

SEMBLANZAS DE LOS PREMIOS NOBEL 2007

PREMIO NOBEL DE QUÍMICA

LAS REACCIONES QUÍMICAS SOBRE LAS SUPERFICIES DE LOS SÓLIDOS VISTAS EN ESCALA ATÓMICO-MOLECULAR

Las remarcables contribuciones científicas y los desarrollos técnicos que el profesor GERHARD ERTL ha aportado en el campo de la químico-física experimental, en este caso aplicada al conocimiento de los procesos elementales que ocurren en las interfases formadas entre superficies sólidas y moléculas reactivas, le han valido a este investigador alemán el Premio Nobel de Química 2007, en solitario [1]. Sorprende un poco precisamente este matiz de “en solitario”, ya que otros investigadores han realizado durante las últimas décadas aportaciones significativas en este campo. Posiblemente el profesor Ertl fue el más adelantado en esta área de investigación, con contribuciones desde los años setenta del pasado siglo, que pueden ser las que abrieron el desarrollo de esta temática. Existe, como es lógico dada la importancia del premio, una enormidad de información sobre el premiado. Así una mera búsqueda (en Google.es) en español con “Nobel Química 2007 Gerhard Ertl” nos da más de 12.000 entradas. Si en la búsqueda utilizamos “Nobel Prize Chemistry 2007 Gerhard Ertl” el resultado es más de 46.000. Claramente poco se va a poder decir de nuevo... Otra sencilla búsqueda en el “web of Science” del ISI Web of Knowledge [2] aplicando los campos de Física y Química como filtro nos informa de que profesor Ertl ha publicado más de 600 contribuciones en revistas científicas indexadas. Además, podemos comprobar que el número de sus publicaciones por año pasó de 4 en 1966 hasta 40 en 1996, con un aumento progresivo. Otra forma de contrastar esta amplia cantidad de publicaciones, que lógicamente es el fruto de los años dedicados a creación científica, es la reflejada por las más de 17.000 citas de otros investigadores que sus publicaciones han recibido. Asimismo, a mediados de 2008, el índice h (definido por el físico [J.E. Hirsch](#) [3]) de las publicaciones del profesor Ertl es de 96; es decir, tiene más de 96 contribuciones que han recibido más de 96 citas en otros ítems publicados. Realmente este valor es muy elevado ya que como se indicó en un artículo de 2006

de la revista *Anales de Química* [4] los valores de h para los premiados Nobel en Química están en torno a 60-80. A resaltar que solo un químico español está en la actualidad en estos niveles de “visibilidad” de sus investigaciones (tal y como mide este índice h) y que recientemente fue investido como Doctor *Honoris Causa* por la UNED, Avelino Corma (ver *Semblanzas de los Doctores Honoris Causa* en la sección **Nuestra Facultad** de este mismo número).

En cuanto a la figura del premiado, Gerhard Ertl, cabe indicar que como regalo para su 71 cumpleaños, el día 10 de octubre, recibió la noticia de su designación como laureado con el Nobel. Nació cerca de Stuttgart (Alemania) y como detalle de su carácter se han reconocido su persistencia y honestidad. Así aparecía en un periódico una frase que se le atribuye: “creo que nunca hay que darse por vencido, siempre tienes que intentar resolver el problema hasta donde sea posible”. También el profesor Rodolfo Miranda, director del Laboratorio de Superficies de la UAM y del IMDEA-Nanociencias, que trabajó en los laboratorios del profesor Ertl en Munich en la década de los ochenta, señaló en alguno de sus escritos que en aquella época “ya era un científico muy famoso” destacando que “no sólo era un sabio sino que también, gracias a su carácter afable, tenía una gran capacidad para dirigir con enorme eficacia un grupo potente de investigación y sin perder la calidez humana”. Otros autores han remarcado que es “una persona cordial y un hombre íntegro, que siempre ha antepuesto la honradez científica y la exactitud en su trabajo a cualquier otra consideración”. Su formación universitaria básica la realizó en la Universidad Técnica de su ciudad natal (Stuttgart) entre 1955 y 1957, realizando un curso en la Universidad de París y otro en la Universidad Ludwig Maximilians de Munich. Finalmente obtuvo el diploma en Física por la Universidad Técnica de Stuttgart en 1961. Entre 1962 y 1965 realizó el doctorado en la Universidad Técnica de Munich. En aquellos años sus investigaciones trataban sobre superficies “puras” de metales (Cobre o Germanio) y reacciones catalíticas como la descomposición de agua o N_2O . También comenzó a utilizar métodos como la difracción de electrones de baja energía (abreviada como LEED desde su denominación en inglés “Low Energy Electron Diffraction”).

