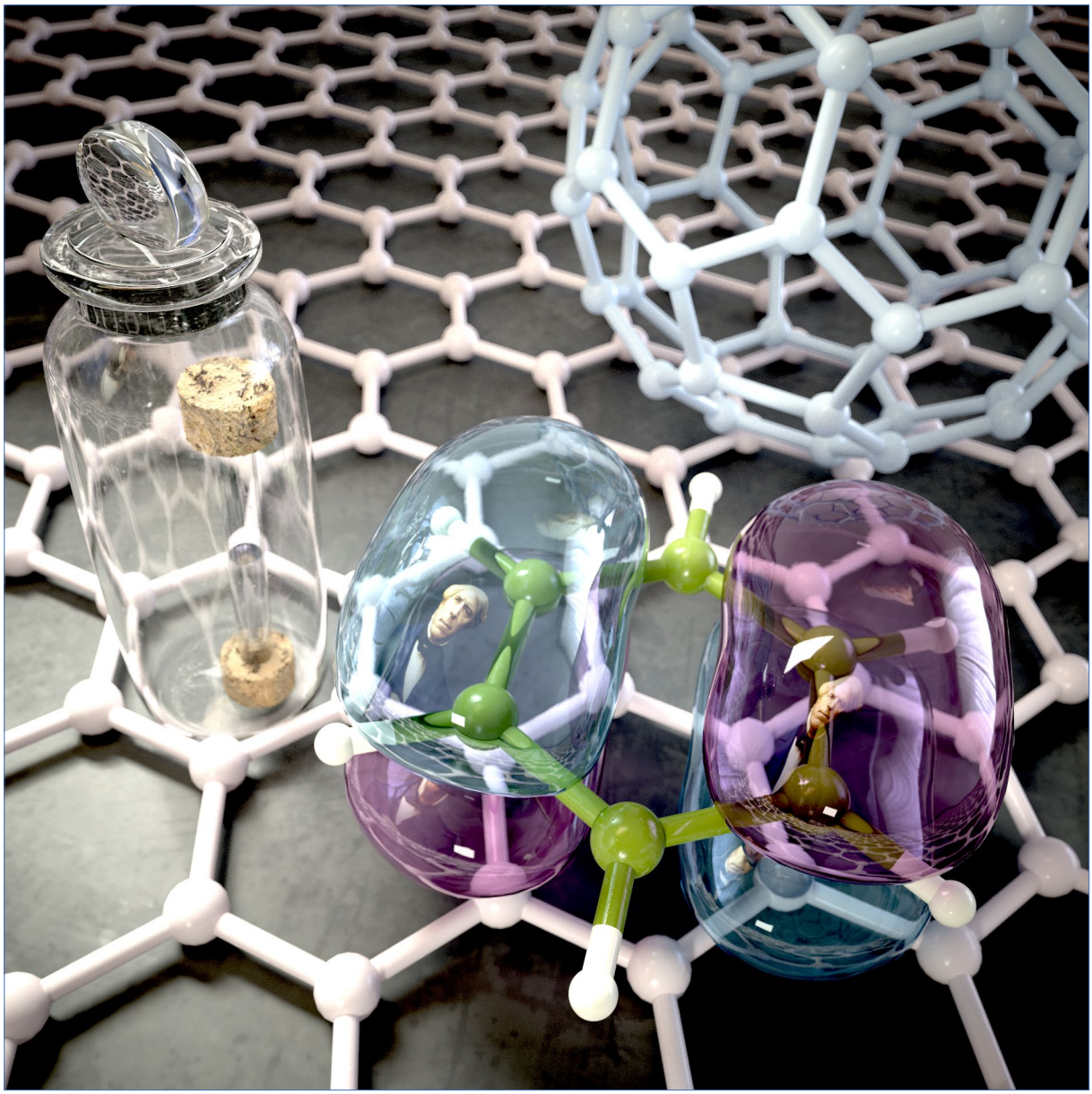
ISSN: 2792-520X

Anales de Química de la RSEQ

La revista de la Real Sociedad Española de Química

Vol. 121 • Nº 4 • www.analesdequimica.es



DOI: 10.62534/rseq.aq.121.4

RSEQ Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ
Revista editada en Madrid por la Real Sociedad Española de Química

Editor General

Juan Ángel Casares González
Departamento de Química Física y Química Inorgánica, Universidad de Valladolid.

Editor invitado Monográfico 200 años benceno
Nazario Martín León
Departamento de Química Orgánica,
Universidad Complutense de Madrid
IMDEA Nanociencia

Comité Editorial

Fernando P. Cossío
IKERBASQUE Basque Foundation for Science, Bilbao, Bizkaia.
Vicepresidente de la RSEQ.

