CeO_2), también nombrado “ceria”, ha sido menospreciado. Y aunque esto es más bien una provocación, un juego de palabras, el papel que este óxido juega en diferentes áreas tecnológicas es muy importante y sin embargo poco conocido por la mayoría de la población.

El origen de este compuesto encierra cierto misticismo, ya que el cerio (Ce) pertenece al grupo de elementos denominados “tierras raras”. Aunque al momento de su descubrimiento, siglo 18, este calificativo estaba ligado a su (poca) abundancia, en la actualidad sabemos que este conjunto de 14 elementos está muy presente en la corteza terrestre. De hecho, la abundancia del cerio se sitúa en el número 28, mayor incluso a la del cobre. Entonces, ¿de dónde viene su rareza? Estos elementos se extraen de minerales que contienen además gran cantidad otros átomos (silicio, aluminio, etc.), lo cual hace que la concentración de las tierras raras sea escasa o “rara”. Sin embargo, con el avance tecnológico, extraer las tierras raras de minerales como la bastnasita o la monacita se ha hecho más eficiente y países como China y Estados Unidos cuentan con una cantidad importante de reservas. En otro sentido, el adjetivo proviene de su estructura atómica. En las tierras raras se utiliza un tipo de “espacios” diferentes para alojar a algunos de sus electrones (orbitales atómicos tipo “f”). Gran parte de las propiedades del cerio emanan a partir de esta característica o rareza en su estructura.¹

Hablemos entonces en serio de la ceria. Este polvo de tono amarillo tenue tiene, como habilidad especial, cambiar fácilmente los estados de oxidación del cerio ($\text{Ce}^{4+}/\text{Ce}^{3+}$), es decir, modificar cuántos electrones utiliza para formar enlaces, conservando su integridad estructural. Como consecuencia, la ceria funciona como un reservorio de oxígeno, aceptándolo y liberándolo según la atmosfera. A escala industrial, la ceria se produce al calentar o poner en contacto con ácido clorhídrico a minerales como la bastnasita, aunque en la actualidad existen métodos más sofisticados de preparación. Además, el precio del cerio (y del CeO_2) es menor al de otras tierras raras, lo cual lo convierte en un material aún más atractivo para su uso en diferentes campos.

El empleo de la ceria se ha extendido mayormente en el campo de la catálisis heterogénea, en donde funge como componente de sistemas catalíticos sólidos, los cuales incrementan la rapidez de la reacción. Sin duda, la aplicación más reconocida y tangible por la población es su uso en los convertidores catalíticos de los automóviles, Figura 1. En combinación con metales preciosos (platino, rodio y paladio), la ceria ayuda a reducir las emisiones de gases tóxicos. Además, catalizadores que contienen ceria son empleados en procesos de abatimiento de contaminantes (dióxido de carbono y metano) y generación de energías limpias (hidrógeno).

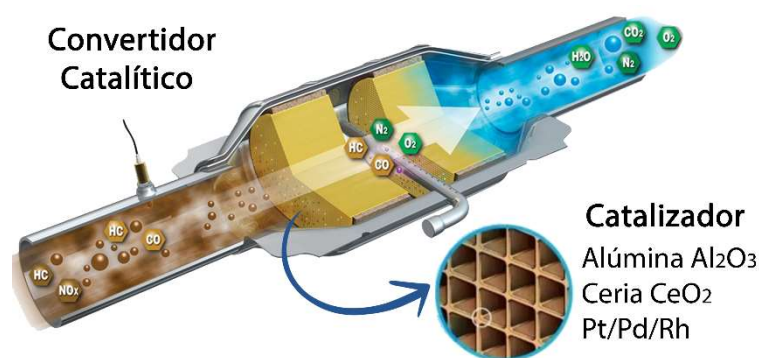


Figura 1. Esquema representativo de un convertidor catalítico.

Sin embargo, los alcances de este óxido no están limitados a aplicaciones catalíticas. La ceria es un compuesto eficaz para el pulimento de diferentes superficies (lentes oftalmológicos, instrumentos ópticos de precisión, etc.). Se usa como aditivo en la fabricación de vidrios, ayudando a prevenir su deterioro y coloración a consecuencia de la exposición al sol (radiación ultravioleta). Además, es un ingrediente en los protectores solares. Mas aún, se emplea en la industria de las pinturas y recubrimientos debido a sus propiedades anticorrosivas.²

La materia a la nano-escala, es decir, partículas extremadamente pequeñas con dimensiones menores a 100 nm (un cabello humano tiene un grosor de 10 mil nanómetros) exhibe propiedades interesantes que no se observan a nivel macroscópico; sin embargo, ciertas conexiones entre ambos mundos se pueden establecer. Por ejemplo, nanopartículas de ceria con diferentes tamaños y formas a la nano-escala, interactúan diferente con la luz, modificando el color del polvo que percibimos con nuestros ojos, Figura 2.³