La carrera científica del profesor Ertl se ha desarrollado en varias universidades. Comenzó como profesor asistente (Lecturer) en la Universidad Técnica de Munich (1965-1968), pasando a ser profesor (Professor) y director del Instituto de Química-Física de la Universidad Técnica de Hannover

entre 1968 y 1973. También como profesor y director del Instituto de Química-Física estuvo en la Universidad Ludwig Maximilians de Munich desde 1973 hasta 1986. Durante estos años realizó estancias, como profesor visitante, en el Departamento de Ingeniería Química del Instituto Tecnológico de Pasadena (California, 1977), en el Departamento de Física de la Universidad de Wisconsin (Milwaukee, 1979) y en el Departamento de Química de la Universidad de California (Berkeley, 1982). Para culminar su carrera científica pasó a ser el director, entre 1986 y 2004, del Departamento de Química-Física del Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, en Berlín. Desde 2004 permanece como profesor emérito en esta última institución. A lo largo de su carrera ha recibido innumerables premios, distinciones y doctorados honoris causa, como ejemplo en 1998 recibió el Premio de Química de la Fundación Wolf (compartido con su colega y amigo de la Universidad de California, en Berkeley, Gabor Somorjai).



Gerhard Ertl, Premio Nobel de Química 2007.

Antes de pasar a resaltar los aspectos más sobresalientes de los descubrimientos científicos del profesor Ertl, y quizás a modo de justificación personal por atreverme a escribir sobre un Premio Nobel, indicaré que la referencia número 87 de mi tesis doctoral [5], que data de 1983, corresponde a una publicación del profesor Ertl y colaboradores sobre quimisorción de hidrógeno en caras cristalinas de Fe. Es más, la coincidencia ha hecho que en los últimos años estamos instalando en la Facultad de Ciencias de la UNED un Laboratorio de Química en Superficies, del que soy responsable, o que mi grupo de investigación lleve trabajando en Catalizadores Heterogéneos desde hace más de 20 años. Por todo ello me he atrevido a comentar lo que sigue sobre las investigaciones del profesor Ertl. Efectivamente, los elementos básicos sobre los que ha investigado el nuevo

Premio Nobel de Química son las superficies de sólidos y la principal aplicación de estos conocimientos ha sido en el campo de los catalizadores heterogéneos. Sus estudios son de carácter básico o fundamental, a pesar de las múltiples aplicaciones industriales que tienen los procesos moleculares que ocurren en la interfase gas-sólido (Figura 1). Así cuando una molécula, normalmente de gas, interacciona con la superficie de un sólido puede sufrir un choque elástico o ser adsorbida (quimisorbida). Si esta segunda posibilidad se da, puede ocurrir que la interacción con los átomos de la superficie provoque una disociación de las moléculas, dando especies químicas diferentes en la superficie del sólido. La molécula también puede reaccionar con los grupos superficiales del sólido modificándolos, es decir, puede cambiar las propiedades químicas de la superficie. Una tercera posibilidad es que varias especies quimisorbidas se encuentren, con lo cual se pueden dar reacciones químicas binarias (entre dos reactivos) sobre una superficie dada. Existen varios casos en que estos procesos químicos, que tienen lugar en las superficies de los sólidos, han sido claves desde un punto de vista tecnológico. Como primer ejemplo tenemos la catálisis heterogénea que ha sido fundamental en diferentes procesos químicos industriales durante el pasado siglo. Así la agricultura intensiva ha sido posible gracias a los abonos sintéticos que son ricos en nitrógeno. Estos se producen desde 1913 mediante el método de Haber-Bosch que consiste en convertir el nitrógeno del aire en amoníaco, para lo que se usa un catalizador que contiene Fe. En nuestros automóviles actuales nos acompaña un catalizador que convierte el monóxido de carbono, los óxidos de nitrógeno y los restos de hidrocarburos no quemados (que se originan en el motor y que son altamente tóxicos y contaminantes) hasta inocuos CO_2 y N_2 . Más recientes son los desa-

