

# Hidrodesoxigenación catalítica aplicada a biomasa

## Catalytic hydrodeoxygenation applied to biomass

Alma Arévalo y Juventino J. García\*

Facultad de Química. Universidad Nacional Autónoma de México. CDMX. México.

### PALABRAS CLAVE:

Hidrodesoxigenación  
Biomasa  
Catálisis  
Hidroprocesos

### RESUMEN:

El uso de un catalizador e H<sub>2</sub> o fuentes de hidrógeno para la eliminación o reducción del contenido de oxígeno en diversos materiales recibe el nombre de hidrodesoxigenación (HDO) catalítica. El objetivo de su uso en materiales provenientes de la biomasa aunque es la reducción del contenido de oxígeno de las sustancias que contiene. Idealmente se busca la obtención de hidrocarburos de manera sostenible, neutros en carbono, pero algunos otros productos de valor agregado pueden ser obtenidos en el camino. En este artículo se presenta un panorama general del campo y ejemplos puntuales relacionados con la producción de combustibles y otros productos de valor agregado.

### KEYWORDS:

Hydrodeoxygenation  
Biomass  
Catalysis  
Hydroprocess

### ABSTRACT:

The use of a catalyst and H<sub>2</sub> or hydrogen sources for the reduction of oxygen content in a variety of materials is known as catalytic hydrodeoxygenation (HDO). The aim of its use in biomass-derived materials is the reduction of oxygen content. The ideal products are sustainable hydrocarbons, neutral in carbon; however, also some other useful products can be obtained on the way. This paper presents a general overview in the field along with examples related to fuel production and value-added products.

### Introducción

La producción de combustibles es hoy en día una labor prioritaria a nivel mundial, lo cual se ha venido realizando, mediante el empleo fundamentalmente de fuentes fósiles de combustibles como el petróleo crudo. Esta actividad debe de ser mejorada en el corto plazo, explorando fuentes alternativas y renovables, buscando que las emisiones de gases contaminantes no aumenten, como el caso del CO<sub>2</sub> y preferentemente se usen dichos gases en la producción de combustibles.

En forma natural se tiene establecida la forma de usar el CO<sub>2</sub> y transformarlo a través de la fotosíntesis en diversos tipos de biomasa, con una eficiencia relativamente adecuada, pero la gran cantidad de producción de CO<sub>2</sub> por el uso indiscriminado de combustibles fósiles no ha logrado disminuir su acumulación provocando el efecto invernadero a nivel global.

Según el tipo de biomasa, ésta puede ser transformada mediante algunos o varios pasos de reacción o extracción en productos de consumo o de valor agregado. Entre las diversas opciones destaca de forma prioritaria el uso de biomasa como alimento de consumo humano, pero los desechos provenientes de esta actividad comercial e industrial pueden ser usados como fuente de energía y otros productos de valor adicional.<sup>[1,2]</sup>

Una vertiente de lo anterior se enfoca en la producción de biocombustibles para los diversos tipos de vehículos de transporte, lo cual involucra el uso de aceites vegetales y grasas

animales de descarte de la industria alimentaria, los cuales a su vez representan un problema de acumulación de residuos contaminantes.<sup>[3,4]</sup>

Los aceites y grasas antes mencionados están constituidos en buena medida por tri-ésteres de ácidos grasos, cuya transformación en combustibles habitualmente implica una reacción de trans esterificación inicial con alcoholes (típicamente metanol), para producir los correspondientes ésteres metílicos conocidos como FAMES por sus siglas en inglés (*Fat Acid Methyl Esters*). Posteriormente se efectúa la remoción total o parcial del contenido de oxígeno, este paso se realiza con la presencia de una fuente de hidrógeno o agente hidrogenante empleando un catalizador típicamente heterogéneo, este procedimiento es conocido como hidrodesoxigenación catalítica (HDO).<sup>[5-7]</sup>

El proceso de HDO, aunque es bien conocido desde hace muchos años tiene varias desventajas, entre ellas el uso de fuentes no renovables de hidrógeno, la poca selectividad de los catalizadores usados y las condiciones severas de temperatura y presión, Figura 1.