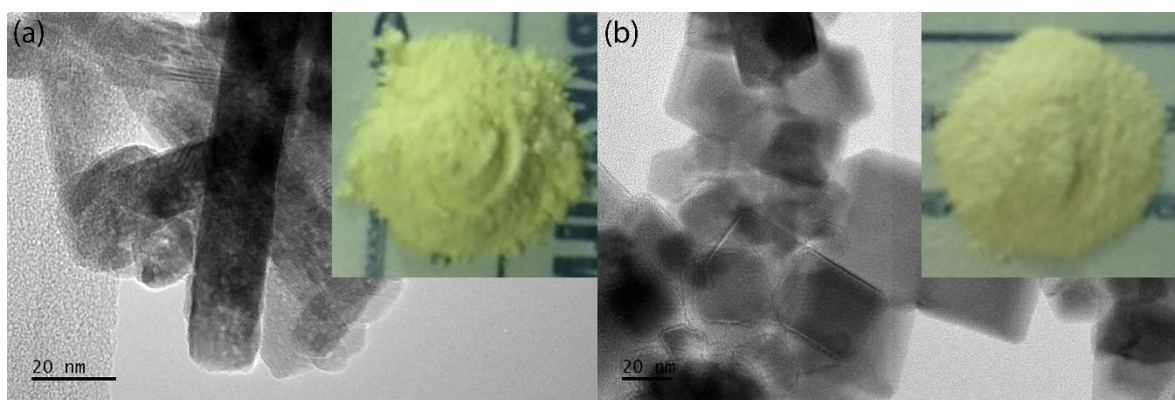


Figura 2. Imágenes por microscopía electrónica de trasmisión de nanopartículas de ceria en forma de (a) barras y (b) cubos. Como inserto en cada imagen se observa la coloración del CeO_2 en forma de polvo, amarillo vivo para nano-barras y amarillo pálido para nano-cubos.

Bajo esta premisa, nanopartículas de ceria se han utilizado para el desarrollo de sensores para la detección de sustancias químicas y biológicas. Mas recientemente y debido a su baja toxicidad, el uso de nanopartículas a base de ceria se ha incrementado en campos menos tradicionales como la industria farmacéutica. Por ejemplo, en tratamientos contra el cáncer, ayudando a controlar el crecimiento y la proliferación de tumores.

Después de tomarnos tan en serio a la ceria, esperemos que el conocimiento de este compuesto se generalice y no hablo solo por este artículo, sino por la demanda tan creciente que ha tenido y tendrá en los próximos años en su variado repertorio de aplicaciones.

Referencias

1. Scirè, S. & Palmisano, L. Cerium and cerium oxide: A brief introduction. in *Cerium Oxide (CeO_2): Synthesis, Properties and Applications* 1–12 (Elsevier, 2020). doi:10.1016/B978-0-12-815661-2.00001-3.
2. Montini, T., Melchionna, M., Monai, M. & Fornasiero, P. Fundamentals and Catalytic Applications of CeO_2 -Based Materials. *Chem Rev* **116**, 5987–6041 (2016).
3. Araiza, D. G., Gómez-Cortés, A. & Díaz, G. Partial oxidation of methanol over copper supported on nanoshaped ceria for hydrogen production. *Catal Today* **282**, 185–194 (2017).

Promoción de Posgrados con Líneas de Investigación en Catálisis

Posgrados de la Universidad Veracruzana que realizan investigación en temas de catálisis

Carolina Solís Maldonado

La Universidad Veracruzana, ubicada en el estado de Veracruz cuenta con cinco sedes regionales: Xalapa, Veracruz, Orizaba-Córdoba, Poza Rica-Tuxpan y Coatzacoalcos-Minatitlán, con presencia en 27 municipios. Es líder en ofertas de posgrado en la región sur sureste de nuestro país. Los programas educativos de maestría y doctorado pertenecen a los Programas Nacionales de Posgrado de Calidad (PNPC).



A continuación se presentan los posgrados que de acuerdo con sus líneas de investigación liderean proyectos con temas relacionados con la catálisis. Así mismo, se presentan los datos de contacto y la página web donde se puede encontrar información académica y administrativa útil para aspirantes.

REGIÓN	POSGRADOS	CONTACTO	LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN
POZA RICA - TUXPAN	Maestría en Ciencias de la Ingeniería	Dra. Celia María Calderón Ramón ccalderon@uv.mx https://www.uv.mx/pozarica/mci/	II. Ingeniería sustentable y energías renovables
	Maestría en Ciencias del Ambiente	Dr. Francisco Limón Salvador flimon@uv.mx https://www.uv.mx/pozarica/mca/	I. Contaminación Ambiental (prevención y control)
COATZACOALCOS - MINATITLÁN	Doctorado en Ingeniería química	Dr. Benoit Auguste Roger Fouconnier broger@uv.mx https://www.uv.mx/coatza/diq/	I. Ingeniería de los procesos químicos y biológicos II. Innovación tecnológica y desarrollo sustentable.
	Maestría en Ciencias en Tecnología Energética	Dr. Gerardo Alcalá Perea galcala@uv.mx / dpena@uv.mx https://www.uv.mx/coatza/macte/	II. Físicoquímica de procesos sustentables
	Maestría en Ingeniería de Procesos	Dr. Hugo Pérez Pastenes huperez@uv.mx / mipprocesos@uv.mx https://www.uv.mx/coatza/mip/ https://www.facebook.com/coatzacoalcos.uvmip	I. Ingeniería de los Procesos Químicos
VERACRUZ	Doctorado en Materiales y nanociencia	Dr. Leandro García González y Dra. Teresa Hernández Quiroz leagarcia@uv.mx y terhernandez@uv.mx https://www.uv.mx/veracruz/dmp/	I. Materiales nanoestructurados II. Estudio de micro y nanomateriales y sus aplicaciones
	Maestría en Ciencias en Micro y Nanosistemas	Dra. Adriana Báez Rodríguez adbaz@uv.mx https://www.uv.mx/veracruz/mmirona/aspirantes-al-posgrado/procedimiento-de-seleccion/	I. Nanomateriales y Nanotecnología II. Micro y Nanosistemas
	Maestría en Ingeniería Aplicada	Dr. Agustín Leobardo Herrera May leherrera@uv.mx https://www.uv.mx/veracruz/miaplicada/	I. Ingeniería de procesos, termofluidos y energía III. Micro y nanotecnologías.
XALAPA	Doctorado en Ingeniería	Dr. Ervin Jesús Álvarez Sánchez eralvarez@uv.mx	I. Ingeniería transdisciplinar