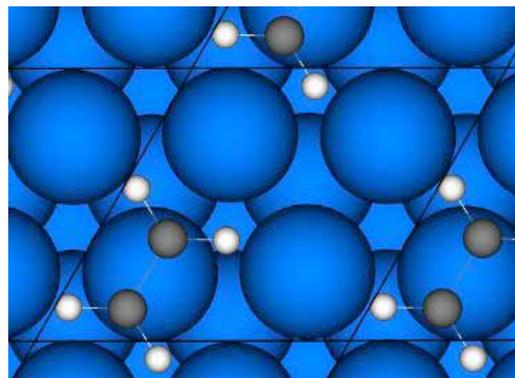


Figura 1. Representación de una superficie metálica donde interaccionan moléculas triatómicas.

rollos de electro-catalizadores para pilas de combustible, que permiten obtener energía eléctrica a partir del hidrógeno de una forma limpia, es decir, sin generar contaminantes. Relacionados con los procesos químicos que se dan en las superficies al interactuar reactivos gaseosos debemos mencionar los fenómenos de corrosión de materiales. Estas reacciones en las superficies introducen problemas de mantenimiento de instalaciones, en industrias químicas, en plantas nucleares, en aviones, etc. Los daños debidos a la corrosión pueden ser minimizados mediante la modificación de la composición de la superficie del material, por ejemplo, formando una capa de óxido impermeable al aire (o al agua).

El estudio de las reacciones químicas que ocurren en las superficies tiene interés desde la perspectiva de la química básica. Mientras que conceptualmente las reacciones entre moléculas de gases pueden ser más fácilmente racionalizadas (teoría de colisiones, etc.), cuando intervienen dos fases se multiplica el número de posibilidades de especies reactivas e intermedias, de caminos de reacción y de tipos de interacciones en la interfase. Básicamente estamos en un entorno más desordenado, más complejo y cambiante. Las interfases sólido-gas nos introducen en un entorno que es intermedio entre la relativa facilidad de la fase gaseosa y la complejidad molecular de la fase líquida. Cuando un sólido adsorbe una molécula intercambia energías, concentra especies reactivas, y sobre todo forma nuevos enlaces químicos. Una consecuencia del estudio de las reacciones químicas en las superficies es que tenemos un método de conocer en profundidad las reacciones en medios condensados.

Para poder estudiar y analizar adecuadamente las superficies de los sólidos, dada su tremenda reactividad, se ha de disponer de equipos de ultra-alto-vacío (UHV), que son necesarios para mantener limpias dichas superficies y para el manejo de reactivos gaseosos en cantidades adecuadas. Ertl dedicó una parte de su actividad durante muchos años al desarrollo de herramientas experimentales que permitiesen realizar su proyecto de investigación científica; ya que hemos de pensar que los equipos de UHV no se desarrollaron hasta los años sesenta-setenta, del pasado siglo. Como muestra de la complejidad técnica de los aparatos que trabajan en condiciones UHV el primer equipo de estas características que se ha instalado en la UNED, Figura 2, es de muy reciente adquisición, año 2007. Asimismo el profesor Ertl desarrolló nuevas técnicas espectroscópicas y microscópicas, entre las que destaca la microscopía

de fotoemisión, siendo uno de los pioneros en la aplicación de la microscopía de efecto túnel.



Figura 2. Fotografía de los sistemas de UHV, disponibles en la UNED, donde se realizan los análisis de materiales por espectroscopias fotoelectrónica de rayos X (XPS) y de electrones Auger (AES), así como de espectrometría de masas de iones secundarios (SIMS).