Una estrategia relativamente poco explotada es el uso de catalizadores homogéneos de estructura conocida o bien establecida, basados en metales abundantes y de bajo costo entre los que se pueden destacar, pero no se limita, al uso de níquel, hierro, manganeso y cobalto. Adicionalmente, es

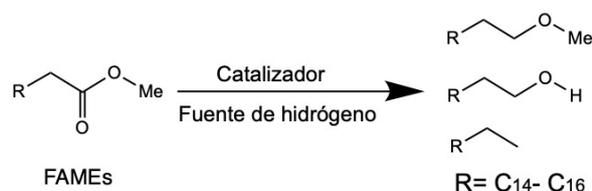


Figura 1. Reacción genérica de HDO.

deseable que la fuente de hidrógeno sea sostenible, barata y preferentemente de uso y operación segura, entre los cuales algunos silanos juegan un papel destacado.

### Del petróleo crudo a la biomasa

Se ha estimado que las reservas mundiales de petróleo crudo se agotarán en algunos años,<sup>[9]</sup> además hoy en día se puede atestiguar el daño al medio ambiente por su uso indiscriminado lo que ha impactado en el clima global.<sup>[9]</sup>

Existen diversas alternativas para la sustitución de combustibles fósiles por otras fuentes de energía, es aquí donde la biomasa ocupa un sitio relevante, ya que existe una gran cantidad de este tipo de materiales producidos por organismos vivos de forma natural. Por ejemplo, la celulosa y lignocelulosa de fuentes vegetales, alcoholes por la fermentación de azúcares, algas, grasas animales y aceites vegetales, éstos representan las materias primas para generar bloques de construcción de sustancias que, de otra forma, son preparadas a partir de petróleo.<sup>[10]</sup>

Por lo que se requiere que para la transformación de biomasa en productos de valor agregado comercializables y fuentes de energía, se desarrollen nuevas metodologías y procesos en el área de la química y la ingeniería química, lo que lleva a la concepción de biorrefinerías, esto es, sitios donde se desarrolle tal actividad, Figura 2.

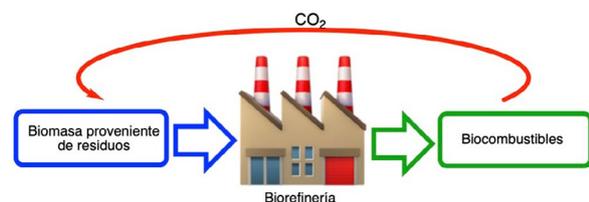


Figura 2. Representación esquemática de una biorrefinería.

### Biodiesel como fuente de energía

Históricamente Rudolf Diesel diseñó su proyecto de motor empleando como combustibles aceites de origen vegetal, sin embargo, el auge de los combustibles fósiles hizo más accesible el uso difundido de derivados del petróleo.<sup>[11]</sup> Irónicamente hoy en día estos aceites vuelven a ser la alternativa para la producción sostenible de diésel.

Los aceites y las grasas están constituidos típicamente por triglicéridos, estos son ésteres del glicerol y tres ácidos grasos (AG), los cuales pueden ser iguales o diferentes, aunque siempre en números pares de carbono, cuya composición depende de su fuente y origen geográfico.<sup>[12,13]</sup> En general la composición de ácidos grasos en aceites vegetales varía en el rango de C8 a C24, con una mayor ocurrencia entre C16 a C18.<sup>[14]</sup> Los aceites son habitualmente líquidos en algunas ocasiones conformados por ácidos grasos insaturados, y las grasas son normalmente sólidas conteniendo mayoritariamente ácidos grasos de cadena saturada.<sup>[15]</sup>

Estructuralmente los ácidos grasos son similares a los hidrocarburos de combustibles de origen fósil como el diésel, y representan el sustituto ideal de origen renovable para su producción, con la premisa fundamental de que sean utilizados al momento de su desecho posterior a otras aplicaciones, lo cual representa aproximadamente 20 millones de toneladas de aceite de cocina residual.<sup>[16]</sup>

Los triglicéridos contenidos en los aceites de desecho pueden ser utilizados para formar los correspondientes metilésteres de los ácidos grasos (FAMEs), por medio de una reacción de transesterificación con metanol, Figura 3.