Gabriel Cuevas González
Instituto de Química de la UNAM (México).

Luis Alberto Echegoyen
Institut Català d'Investigació Química (ICIQ). Profesor emérito de la Universidad de Tejas, El Paso.

Ana M. Geer
Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH), CSIC-Universidad de Zaragoza.

Carlos Martí-Gastaldo
Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), Universidad de Valencia.

Gabriel Pinto Cañón
Departamento de Ingeniería Química Industrial y del Medio Ambiente.
Universidad Politécnica de Madrid.

Alfonso Salinas Castillo
Departamento de Química Analítica, Universidad de Granada.

Miquel Solà
Instituto de Química Computacional y Catálisis. Universidad de Girona.

Rolando Ángel Spanevello
Universidad Nacional de Rosario (Argentina).

Uxue Uria
Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la Universidad del País Vasco.

Otilia Val-Castillo
IES Lluís Simarro Lacabra, Xàtiva (Valencia).

Secretaria Editorial

Patricia Yáñez-Sedeño
Real Sociedad Española de Química
Facultad de Ciencias Químicas. UCM
28040, Madrid

www.analesdequimica.es
administracion@analesdequimica.es

Anales de Química de la RSEQ

RSEQ Real Sociedad Española de Química

Entidad colaboradora

Miembros corporativos

Anales de Química de la RSEQ
Volumen 121 · Número 4 · octubre-diciembre 2025

SUMARIO

Diseño y maquetación:
Ostraca Servicios editoriales

Ilustración portada:
Eugenio Vázquez Sentís

An. Quím. RSEQ, 121 (4), 2025, 267-372
ISSN: 2792-520X
e-ISSN: 2792-5250
D. L.: M-232-1958

Carta del editor

Benceno: la molécula que abrió la puerta a un universo de carbono aromático
Nazario Martín León 270

Carta del Presidente y de la Secretaria General
Sonsoles Martín Santamaría y Antonio M. Echavarren 272

Ensayo

Algunas reflexiones sobre la investigación y la transferencia de conocimiento y su impacto social
José Manuel Pingarrón 273

Investigación química

Aromaticidad molecular
Miquel Solà 277

"200" Aniversario del descubrimiento del Benceno y su papel en el "100" Aniversario de la Mecánica Cuántica
Juan Casado 287

Nanografenos moleculares: el legado del benceno en la química del carbono
Juan Lión-Villar, Patricia Izquierdo-García, Jesús M. Fernández-García y Nazario Martín 292

Del 'superbenceno' a los 'superhelicenos' para emitir CPL
José L. Páez, Lidia Hortigüela, Carlos M. Cruz, Araceli G. Campaña 302

Fusionando bencenos a demanda: integrando química orgánica y síntesis sobre superficie
Iago Pozo, Dolores Pérez y Diego Peña 308

El sueño de ver moléculas y sus reacciones químicas
Ana Barragán, Nazario Martín, David Écija 314

Enseñanza de la química

Un método sencillo para analizar el porcentaje de bioetanol en la gasolina: el test de la probeta
Fernando I. de Prada Pérez de Azpeitia 324

Historia de la química

Descubriendo al Faraday químico, el hombre que aisló el benceno
Inés Pellón 331

Producción de carbón vegetal y de diamantes en Extremadura (España)
José Pastor Villegas y Jesús F. Pastor Valle 337

Las cuatro primeras décadas del Instituto Nacional del Carbón (INCAR) del CSIC (1946-1984)
Juan M. D. Tascón 342

Reseña

Basic Concepts of Orbital Theory in Organic Chemistry por Eusebio Juaristi, C. Gabriela Ávila-Ortiz y Alberto Vega-Peñaloza
Pedro Cintas 352

Noticias 353

Obituario 364

Índice de autores 365

Normas de publicación 369

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 270-271
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2100
La revista de la Real Sociedad Española de Química

CARTA DEL EDITOR

Benceno: la molécula que abrió la puerta a un universo de carbono aromático

Nazario Martín León

En este año 2025 se conmemora el descubrimiento del benceno, sin duda una de las moléculas más icónicas y fascinantes de la química. Este hallazgo fue realizado por Michael Faraday en 1825, cuando aisló por primera vez lo que llamó "bicarburo de hidrógeno" a partir del gas de alumbrado. Su trabajo fue presentado a la Royal Society of London el 16 de junio de ese año, en un artículo publicado en *Philosophical Transactions*.[1]