INTRODUCCIÓN HISTÓRICA AL ESTUDIO DE LOS PROCESOS QUÍMICOS EN SUPERFICIES

Podríamos remontarnos al siglo XIX, cuando se definió la catálisis por parte de Jöns Jacob Berzelius, un sabio sueco cuya obra científica ilumina la historia de la Química. La definición que entonces se hizo de “catalizadores” es cuando menos discutible: “son sustancias que, por su mera presencia, provocan reacciones químicas que de otra forma no podrían tener lugar”; pero lo que es más relevante en el presente contexto es que para esta definición se parte de una observación: “un alambre caliente de platino en una mezcla de aire y gas, el metal se volvía incandescente”, es básicamente un reacción de combustión que ocurre en una superficie. La historia de la química de los procesos en superficies y el estudio de las interfases tiene varios hitos significativos a principios del siglo XX. Cabe destacar que en 1912 el profesor francés Paul Sabatier consiguió el Premio Nobel de Química, por sus investigaciones sobre “método para hidrogenación de compuestos orgánicos en presencia de metales finamente divididos...”.

Fue años más tarde cuando se apreció que el mecanismo molecular fundamental del método Sabatier consiste en la adsorción de moléculas de hidrógeno sobre la superficie del

metal, donde es disociado dando especies atómicas reactivas. También fue la Catálisis Heterogénea, concretamente las investigaciones para su aplicación a la síntesis de amoníaco, lo que sirvió al profesor Fritz Haber para obtener el Premio Nobel de Química en 1918. Más estrechamente ligados a los conceptos básicos que controlan los procesos en superficies son los trabajos del Premio Nobel de Química de 1932, Irving Langmuir, quien lo recibió por: "sus descubrimientos e investigaciones en química de superficies". Langmuir consiguió contribuciones relevantes para interpretar las reacciones con catalizadores heterogéneos y los procesos en la interfase aire-agua. Su nombre está asociado en la literatura científica especializada al de "la isoterma de adsorción de Langmuir" y al mecanismo de reacciones catalíticas tipo "Langmuir-Hinshelwood". Desde 1932 ningún Premio Nobel de Química fue concedido en el campo de los procesos químicos en superficies, hasta 2007 con Gerhald Ertl.

En el campo de investigación de los procesos químicos en superficies han habido, y sigue habiendo, dos dificultades importantes: (1) preparar superficies con composición y morfología controladas y (2) la carencia de técnicas experimentales adecuadas que permitan escudriñar los fenómenos que ocurren, a escala de química molecular, en dichas superficies. Un giro para resolver este segundo aspecto se produjo en los años cincuenta y sesenta del pasado siglo, cuando para desarrollar las tecnologías de semiconductores se empiezan a manipular las superficies bajo condiciones de ultra-alto-vacío (UHV). Además se comienzan a implementar nuevas técnicas de estudio realizadas en dichas cámaras UHV. Esto llevó a establecer una nueva área científica, llamada ciencia de superficies, en la que venimos confluyendo científicos de diferentes campos de especialización, desde físicos de la materia condensada a químico-físicos, o desde ingenieros químicos hasta químicos de síntesis pasando por físicos teóricos.

En general Ertl ha desarrollado metodologías que pueden ser aplicadas para resolver problemas de la ciencia de superficies a escala atómico-molecular. Él las ha aplicado para estudiar diversos aspectos de la reactividad de las moléculas en las superficies. Las investigaciones que él ha realizado se caracterizaron por la ambición en los objetivos, por la elegancia en el diseño de los experimentos y por la persistencia en obtener conclusiones reproducibles y de elevado interés científico. La meticulosidad de los estudios es la base de muchos de los avances en conocimiento de los procesos en superficies a

escala molecular. Como opinión personal creo que sería muy deseable que este campo de investigación, procesos químicos en superficies y formación de interfases, no tuviera que esperar otros 75 años para que se le adjudicara un Premio Nobel a los que en él trabajan. Este comentario final se basa en datos objetivos de muchos investigadores que han desarrollado su actividad en esta área tan multidisciplinar, y que están avalados por unas aportaciones que claramente pueden ser objeto de futuros premios Nobel (véase a tal efecto la lista de químicos más citados en el mundo y/o los que tienen mayor impacto científico y tecnológico).