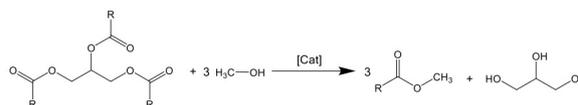


Figura 3. Formación de FAMEs.

Los FAMEs constituyen el componente principal del combustible conocido como biodiesel, pero que aún posee un alto contenido de oxígeno, su uso directo no es recomendable, por lo que existen límites para su uso el cual se restringe actualmente a ser un aditivo del diésel obtenido por la vía de los combustibles fósiles.<sup>[17]</sup> La reducción o eliminación total de oxígeno en FAMEs y ácidos grasos por una reacción de HDO es necesaria para que los biocombustibles puedan ser una competencia directa de los derivados del petróleo (Figura 1).

### HDO catalítica

En el caso de los ácidos grasos (AG) las reacciones de eliminación del contenido de oxígeno pueden ocurrir por varias vías de reacción, las cuales incluyen la descarboxilación, la descarboxilación y la HDO, en ocasiones acompañadas de reacciones adicionales como isomerización y *cracking*. Estos procesos se ilustran en la Figura 4, en dichas reacciones se requiere de la presencia de un agente donador de hidrógeno y de un catalizador que haga más eficiente a la reacción.

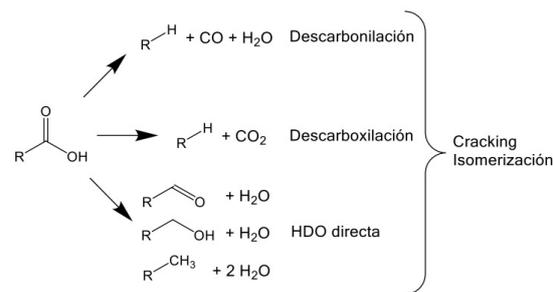


Figura 4. Reacciones de eliminación de oxígeno.

### Sistemas catalíticos heterogéneos de HDO

La gran mayoría de sistemas catalíticos informados para la HDO de AG y FAMEs están basados en sistemas heterogéneos empleando diversos soportes y metales depositados, los cuales en su gran mayoría operan a altas temperaturas y presiones considerables de H<sub>2</sub>.

En el caso de AG los catalizadores heterogéneos que emplean metales nobles han sido los más utilizados, algunos ejemplos dignos de mencionarse son los que contienen paladio y platino,<sup>[18]</sup> pero incluyen otros como rutenio, zirconio,

y molibdeno, empleando una gran variedad de soportes de diversa superficie y acidez,<sup>[19]</sup> además de tratamientos previos y posteriores a la inclusión del metal.

Una alternativa de menor costo ha sido el uso de catalizadores basados en metales menos abundantes del bloque 3d, entre los cuales se distinguen los sistemas basados en níquel y cobalto.<sup>[19]</sup> De hecho, a nivel industrial los sistemas de HDO de AG se basan en catalizadores heterogéneos de sulfuro de NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y CoMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.<sup>[20]</sup> Una desventaja es que las impurezas azufradas presentes en los aceites provocan la desactivación paulatina de los catalizadores de níquel. El uso de otros metales abundantes en procesos catalíticos heterogéneos incluye, pero no se limita, al uso de sistemas conteniendo vanadio, hierro, y cobre en una amplia variedad de soportes de diversa acidez.<sup>[18]</sup>