Este acontecimiento ha generado, 200 años después, un gran interés en la comunidad científica, impulsado especialmente por la Royal Society of Chemistry, mediante la edición de un número temático especial en el que participan veinte de sus revistas, coordinado por el premio Nobel Ben Feringa y Nazario Martín, autor de un artículo de opinión sobre este bicentenario en la revista *Chemistry World*.[2] La Real Sociedad Española de Química (RSEQ), a través de su editor general, el profesor Juan Casares, ha tenido la generosidad de permitirme actuar como editor invitado en este cuarto número de *Anales de Química de la RSEQ* que cierra el año y el singular acontecimiento del bicentenario del benceno. Así, nuestra Sociedad se suma también a esta iniciativa con una serie de artículos sobre el benceno y sus "herederos" escritos por científicos españoles de primerísimo nivel y especialistas en nanoestructuras de carbono. Así pues, en este número se abordan: hidrocarburos aromáticos policíclicos, nanografenos moleculares, grafeno y otras nanoestructuras de carbono generadas, formalmente, mediante la fusión de anillos de benceno. Además, se tratan conceptos avanzados como aromaticidad y anti-aromaticidad, y se destaca el uso de la microscopía de efecto túnel (STM/ncAFM) para visualizar y modificar, mediante reacciones sobre superficies metálicas, los sistemas aromáticos y poder "ver" estructuras cíclicas predichas desde el trabajo seminal de la teoría estructural de Kekulé publicado en 1865.[3]

Nazario Martín León.

Un artículo dedicado al enfoque histórico de este hito científico nos permitirá descubrir de la mano de la Prof. Inés Pellón, al menos conocido Faraday químico. En este año en el que a iniciativa de la UNESCO se conmemora el Año Internacional de la Ciencia y la Tecnología Cuánticas (IYQ), se incluye un artículo sobre los primeros estudios de Linus Pauling donde la "mecánica cuántica" se aplicó a la molécula de benceno y, por extensión, cómo la mecánica cuántica moderna complementa nuestra comprensión del benceno y su legado.

Hoy día, el benceno forma parte esencial de estructuras más complejas que valorizan ámbitos tan diversos como salud, energía, materiales avanzados, electrónica, alimentación, colorantes o biotecnología. Esta molécula, tan pequeña e icónica, fue la puerta al extenso universo de compuestos aromáticos que han redefinido nuestra forma de vivir.

La convergencia del legado del benceno dio origen a los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH de las siglas en inglés), moléculas constituidas por anillos de benceno fusionados, cuya síntesis fue impulsada por pioneros como R. Scholl y E. Clar. Estos compuestos mantienen la estabilidad aromática del benceno gracias a la deslocalización electrónica, y presentan propiedades electrónicas y ópticas inéditas dependiendo de su tamaño y disposición. Si bien ejemplos históricos como naftaleno o antraceno datan del siglo XIX, el desarrollo de sistemas más grandes como el pentaceno, reveló comportamientos semiconductores sorprendentes.

La síntesis y estudio de estos PAH sentaron las bases de los nanografenos moleculares, que ahora permiten diseñar materiales con propiedades modulables: conductividad electrónica, fluorescencia, quiralidad o reactividad química, todo controlado con precisión molecular. Esta evolución representa la belleza de la química precisa, que sigue ampliando los límites de lo posible.

Más allá del laboratorio, el benceno está presente de forma directa o indirecta en un sinfín de productos cotidianos. Es la base de la industria petroquímica y un pilar en la producción

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: N. Martín León. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 270-271, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2100

de plásticos, resinas, fibras sintéticas (como el nailon), detergentes, pesticidas, lubricantes, tintes y hasta medicamentos. Muchos de los colorantes que tiñen nuestras ropas, los envases de alimentos, los componentes electrónicos, las espumas aislantes, las pinturas y la gran mayoría de los fármacos que nos alivian o curan enfermedades, tienen su origen en derivados del benceno.

La molécula también está detrás de sustancias de enorme impacto económico y social, como el estireno (precursor del poliestireno), el fenol (usado para producir policarbonatos y epoxi) o la anilina (como azobenceno), base de colorantes y fármacos. En suma, el benceno es un pilar invisible pero omnipresente en la infraestructura de la vida moderna.

Paradójicamente, lo que convierte al benceno en un elemento tan útil —su reactividad y capacidad de formar nuevas moléculas— también lo hace peligroso para la salud. El benceno es tóxico y carcinógeno reconocido por la Organización Mundial de la Salud (OMS) y la Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer (IARC, Grupo 1). La exposición prolongada, especialmente en ambientes industriales, puede provocar anemia aplásica, daños en la médula ósea y leucemia. Incluso bajas concentraciones en el aire, típicas del tráfico urbano o del humo del tabaco, se consideran un riesgo para la salud a largo plazo. Por ello, las normativas internacionales han reducido drásticamente su uso en productos domésticos y se controla su presencia en combustibles, pinturas y disolventes. En este punto, es importante matizar que esta actividad teratogénica del benceno se refiere a la molécula original, y que la funcionalización química hace que se modifiquen sustancialmente las propiedades biológicas de las moléculas. Sin embargo, su legado químico sigue siendo esencial: sin benceno, gran parte de la industria química moderna simplemente no existiría.