ALGUNAS APORTACIONES CIENTÍFICAS DE GERHARD ERTL

Desde los trabajos eminentemente aplicados de Sabatier quedaban cuestiones científicas básicas sin resolver. Por ejemplo como el hidrógeno se quimisorbe y evoluciona en las superficies metálicas de Pd, Pt, Ni, etc. Esta cuestión no solo es interesante desde el punto de vista de las reacciones de hidrogenación de compuestos orgánicos, sino que también lo es desde el punto de vista electroquímico, ya que el hidrógeno se produce en los electrodos de metal durante la electrolisis. Pues bien en el grupo del profesor Ertl aplicando una combinación de técnicas como LEED (Low Energy Electron Diffraction) y medidas de desorción de especies quimisorbidas fueron capaces de describir con precisión como se disponen los átomos de hidrógeno en una superficie metálica (ver como ejemplo Figura 3). Esta descripción de los estados del hidrógeno en superficies no solo resuelve cuestiones fundamentales, no conocidas previamente, sino que es relevante desde el punto de vista de los

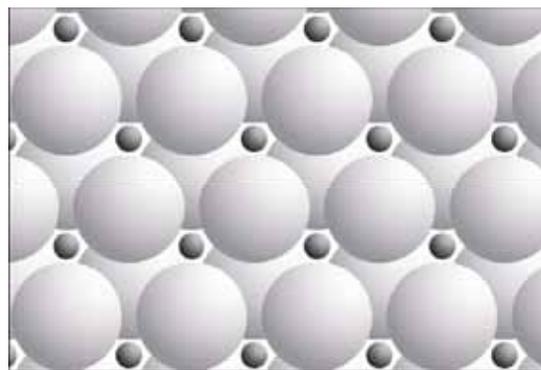


Figura 3. Situación de los átomos de hidrógeno, representados por esferas pequeñas, formando una monocapa sobre un cristal de Pt (111).

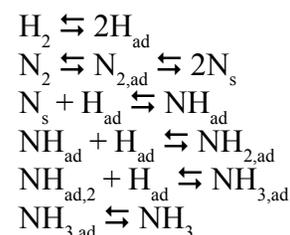
Vida científica

mecanismos de las reacciones catalizadas. Otro aspecto importante es la aplicación coordinada de varias metodologías para resolver un problema científico, ya que una sola técnica sería insuficiente para establecer conclusiones definitivas. Esta forma de investigación ha sido la habitual en los estudios del nuevo laureado Nobel.

Otro problema científico resuelto por el profesor Ertl es el relacionado con el mecanismo molecular de la reacción catalítica de Haber-Bosch. La reacción consiste en hacer reaccionar moléculas de nitrógeno con moléculas de hidrógeno para formar amoníaco ($N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$). El catalizador industrial para esta reacción contiene partículas de hierro, a las cuales se le añade hidróxido potásico (como promotor), estando ambos soportados sobre alúmina o sílice. En este caso las claves del mecanismo de reacción en la superficie del catalizador son la quimisorción disociativa del nitrógeno y las especies intermedias que se generan. Varios mecanismos de reacción se habían postulado basándose en datos cinéticos, quedando claro que no era posible elegir el correcto. Ertl aplicó intensivamente entre 1975 y 1985 las técnicas de la ciencia de superficies para investigar sobre sistemas modelo esta reacción; aún cuando era consciente de que estaba operando en condiciones de reacción muy diferentes a las del proceso industrial Haber-Bosch. Es decir, en un caso se trabaja en UHV y en el otro a elevadas presiones. Asumiendo inicialmente el mecanismo de Langmuir-Hinshelwood la primera etapa de la reacción consiste en la adsorción en la superficie de las moléculas de hidrógeno y nitrógeno. Dado que ya tenía conocimientos previos sobre la quimisorción de hidrógeno en superficies de hierro, concentró sus esfuerzos en establecer si la quimisorción de nitrógeno era disociativa o no. El enlace triple entre los átomos de nitrógeno, que es extremadamente fuerte, hace esperar que la ruptura de la molécula sea difícil y/o que la barrera de energía a superar para realizar dicha ruptura sea muy elevada. En este caso lo que mostró Ertl usando XPS fue la presencia de nitrógeno atómico sobre las superficies de hierro. También demostró que las energías de activación de la reacción de disociación son diferentes sobre los distintos planos cristalográficos de hierro expuestos en superficie, cambiando estas barreras energéticas al ir aumentando el cubrimiento con especies reactivas.