En el caso de FAMES los sistemas catalíticos heterogéneos con metales nobles también dominan ampliamente el área de HDO, el tema ha sido revisado recientemente por Belousov y colaboradores,<sup>[5]</sup> y se puede comentar que se incluyen protocolos que emplean sulfuro de molibdeno y metales nobles,<sup>[21]</sup> entre los que destacan sistemas de Pd/C,<sup>[22]</sup> y Re<sub>x</sub>-Ru/C.<sup>[23]</sup> En la búsqueda de sistemas basados en metales abundantes sobresale nuevamente el uso de níquel,<sup>[24]</sup> entre los ejemplos destacados se pueden mencionar algunos sistemas recientes basados en carbono poroso dopado con níquel,<sup>[25]</sup> o el sistema monometálico de Ni/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y su estudio entre la sinergia de acidez o alcalinidad a nivel superficial,<sup>[26]</sup> el sistema bimetálico NiMo/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> para el hidrotratamiento de FAMES para producir alcanos de cadena C<sub>15</sub>-C<sub>18</sub> y finalmente el sistema Ni-Vox/TiO<sub>2</sub> se ha distinguido como un catalizador muy activo en la hidrogenación selectiva de metilpalmitato.<sup>[27]</sup> El empleo de metales menos costosos con una actividad catalítica similar o competitiva en condiciones de temperatura y presión más suaves sigue siendo una asignatura pendiente.

### Sistemas catalíticos homogéneos de HDO

Es grande el contraste entre la cantidad de informes de sistemas catalíticos homogéneos de HDO aplicada a AG comparado con los sistemas heterogéneos presentados en la sección anterior, éstos son relativamente pocos siendo la mayoría casos aislados en investigaciones más amplias de descarboxilación o HDO, ésta ha sido un área poco explorada y representa un campo de desarrollo futuro.

El uso de metales nobles en la descarboxilación/descarbonilación de AG ha sido explorada con mayor frecuencia,<sup>[28]</sup> siendo los metales más utilizados Pd, Rh e Ir.

Los informes de HDO homogénea con metales abundantes incluyen algunos ejemplos como el sistema Co-triphos en presencia de H<sub>2</sub> (80 bar) el cual funciona con AG y triglicéridos formando los alcoholes respectivos con rendimientos relativamente buenos 95-75%.<sup>[29]</sup> Un ejemplo más reciente incluye el uso de TiCl<sub>4</sub> en presencia de NH<sub>3</sub>-BH<sub>3</sub> para la producción de los alcoholes correspondientes a partir de AG a temperatura ambiente y 4h de reacción.<sup>[30]</sup> El uso de catalizadores homogéneos basados en hierro también ha sido informado, empleando FeCl<sub>2</sub>, 1,5-bis(difenilfosfino)pentano (DPPent) y diversos aditivos incluyendo 20 atm de CO para producir alfa-olefinas con rendimientos cercanos al 80%.

En el caso de níquel y AG se han usado sales simples de níquel (NiI<sub>2</sub> y Ni(AcO)<sub>2</sub>) en presencia de trifenilfosfina (PPh<sub>3</sub>), obteniéndose alfa-olefinas y el óxido de la fosfina (O=PPh<sub>3</sub>) con rendimientos entre el 51 y 88%, tras 16 horas de reacción a 190 °C.<sup>[31]</sup> Se ha informado el uso de triflato de cobre (II) y 1,1,3,3-tetrametildisiloxano (TMDS) para regenerar la PPh<sub>3</sub>, la

cual actúa como mediador en el proceso de eliminación de oxígeno.

En el caso de la HDO catalítica homogénea de FAMES con metales abundantes los informes son muy limitados, los cuales incluyen compuestos modelo de FAMES y de algunos cuantos ésteres provenientes de ácidos grasos. Destacan los artículos empleando como precursores catalíticos de compuestos tipo pinza de manganeso,<sup>[32]</sup> encontrándose la hidrogenación de diversos ésteres para la producción de los alcoholes correspondientes, lo cual fue posteriormente estudiado con complejos basados en cobalto y ligantes quelato, pero muchos de los sustratos estudiados fueron ésteres sin cadenas alquílicas. Adicionalmente, se han usado algunos complejos de níquel en reacciones similares buscando la reducción total de ésteres pero ninguno de ellos derivados de ácidos grasos.<sup>[24]</sup>