En el excepcional legado del benceno, el grafeno representa la máxima expresión de la versatilidad del benceno: una lámina bidimensional de espesor atómico formada por anillos hexagonales de carbono fusionados. Sus propiedades —transparencia, robustez, flexibilidad y alta conductividad eléctrica— le hacen un material de carbono singular con propiedades excepcionales. Sin embargo, lo que hace ser realmente extraordinario a este primer material bidimensional (2D) obtenido por A. Geim y K. Novoselov por exfoliación física de grafito, y que les valió el premio Nobel de física en 2010, es que permitió abrir un nuevo campo de estudio para la ciencia moderna, los materiales 2D, cuya existencia misma había sido negada previamente.[4] Hoy estos materiales no solo se preparan a partir del carbono, sino que ya hay un elevado número de elementos químicos que, ya sea implicando uno solo o varios elementos químicos de la Tabla Periódica, han abierto el camino de los materiales bidimensionales cuyas aplicaciones prácticas son ya extraordinarias y cuyos límites son, aun, difícilmente imaginables. Como el benceno en su momento, el grafeno promete revolucionar no solo la ciencia sino, también, la sociedad misma con materiales con propiedades fascinantes.

El bicentenario del descubrimiento del benceno nos invita a celebrar el poder de la química para transformar ideas en realidades tangibles. Esta pequeña molécula, que hace dos siglos despertó la curiosidad de Faraday, ha abierto caminos insospechados en ciencia, tecnología y sociedad. Su legado no es solo el de un compuesto icónico, sino el de un auténtico motor de creatividad científica que sigue inspirando a nuevas generaciones de químicos a imaginar y construir un futuro lleno de posibilidades.

Bibliografía

[1] M. Faraday, *Philos. Trans. R. Soc. London* **1825**, *115*, 440-466, https://doi.org/10.1098/rstl.1825.0022.

[2] N. Martin "Celebrating the molecule that changed the world", disponible en https://www.chemistryworld.com/opinion/benzene-at-200/4021504.article, **2025** (Consultado el 09/12/2025).

[3] A. Kekulé, *Bull. Soc. Chim. Fr.* **1865**, *3*, 98-110.

[4] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, Science **2004**, *306*, 666-669, https://doi.org/10.1126/science.1102896.

Nazario Martín León

Departamento de Química Orgánica, Universidad Complutense de Madrid

IMDEA Nanociencia

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2100

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 272
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2104
La revista de la Real Sociedad Española de Química

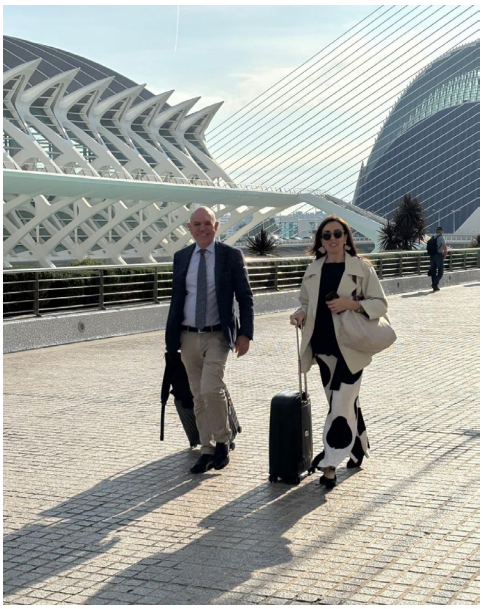
Carta del Presidente y de la Secretaria General

Sonsoles Martín Santamaría y Antonio M. Echavarren

Queridos miembros de la RSEQ:

Tras ocho años al frente de la RSEQ, ha llegado el momento del relevo para dar paso a un nuevo Equipo de Gobierno, que estará liderado por Fernando Cossío como Presidente y Elena Junquera como Secretaria General.