Por otra parte estudiando un catalizador real de síntesis de amoníaco mediante AES (Auger Electrons Spectroscopy) fue capaz de detectar átomos de nitrógeno en la superficie del material sometido a ciclos catalíticos bajo alta presión. Con ello

demonstró la validez de las medidas a baja presión en sistemas modelo y su posible extrapolación a condiciones prácticas del proceso industrial. Una vez identificados los átomos de nitrógeno disociados, determinaron que la formación de estas especies era lenta y demostraron, cuantitativamente, que en el mecanismo de la reacción de Haber-Bosch intervienen las siguientes etapas:



En realidad estas etapas del mecanismo de reacción habían sido propuestas con anterioridad, pero lo que aportaron las investigaciones de Ertl fue, no solo demostrar que eran correctas, sino además, obtener detalles energéticos de cada etapa individual. Para ello obtuvo información de la reacción inversa (descomposición del amoníaco) que se favorece a bajas presiones. Siguiendo el esquema de reacciones antes indicado, desde abajo hacia arriba, podemos comprobar que el amoníaco se puede quimisorber disociativamente sobre la superficie del catalizador. Las especies NH se producen en cantidad suficiente para ser cuantificadas mediante diferentes métodos como: UPS (Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy), SIMS (Secondary Ion Mass Spectroscopy) ó HREELS (High Resolution Electron Energy Loss Spectroscopy). Por otra parte la cantidad de intermedios NH_2 es más reducida, no siendo posible determinar su cantidad por métodos espectroscópicos. Para solventar este problema aplicaron otra metodología, que consiste en co-adsorber NH_3 y D_2 . De esta forma se pueden determinar las velocidades de disociación y recombinación de las especies $NH_{3,ad}$ y $NH_{2,ad}$. Con esta información se puede construir un diagrama energético completo de las etapas e intermedios de reacción, que es el que se muestra en la Figura 4.

Aunque la Figura 4 podría darnos a entender que conocemos todos los detalles de una reacción catalizada de interés industrial, como es la síntesis de amoníaco, aún quedaban aspectos por resolver. Por ejemplo se sabía que la presencia de iones de potasio aumentaba la actividad catalítica de hierro. Ertl había observado que el potasio permanecía en la superficie del catalizador sometido a condiciones parecidas a las de la reacción. Entonces cabía preguntarse: ¿por qué el potasio es un

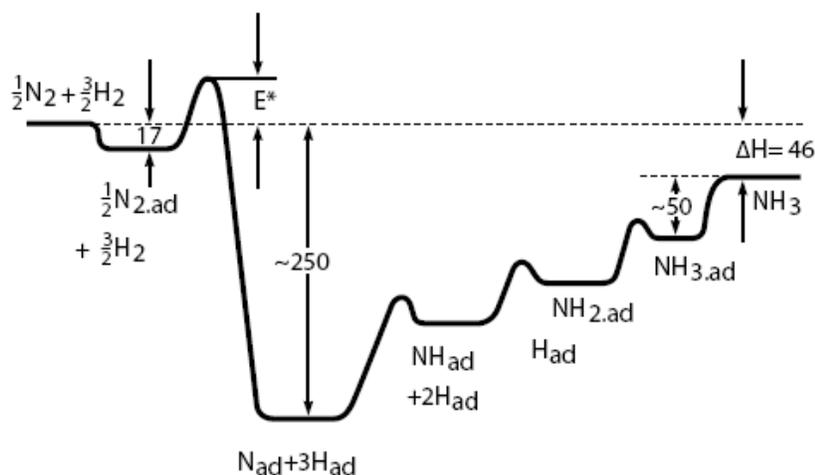


Figura 4. Diagrama energético e intermedios presentes en las superficies de hierro durante la reacción de síntesis del amoníaco.