Una alternativa al uso y manejo de H<sub>2</sub> es la utilización de fuentes alternas de hidrógeno ampliamente disponibles y de precio accesible. En este sentido los silanos ocupan un nicho de oportunidad para su empleo como agentes reductores en reacciones de HDO de AG. Entre ellos destaca el uso de compuestos pinza de Mn(I) y PhSiH<sub>3</sub> a 80 °C y 2h de reacción con un paso final de hidrólisis, el cual produce los alcoholes respectivos con un rendimiento cercano al 70%.<sup>[33]</sup> Otro precursor catalítico basado en manganeso [Mn<sub>2</sub>(CO)<sub>10</sub>] que en presencia de 3.3 eq. de Et<sub>3</sub>SiH y una carga de 5 mol% del precursor catalítico realiza la reducción del ácido tridecanoico, de ácido palmítico y el ácido oléico produciendo los respectivos aldehídos, esta reacción ocurre a temperatura ambiente pero requiere de irradiación con luz de 350 nm en tolueno o dietil éter y un paso final de hidrólisis.<sup>[34]</sup>

Más recientemente se informó la reducción de diversos AG con 2 mol% de [MnBr(CO)<sub>5</sub>] y 2.5 eq. de PhSiH<sub>3</sub>, a 80 °C, en 2-metiltetrahydrofurano durante 4 horas, obteniéndose los respectivos alcoholes después de hidrolizar la mezcla de reacción con NaOH, Figura 5. Los AG utilizados fueron ácido láurico, palmítico, oléico y linoléico, con rendimientos entre el 66% al 87%.<sup>[35]</sup>

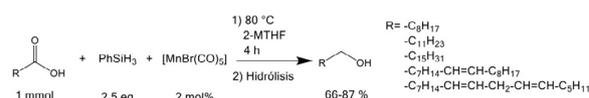


Figura 5. HDO homogénea con manganeso.

Entre los sistemas homogéneos basados en hierro destacan algunos casos, en uno de ellos se reduce el AG al alcohol correspondiente, después de hidrolizar el producto formado, utilizando 4 eq. de PhSiH<sub>3</sub>, 5 mol% de [Fe(CO)<sub>3</sub>(COD)] en THF por vía fotoquímica a 350 nm por 24 horas a temperatura ambiente, con este sistema se logró la reducción del ácido palmítico y oléico con una conversión del 85% y 86% respectivamente.<sup>[36]</sup> Adicionalmente, el mismo grupo documentó el uso de tricarbonyl(*trans*-4-fenilbut-3-en-2-on)hierro(0) para la reducción de ácido palmítico y oléico al aldehído correspondiente empleando 2 eq. de tetrametildisilano (TMDS) a 50 °C en tolueno, durante 24 horas, este procedimiento tiene una conversión de 81% y 74% respectivamente para los ácidos grasos antes mencionados.

El uso de TMDS como agente reductor ofrece una gran ventaja en precio ya que es considerado un producto de desecho de la producción de silanos lo cual lo hace atractivo para

desarrollar metodologías basadas en éste. Un caso adicional con metales abundantes fue documentado con el uso de precursores catalíticos de cobre, en específico el uso de triflato de cobre (III) y TMDS reducen diversos ácidos grasos al alcohol correspondiente con muy buenos rendimientos excepto para el ácido oléico.