Desde el primer momento quisimos contar con Equipos diversos, de modo que las distintas opiniones y sensibilidades estuvieran representadas en la dirección de la RSEQ, siguiendo la tradición de nuestra sociedad en las últimas décadas. La primera medida que acometimos en 2018 fue la adopción de un nuevo sistema de distribución de subvenciones a Grupos y Secciones Territoriales, con el objetivo de reducir drásticamente los remanentes en cuentas corrientes y potenciar así las actividades de la RSEQ. Esta actuación se acompañó de una reestructuración y profesionalización de la Oficina Técnica y de una importante racionalización de nuestra estructura económica interna. Así mismo, la modernización de las páginas web de la RSEQ y la revista *Anales de Química de la RSEQ*, de las páginas web de los Grupos y Secciones Territoriales y las redes sociales ha contribuido a la dinamización de nuestra sociedad. Naturalmente, todas estas acciones —que han contribuido a una mayor transparencia en la gestión de la sociedad— no habrían sido posibles sin la colaboración constante de las distintas Juntas de Gobierno y del personal de nuestra Oficina Técnica.



Antonio M. Echavarren y Sonsoles Martín Santamaría llegando a la Ciudad de las Artes y las Ciencias de Valencia en la entrega de Premios RSEQ 2025.

En este periodo, la RSEQ ha seguido creciendo en número de miembros, pasando de 4.100 en 2018 a más de 5.600 en la actualidad. Con ello, nos situamos entre las sociedades de Química más importantes de Europa y como la sociedad científica española con mayor número de socios, tal como hemos destacado repetidamente en numerosos foros. Es especialmente significativo el rejuvenecimiento de la RSEQ, que ha aumentado del 39% al 48% el porcentaje de miembros menores de 40 años. Asimismo, se han creado cinco nuevos Grupos Especializados y se ha dinamizado la actividad de las Secciones Territoriales.

En lo que respecta a las reuniones bienales, tras la reunión celebrada en San Sebastián en 2019, la pandemia de la COVID-19 nos obligó a organizar excepcionalmente un "RSEQ Symposium" telemático en septiembre de 2021 y, posteriormente, Bienales consecutivas en Granada (2022) y Zaragoza (2023), hasta recuperar finalmente el ritmo habitual con la edición celebrada en Bilbao en 2025.

También hemos renovado nuestros Estatutos en tres ocasiones, logrando la transición de sociedad sin ánimo de lucro a entidad de utilidad pública en 2024 y, finalmente, a entidad de carácter social. Otro de los logros destacables ha sido la consolidación de la organización de las Olimpiadas de Química en sus niveles local, nacional e internacional. También lo ha sido la consolidación de nuestra presencia en las estructuras europeas de EuChemS y Chemistry Europe. Por otra parte, siguiendo la senda marcada por anteriores Equipos de Gobierno, los premios otorgados por la RSEQ se han afianzado como unos de los más prestigiosos en el ámbito de la química en España. Ahora, en línea con nuestra política de descentralización, la ceremonia de entrega de los premios RSEQ se celebra en diferentes lugares de nuestra geografía donde hay presencia de estudios universitarios de Química.

El número de agradecimientos sería demasiado extenso para recogerlo aquí. Como señalábamos más arriba, este ha sido un esfuerzo colectivo, impulsado por los Equipos de Gobierno de estos años y respaldado por las Juntas de Gobierno, sin que resulte sencillo destacar a unos por encima de otros. A todos queremos expresar nuestro agradecimiento. No obstante, queremos recordar especialmente a nuestra compañera M.ª Cruz Moreno Bondi, vocal del Equipo de Gobierno y fallecida en 2022, cuya labor fue fundamental en la creación del Grupo Especializado de Ciencias y Tecnologías (Bio)analíticas.

Para terminar, baste decir que para ambos ha sido un honor liderar durante estos ocho años la sociedad que representa a los químicos de España y haber sido depositarios de vuestra confianza. Ha constituido , sin duda, uno de los mayores orgullos de nuestras trayectorias profesionales.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: S. Martín Santamaría y A. M. Echavarren. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 272, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2104

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 273-276
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2055

La revista de la Real Sociedad Española de Química

ENSAYO

Algunas reflexiones sobre la investigación y la transferencia de conocimiento y su impacto social

Some reflections on research and knowledge transfer and their social impact

José Manuel Pingarrón

Departamento de Química Analítica, Universidad Complutense de Madrid.

PALABRAS CLAVE:

Investigación
Transferencia de conocimiento
Impacto social
Política científica
Sistema universitario

RESUMEN:

En los últimos años, España ha experimentado una tendencia positiva en la inversión realizada en I+D. El autor realiza algunas reflexiones sobre el papel fundamental que juega la Agencia Estatal de Investigación, la necesidad de una mayor y mejor coordinación entre los recursos dedicados a la I+D por el Gobierno Central y las Comunidades Autónomas y sobre las tasas de éxito en las convocatorias de proyectos de generación de conocimiento. La legislación aprobada en los últimos años facilita la transferencia e intercambio de conocimiento. El establecimiento y consolidación del sexenio de transferencia se considera un incentivo clave para su impulso. Se propone el fortalecimiento de las OTCs profesionalizando sus medios y su personal.