promotor de la acción del catalizador? Dado que en este proceso la ruptura del enlace de la molécula de nitrógeno es la etapa limitante de la velocidad de reacción, es asumible que el promotor precisamente actúe sobre este paso. Pues bien, comprobó que en presencia de potasio se hacía más fácil la adsorción de las moléculas de nitrógeno, y la energía de adsorción aumentaba desde 10 hasta 15 kJ/mol. Este efecto fue explicado considerando que el potasio puede donar electrones a los átomos de hierro próximos. Las investigaciones del profesor Ertl sobre el proceso Haber-Bosch pueden ser tomadas como modelo, mostrando que la aplicación de métodos experimentales muy sofisticados puede resolver aspectos fundamentales y de relevancia práctica. Cabe destacar su capacidad para diferenciar las etapas y aspectos básicos que son objeto de la investigación. Fue capaz de crear equipos y métodos experimentales potentes, y de utilizarlos coordinadamente, y de aplicarlos juiciosamente en experimentos bien diseñados. Esto le permitió dar un salto de calidad en el conocimiento químico profundo de una reacción tecnológicamente relevante. Además demostró como funciona una superficie catalítica a escala atómico-molecular, lo que constituye un ejemplo único y excepcional para el campo de la catálisis heterogénea.

A partir de los trabajos del profesor Ertl es posible relacionar los datos cinéticos macroscópicos con las etapas individuales de un proceso en una superficie. Para algunas reacciones catalizadas se sabe que los datos cinéticos responden a una velocidad de reacción oscilatoria, es decir, tienen un comportamiento dinámico no-lineal. Como ejemplo tenemos la oxidación

de monóxido de carbono con oxígeno sobre superficies de platino. Algunas cuestiones claves para este tipo de procesos son: ¿Cuál es el mecanismo molecular que da lugar a cinéticas no-lineales? o ¿qué otros fenómenos pueden deducirse, además de la cinética oscilatoria? Pues bien, este ha sido, también, uno de los temas de investigación más reciente del profesor Ertl. De nuevo en este campo ha aplicado un gran número de métodos de física y de química de superficies, con el fin de comprender los aspectos básicos del proceso catalítico complejo. Por ejemplo ha usado técnicas "in situ" para determinar el efecto

del cubrimiento de la superficie con el adsorbato, como es la determinación de la función de trabajo, o ha realizado estudios FTIR (Fourier Transform Infrared Spectroscopy) para evaluar las interacciones adsorbato-superficie, o difracción de rayos X para conocer el estado estructural del catalizador. Aunque estas técnicas son generalmente menos precisas que los métodos UHV, proporcionan una inestimable información sin la brecha en la presión de trabajo que los UHV imponen. Otro aspecto del estudio de reacciones oscilatorias en superficies es que la energía que se suministra al sistema debe ser minimizada y controlada. Esto significa que técnicas como AES (Auger Electron Spectroscopy) no son aplicables aquí; y por tanto se ha de recurrir a métodos que utilizan menores energías incidentes como son: LEED (Low Energy Electron Diffraction) que permite seguir cambios estructurales y PEEM (PhotoEmission Electron Microscopy) que determina funciones de trabajo locales con resolución espacial.

En el caso de la oxidación de CO sobre Pt existen varios mecanismos de reacción operando simultáneamente, siendo uno de los más espectaculares el de reconstrucción de las superficies. Básicamente hasta aquí hemos considerado la superficie del catalizador como un sólido rígido estable durante el proceso de quimisorción-reacción-desorción. Pues bien, se ha comprobado que los estados iniciales de las superficies metálicas, por ejemplo caras (100) o (110), pueden sufrir transformaciones de reconstrucción que tienden a disminuir las tensiones atómicas existentes en dichas superficies. Además el CO puede quimisorberse más fácilmente en las superficies no modificadas, y a partir de ciertos cubrimientos la energía