Otro metal abundante que ha sido informado como precursor catalítico en HDO es  $Zn(AcO)_2$  en presencia de N-metilmorfolina empleando  $PhSiH_3$  como agente reductor en 2-metil-tetrahidrofurano, a 80 °C por 16 horas produciendo directamente el alcohol.<sup>[37]</sup>

La reducción de diversos sustratos carbonilo-orgánicos con silanos, incluidos ésteres como el caso de los FAMEs, han sido documentados empleando precursores catalíticos de manganeso con ligandos auxiliares polidentados.<sup>[38]</sup>

## Conclusiones

El aprovechamiento de residuos o desperdicios de productos provenientes de la biomasa y su transformación en productos útiles y que además puedan ser fuentes de energía es una tarea vigente para la investigación en las diversas áreas de la química y la ingeniería química. El uso de catalizadores heterogéneos para estas transformaciones ha sido muy útil, pero la tarea debe extenderse a sistemas catalíticos que permitan realizar los diversos procesos en condiciones más suaves (<100 °C) sostenibles, preferentemente usando metales abundantes, la cual es una tarea por abordar mediante sistemas catalíticos homogéneos, libres de aditivos empleando fuentes alternativas de hidrógeno.

## Agradecimientos

Agradecemos profundamente a DGAPA-UNAM (IN-200223) y a SECIHTI (CBF2023-2024-529), por su financiamiento en los proyectos mencionados y durante varios años de investigación en el área. También agradecemos a Oscar Fernández Lama por la elaboración de algunas figuras.