KEYWORDS:

Research
Knowledge transfer
Social impact
Science policy
University system

ABSTRACT:

In recent years, Spain has experienced a positive trend in R&D investment. The author offers some reflections on the fundamental role played by the State Research Agency, the need for greater and better coordination between the resources dedicated to R&D by the Central Government and the Autonomous Communities, and the success rates in calls for knowledge-generating projects. Legislation passed in recent years facilitates the transfer and exchange of knowledge. The establishment and consolidation of the six-year transfer period is considered a key incentive for its promotion. The author proposes strengthening the OTCs by professionalizing their resources and personnel.

España es un país que ha hecho un notable esfuerzo en los últimos años por situarse entre los países de vanguardia en investigación. El esfuerzo investigador de sus universidades, de sus Organismos Públicos de Investigación y de los Institutos de Investigación que tienen las Comunidades Autónomas se ve avalado por las cifras de producción científica que año tras año demuestran una cantidad y calidad que supera con mucho lo que sería razonable dada la inversión pública y privada en I+D+I.

Algunas cifras que enmarcan esta afirmación pueden extraerse del Informe de la Fundación Conocimiento y Desarrollo (CYD) 2024 en su capítulo 3, Investigación y transferencia de conocimiento, en el que se concluye que, en los últimos años, España ha experimentado una tendencia positiva en la inversión realizada en I+D, reflejando un mayor compromiso con el desarrollo científico y la innovación. Así, se observa un crecimiento sostenido en dicha inversión en relación con el PIB. En 2022, la inversión alcanzó el 1,44%, frente al 1,21% registrado en 2017. Las empresas y las instituciones privadas sin ánimo de lucro fueron las principales impulsoras de este aumento, representando el 56,8% del gasto total, un ligero incremento respecto al 55,2% de 2017. En contraste, la inversión en enseñanza superior ha disminuido ligeramente, pasando del 27,1% en 2017 al 26% en 2022.

En términos nominales, la inversión en I+D en España alcanzó los 19.325 millones de euros en 2022, lo que representó un aumento del 12,05% respecto a 2021, marcando el mayor crecimiento desde el año 2008. Desglosando los datos, la inversión en I+D interna de las empresas alcanzó los 10.902 millones de euros, mientras que las instituciones de educación superior invirtieron 5.026 millones; las administraciones públicas destinaron 3.330 millones y las instituciones privadas sin ánimo de lucro aportaron 67 millones de euros.

Si comparamos los datos de 2022 en cuanto a inversión en I+D en España (1,44%) a escala internacional, puede apreciarse cómo la distancia que nos separa es aún muy grande. En efecto, la media de la UE-27 se situó en el 2,11% del PIB, mientras que la media de la OCDE es todavía mayor, llegando al 2,73 del PIB.

Una buena noticia que remarca el informe mencionado es que, en 2022, el número de empleados en I+D siguió su tendencia de crecimiento en todos los sectores institucionales, alcanzándose los 263.047 trabajadores, lo que supuso un aumento del 5,59% respecto a 2021 y más de un 22%

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: J.M. Pingarrón. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 273-276, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2055

* C-e: pingarro@ucm.es

Manuscrito recibido: 17/07/2025 · aceptado: 18/07/2025

en el periodo comprendido entre 2017 y 2022, destacando especialmente el crecimiento en el sector de las empresas y las instituciones privadas sin ánimo de lucro.

En cuanto a la producción científica, el informe de la Fundación CYD señala que entre 2016 y 2023 el aporte de España a la producción científica mundial se mantuvo ligeramente por encima del 3% mientras que, en el contexto europeo, su participación aumentó, especialmente en el último cuatrienio, hasta alcanzar el 12,10% del total de trabajos científicos de la región.

En términos de impacto social de la investigación, España se posiciona entre los primeros países de la OCDE en publicaciones científicas de acceso abierto (69,5%), hecho que demuestra un compromiso de los investigadores españoles con la transparencia y la accesibilidad al conocimiento científico. Por otra parte, en cuanto a los indicadores de paridad de género en la producción investigadora, se observa que España tiene el mayor porcentaje de mujeres autoras y coautoras de publicaciones (44,21%) entre los países analizados por el informe con un potencial investigador similar (España, Canadá, Francia y Australia).

Es importante señalar que las universidades españolas desempeñan un papel clave en el avance científico dentro del sistema español de ciencia, tecnología e innovación. Así, el informe señala que entre 2020 y 2023, las universidades fueron responsables de más del 80% de los trabajos de investigación publicados.