de adsorción es suficiente para invertir la reconstrucción de la superficie. Alternativamente el O_2 puede quimisorberse más favorablemente en la superficie reconstruida, por lo que durante el proceso catalítico se aumenta la velocidad de reacción dando lugar a la disminución del cubrimiento con CO y a una nueva reconstrucción de la superficie. Como resultado tenemos simultáneamente cambios oscilatorios de la cinética de reacción, y también son posibles reorganizaciones espaciales de la superficie, es decir, regiones ricas en CO adsorbido y otras con más O_2 adsorbido. Estas situaciones pueden ser detectadas directamente mediante PEEM, viniéndose a demostrar de nuevo que la sistemática de investigación del profesor Ertl, métodos experimentales adaptados al objeto de estudio, es generalizable a sistemas dinámicos no-lineales. Por otra parte, esta metodología puede ser considerada como un patrón de trabajo, sobre como se puede abordar el estudio de un proceso químico en una superficie, y como se pueden dilucidar los mecanismos de las reacciones que están ocurriendo. De nuevo aquí el proceso estudiado tiene un enorme interés ambiental, dada la toxicidad del monóxido de carbono, y lo que Ertl aclaró en los años noventa fueron sus aspectos microscópicos fundamentales.

A MODO DE CONCLUSIONES

Gerhard Ertl ha desarrollado una metodología general para resolver aspectos fundamentales de la ciencia de superficies. Aplicando esta metodología ha resuelto varios retos científicos sobre la reactividad química de moléculas en superficies. Tanto las herramientas experimentales como la planificación de las investigaciones, que en sus laboratorios se han realizado, podemos calificarlas como de gran elegancia. El profesor Ertl nunca ha renunciado a seguir profundizando en un tema de investigación, siendo extremadamente ambicioso en las conclusiones de sus trabajos, tanto por su profundidad científica como por su corroboración experimental. En resumen el ha establecido las bases para conocer los fundamentos químicos de los procesos que ocurren en las superficies de los sólidos, con detalle a escala microscópica, es decir a nivel atómico-molecular.

Como pinceladas finales vamos a recoger cuatro comentarios que definen la trayectoria del premio Nobel de Química 2007:

- El profesor Ertl representa un caso paradigmático, ya que desarrollando una investigación básica sobre

modelos, ha conseguido aclarar procesos catalíticos que tienen importantes aplicaciones tecnológicas.

- La vida científica de Ertl ha estado marcada por el estudio de las superficies sólidas con el objetivo de entender los mecanismos atómicos y moleculares que intervienen en una reacción catalizada. La comprensión de los mismos ha sido su mayor éxito científico.
- Para llevar a cabo sus estudios y poder disponer de superficies sólidas perfectamente caracterizadas, Ertl centró su actividad durante muchos años en el desarrollo y perfeccionamiento de nuevas herramientas experimentales, un paso indispensable siempre que en la investigación científica se quiere llegar un poco más lejos que los demás.
- Se considera con razón a Gerhard Ertl como uno de los creadores de una nueva disciplina, la fisicoquímica de superficies sólidas, que involucra por igual a físicos y químicos.

BIBLIOGRAFÍA

1. http://nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2007/.
2. ISI Web of Knowledge (<http://www.accesowok.fecyt.es/login/>).
3. Hirsch, J.E.: "An index to quantify an individual's scientific research output", en *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **102**(46), 16569-16572, November 15, 2005.
4. Luque Arrebola, A. y Román Polo, P.: "La producción científica de los químicos españoles y el índice h de Hirsch", *Anales de Química*, **102**(2), 11-17, Abril-Junio, 2006.
5. Guerrero Ruiz, A.R.: "Estudio del comportamiento de Catalizadores de Fe y Ru con soporte carbonoso en la reacción de hidrogenación del monóxido de carbono", *Publicaciones de la Universidad de Granada*, 1983.

Antonio R. Guerrero Ruiz

*Dpto. de Química Inorgánica y Química Técnica
Grupo de Diseño Molecular de Catalizadores Heterogéneos*