## Bibliografía

- [1] A. Muscat, E. M. de Olde, I. J. M. de Boer, R. Ripoll-Bosch, *Glob. Food Secur.* **2020**, *25*, 100330, <https://doi.org/10.1016/j.gfs.2019.100330>.
- [2] A. Tursi, *Biofuel Res. J.* **2019**, *22*, 962-979, <https://doi.org/10.18331/BRJ2019.6.2.3>.
- [3] M. Lopes, S. M. Miranda, I. Belo, *Crit. Rev. Environ. Sci. Technol.* **2020**, *50*, 2583-2616, <https://doi.org/10.1080/10643389.2019.1704602>.
- [4] T. A. Moonsamy, G. Rajauria, A. Priyadarshini, M. A. K. Jansen, *Food and Bioprod. Process.* **2024**, *148*, 31-42, <https://doi.org/10.1016/j.fbp.2024.08.012>.
- [5] A. S. Belousov, A. L. Esipovich, E. A. Kanakov, K. V. Otopkova, *Sus. Energy & Fuels* **2021**, *5*, 4512-4545, <https://doi.org/10.1080/15435075.2024.2430444>.
- [6] B. J. Zhao, B. Du, J. S. Hu, Z. J. Huang, S. D. Xu, Z. Y. Chen, D. F. Cheng, C. B. Xu, *Catalysts* **2024**, *14*, <https://doi.org/10.3390/catal14100673>.
- [7] H. W. Zhang, J. Zhang, Y. D. Ma, Z. P. Cai, Y. N. Cao, K. Huang, L. L. Jiang, *Appl. Cat. A-General* **2025**, *699*, <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2025.120278>.
- [8] J. Tollefson, *Nature* **2018**, *556*, 422-425, <https://doi.org/10.1038/d41586-018-04931-6>.
- [9] J. E. Johnston, E. Lim, H. Roh, *Sci. of the Total Environ.* **2019**, *657*, 187-199, <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.11.483>.
- [10] A. Corma, S. Iborra, A. Vely, *Chem. Rev.* **2007**, *107*, 2411-2502, <https://doi.org/10.1021/cr050989d>.
- [11] G. Knothe, *Comprehensive Renewable Energy, Vol 5: Biomass and Biofuel Production* **2012**, 11-14, <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-087872-0.00502-3>.
- [12] A. Kumar, S. Sharma, *Renew. Energy Rev.* **2011**, *15*, 1791-1800, <https://doi.org/10.1016/j.rser.2010.11.020>.
- [13] S. V. Ghadge, H. Raheman, *Biores. Tech.* **2006**, *97*, 379-384, <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2005.03.014>.
- [14] S. K. Hoekman, A. Broch, C. Robbins, E. Cenicerros, M. Natara-jan, *Renew. Sust. Energy Rev.* **2012**, *16*, 143-169, <https://doi.org/10.1016/j.rser.2011.07.143>.
- [15] Y. Li, W. Kunz, F. Chemat, in *Plant Based "Green Chemistry 2.0": Moving from Evolutionary to Revolutionary* (Eds.: Y. Li, F. Chemat), Springer Singapore, Singapore, **2019**, pp. 51-87, [https://doi.org/10.1007/978-981-13-3810-6\\_3](https://doi.org/10.1007/978-981-13-3810-6_3).
- [16] M. R. Teixeira, R. Nogueira, L. M. Nunes, *Waste Manage* **2018**, *78*, 611-620, <https://doi.org/10.1016/j.was-man.2018.06.039>.
- [17] R. Kumar, I. S. Sundari, S. Sen, N. Dasgupta, R. Chidambaram, in *Platform Chemical Biorefinery: Future Green Chemistry*, **2016**, pp. 361-377, <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-802980-0.00019-5>.
- [18] X. Li, X. Y. Luo, Y. B. Jin, J. Y. Li, H. D. Zhang, A. P. Zhang, J. Xie, *Renew. Sust. Energy Rev.* **2018**, *82*, 3762-3797, <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.10.091>.
- [19] S. Z. Ding, C. M. A. Parlett, X. L. Fan, *Molec. Catal.* **2022**, *523*, <https://doi.org/10.1016/j.mcat.2021.111492>.
- [20] H. Topsoe, R. G. Egeberg, K. G. Knudsen, H. Topsoe, *Abstr. Pap. Am. Chem. Soc.* **2004**, *228*, U659-U659.
- [21] H. M. Wang, J. Male, Y. Wang, *ACS Cat.* **2013**, *3*, 1047-1070, <https://doi.org/10.1021/cs400069z>.
- [22] E. Meller, U. Green, Z. Aizenshtat, Y. Sasson, *Fuel* **2014**, *133*, 89-95, <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2014.04.094>.
- [23] J. P. Zhao, X. C. Cao, P. Liu, F. Long, S. Y. Wu, J. M. Xu, J. C. Jiang, *Int. J. of Green E.* **2024**, *22*, 1-8, <https://doi.org/10.1080/15435075.2024.2430444>.
- [24] A. Cook, S. Prakash, Y. L. Zheng, S. G. Newman, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 8109-8115, <https://doi.org/10.1021/jacs.0c02405>.
- [25] H. Chang, G. Abdulkareem-Alsultan, Y. H. Taufiq-Yap, S. M. Izhm, S. Sivasangar, *Fuel* **2024**, *355*, 1-21, <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.129459>.
- [26] S. Chen, M. J. Leng, Z. J. Liao, J. Zeng, H. M. Xie, G. L. Zhou, *Ind. C. and Prod.* **2024**, *211*, 1-11, <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2024.118227>.
- [27] X. C. Cao, F. Long, G. Y. Zhang, J. M. Xu, J. C. Jiang, *ACS Sus. Chem. & Eng.* **2021**, *9*, 9789-9801, <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.1c02181>.
- [28] M. Tabandeh, C. K. Cheng, G. Centi, P. L. Show, W. H. Chen, T. C. Ling, H. C. Ong, E. P. Ng, J. C. Juan, S. S. Lam, *Molec. Cat.* **2022**, *523*, <https://doi.org/10.1016/j.mcat.2020.111207>.
- [29] T. J. Korstanje, J. I. van der Vlugt, C. J. Elsevier, B. de Bruin, *Science* **2015**, *350*, 298, <https://doi.org/10.1126/science.aaa8938>.
- [30] P. V. Ramachandran, A. A. Alawaed, H. J. Hamann, *Org. Lett.* **2022**, *24*, 8481-8486, <https://doi.org/10.1021/acs.orglett.2c03326>.
- [31] A. John, M. A. Hillmyer, W. B. Tolman, *Organometallics* **2017**, *36*, 506-509, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.6b00940>.
- [32] S. Elangovan, M. Garbe, H. Jiao, A. Spannenberg, K. Junge, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 15364-15368, <https://doi.org/10.1002/anie.201607233>.
- [33] O. Martínez-Ferraté, B. Chatterjee, C. Werlé, W. Leitner, *Catal. Sci. & Tech.* **2019**, *9*, 6370-6378, <https://doi.org/10.1039/c9cy01738k>.