Como se ha dicho anteriormente, la inversión en I+D en enseñanza superior en 2022 ascendió a 5.026 millones de euros, lo que supuso un aumento del 9,57% respecto al año anterior. Las áreas que recibieron una mayor inversión fueron las ciencias sociales, con 1.302 millones de euros (más del 25% del total), seguidas por ingeniería y tecnología (21,7%) y ciencias exactas y naturales (19,85%).

Merece la pena señalar asimismo que las universidades públicas lideraron el gasto en I+D, con una asignación de 4.404 millones de euros, lo que representa el 87,6% del gasto total. En contraste, las universidades privadas destinaron 406 millones (8% del total), mientras que el resto, 215 millones de euros (4,3%), correspondió a otros tipos de centros.

En la comparación del gasto en I+D en el sector de la educación superior en relación con el PIB, se aprecia como España con un 0,37% está claramente por debajo de la media de la UE-27 (0,46%) y de la OCDE (0,43%). El informe señala también que al analizar el gasto en I+D por comunidades autónomas, en 2022, el País Vasco (2,23%), Madrid (1,96%) y Cataluña (1,89%) fueron las regiones que destinaron una mayor proporción de su PIB a la investigación y desarrollo. En el ámbito de la educación superior, la Comunidad Valenciana (0,50%), Andalucía (0,45%) y Murcia (0,42%) fueron las que dedicaron un mayor porcentaje de su PIB a la I+D.

Pasemos ahora a la faceta de transferencia e intercambio de conocimiento y por tanto de la innovación basada en el conocimiento científico (hay bastantes otros tipos de innovación). El último apartado del capítulo 3 del informe CYD 2024 analiza cómo las universidades colaboran con las empresas innovadoras y cómo transfieren e intercambian su conocimiento a la sociedad a través de acuerdos con otros agentes, publicaciones o la explotación de patentes, entre otros.

Una conclusión importante del análisis de los datos es que las universidades no son los socios preferentes en innovación. En el periodo 2020-2022, el 90,29% de las empresas innovadoras se asoció con otras empresas que no pertenecían a su grupo y sólo un 19,95% colaboró con universidades y otros centros de enseñanza superior, un porcentaje que es menor al del periodo 2018-2020 (25,55%). Por otra parte, la colaboración entre las empresas y la Administración Pública o institutos públicos de investigación fue de un 12,60%, un porcentaje también menor al del periodo 2018-2020 (17,43%). Como es previsible, en relación con el contexto internacional y según las estadísticas de la OCDE, España presenta promedios inferiores a la media de los países OCDE tanto en empresas activas en innovación, en acuerdos de cooperación, así como en acuerdos entre empresas y universidades y otras instituciones de educación superior.

En 2022, la financiación privada de la I+D universitaria alcanzó los 274,3 millones de euros, un 12,48% más que en 2021. No obstante, en las universidades públicas esta financiación (194,3 millones) se situó aún lejos del máximo observado en 2010, previo a la crisis financiera (265,8 millones de euros). En el caso de las universidades privadas dicha financiación fue de 52,7 millones de euros.

Un aspecto importante de la colaboración entre empresas y universidades es el de los recursos captados por estas en proyectos de colaboración en I+D. Según el informe de la Fundación CYD, las universidades españolas captaron en 2022 977 millones de euros a través de su colaboración en I+D con otros agentes, principalmente empresas. Esta cifra representa un incremento de más del 45% respecto a 2021, que es debido, en gran parte, a las convocatorias del programa Next Generation.

En el mencionado informe se indica que 21 de las 76 universidades analizadas superan la media nacional de publicaciones en colaboración con empresas (4,35%), mientras que 42 universidades superan el promedio nacional en el caso de los trabajos citados en patentes (0,55).

En el proceso de valoración de la investigación y de su transferencia e intercambio, la protección del conocimiento generado es esencial, siendo las patentes una de sus formas tradicionales. En 2022 se registraron 323 solicitudes por parte de las universidades públicas españolas, casi un 12% menos que en 2021. A pesar de ello, las universidades públicas representaron el 26,24% del total de solicitudes en 2022. El volumen de ingresos por acuerdos de explotación de patentes aumentó en 2022 hasta alcanzar los 5,9 millones de euros. Hay que mencionar también otras formas de protección del conocimiento generado, como los acuerdos de confidencialidad (998 en 2022), las comunicaciones de invención (1.283) y el registro de software y contenidos digitales (285).

Finalmente, en 2022 se crearon 61 *spin-offs*, con lo que se consolida la tendencia decreciente de los últimos años (en 2017 fueron 93). De ellas, 40 estuvieron participadas por la universidad y 50 ampliaron su capital.