- [34] J. X. Zheng, S. Chevance, C. Darcel, J. B. Sortais, *Chem. Comm.* **2013**, 49, 10010-10012, <https://doi.org/10.1039/c3cc45349a>.
- [35] E. Antico, P. Schlichter, C. Werlé, W. Leitner, *JACS Au* **2021**, 1, 742-749, <https://doi.org/10.1021/jacsau.1c00140>.
- [36] L. C. M. Castro, H. Q. Li, J. B. Sortais, C. Darcel, *Chem. Comm.* **2012**, 48, 10514-10516, <https://doi.org/10.1039/c2cc35727e>.
- [37] E. L. Stoll, T. Barber, D. J. Hirst, R. M. Denton, *Chem. Comm.* **2022**, 58, 3509-3512, <https://doi.org/10.1039/d1cc03396d>.
- [38] R. J. Trovitch, *Acc. Chem. Res.* **2017**, 50, 2842-2852, <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.7b00422>.



### Alma Arévalo

Facultad de Química. Universidad Nacional Autónoma de México. Circuito Interior. Ciudad Universitaria. CDMX. 04510. México

C-e: [amochofora@yahoo.com.mx](mailto:amochofora@yahoo.com.mx)  
ORCID: 0000-0002-1975-2451

Es actualmente técnico académico titular en la Facultad de Química de la UNAM, en Ciudad de México, obtuvo el doctorado en 2001 bajo la supervisión del profesor Juventino J. García. Ha desarrollado investigación en catálisis y química organometálica, lo cual incluye el uso de compuestos organometálicos para la activación de moléculas de interés en la industria (petrolera, textil y farmacéutica), lo cual habitualmente implica la activación de enlaces muy resistentes, entre los que se destacan: C-C, C-H, C-S, C-N, C-Cl y C-F. Cuenta con 40 artículos en el área y más de 1100 citas y un factor H de 19.



### Juventino J. García

Facultad de Química. Universidad Nacional Autónoma de México. Circuito Interior. Ciudad Universitaria. CDMX. 04510. México

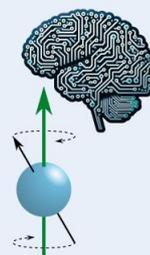
C-e: [juvent@unam.mx](mailto:juvent@unam.mx)  
ORCID: 0000-0003-1839-1938

Es profesor titular en la UNAM en Ciudad de México, en dónde obtuvo su doctorado en 1991. Posteriormente realizó una estancia postdoctoral en la Universidad de Sheffield bajo la supervisión del profesor Peter M. Maitlis (1992-1993). Posteriormente realizó una estancia sabática en la Universidad de Rochester, dentro del grupo del profesor William D. Jones. Sus intereses actuales incluyen sistemas catalíticos homogéneos y organometálicos, enfocados al uso de metales abundantes, para la implementación de metodologías sostenibles. El Prof. García es actualmente miembro del Comité Editorial de *ChemCatChem* y ha publicado más de 150 artículos y más de 4500 citas.

## 2025 AUTUMN GERMN DAY

### AI AND COMPUTATIONAL METHODS FOR NMR

16th October 2025, 10:00-17:30  
Residència d'Investigadors  
c/Hospital, 64, Barcelona



Vladislav Orekhov, University of Gothenburg  
Margarida Julià, Universidad Autónoma de Barcelona  
Antonio Hernández Daranas, IPNA-CSIC  
Marcel Swart, Universitat de Girona  
Flemming Hansen, University College London

Roundtable Discussion:  
AI and NMR, opportunities and threats

Carla García, Mariola Ferreras and Laura Díaz  
2022 and 2023 NMR Thesis Awards

More info about registration at

<https://germn.rseq.org/autumn-germn-nmr-day-ai-and-computational-methods-for-nmr/>