Una vez dados los datos, aunque como suele ser habitual en este tipo de informes, con una demora temporal mayor que lo deseable, pueden realizarse algunas reflexiones que no son más que las del autor de este artículo basadas en su experiencia tanto como investigador como de gestor en las últimas décadas.

En cuanto a la parte de investigación, el papel que juega la Agencia Estatal de Investigación (AEI) con sus convocatorias establecidas en el correspondiente Plan Estatal es clave en el mantenimiento y crecimiento de la actividad investigadora en nuestro país. Soy consciente de los esfuerzos por parte de los sucesivos directores de la AEI para que estas convocatorias y sus resoluciones tengan un calendario perfectamente definido que ofrezca seguridad a los investigadores. Este es un objetivo irrenunciable que debe anteponerse a cualquier otra acción de cambio o mejora en las diferentes convocatorias y que, a veces, por motivos ajenos a la propia

© 2025 Real Sociedad Española de Química

gestión de la Ciencia, se convierte en un enorme quebradero de cabeza.

Una de las potenciales mejoras en estas convocatorias es la reducción en el número de estas, lo que posiblemente llevaría a una simplificación de la gestión global y a una mayor claridad para los investigadores sobre las convocatorias a las que poder aplicar. La excesiva atomización de los siempre escasos recursos económicos existentes en muchos tipos de convocatorias conduce a un menor impacto potencial de los resultados de las investigaciones.

En este sentido, una petición que viene de lejos pero que parece muy difícil de llevar a la práctica es el de una mayor y mejor coordinación entre los recursos dedicados a la I+D por el Gobierno Central y las Comunidades Autónomas. Se ha propuesto varias veces (propuesta que apoyo firmemente) que la investigación basal de los grupos consolidados y de productividad probada debería garantizarse por parte de las respectivas CCAA, pudiendo así dejar los proyectos de la AEI para financiar ideas más disruptivas o equipamientos más costosos. Con un ejemplo claro, no tiene sentido que una buena parte del presupuesto de los proyectos presentados en las convocatorias de la AEI vaya a la adquisición de disolventes o pequeños consumibles que son de uso rutinario para las investigaciones en marcha y las futuras. Este tipo de gasto basal debería de estar garantizado por otros mecanismos que no fuera su solicitud en los proyectos de investigación que piden cada cierto número de años, y contribuiría a que con los mismos recursos globales (Estado y CCAA) la eficacia de su utilización y por tanto el impacto de las investigaciones fuera mayor. Cierto que para que esto se diera, sería necesaria una lealtad institucional entre los diferentes gobiernos que, al menos en el caso de la Ciencia, no parece una petición descabellada.

Una última reflexión, que sé que es controvertida, es el de las tasas de éxito en las convocatorias de proyectos de generación de conocimiento. A pesar de tener más fondos que nunca para este tipo de proyectos, que no lo olvidemos tienen un carácter seminal y son clave para un elevadísimo número de investigadores, la tasa de éxito (alrededor del 50%) viene siendo prácticamente la misma desde hace años. Al haber más recursos, los proyectos mejor evaluados tienen una mayor dotación económica. ¿Es esto malo? No lo parece. Sin embargo, conviene reflexionar sobre lo que significa que un 50% de la potencia investigadora del país no tenga recursos para desarrollar su actividad científica que, aunque no pueda calificarse de excelente, sí que en la mayoría de los casos constituye una actividad investigadora digna. Además, este grupo de investigadores difícilmente encuentra acomodo en otras convocatorias que son incluso más competitivas. La no concesión de ayudas para estos grupos acaba en poco tiempo con el abandono de estas personas de su actividad investigadora con el consiguiente adelgazamiento del tejido investigador y la pérdida de algunas ideas razonablemente buenas.

Me dirán, ¿qué sugiero? ¿café para todos? No, en absoluto, pero se podría pensar en reservar un porcentaje de los fondos disponibles (quizás un 10%) para ensanchar esa tasa de éxito (quizás hasta un 60%) de forma que el desánimo que se puede observar hablando con compañeros y compañeras que han hecho una investigación digna durante muchos años no lleve a que se vean expulsados del sistema. Puede que esa deseada colaboración entre el Gobierno Central y las CCAA en I+D fuera capaz de diseñar mecanismos para reducir el, a mi modo de ver, indeseable abandono investigador.

Pasando ya a las reflexiones sobre la transferencia y el intercambio de conocimiento, es obvio que la tarea por hacer es mayor que en lo referente a la investigación, muy posiblemente debido al retraso con el que España como país se ha sumado a la potenciación y valoración de este tema.

Es de todos conocido que uno de los factores clave que contribuyó a la generalización de la investigación como una tarea indispensable del PDI fue la introducción del conocido como sexenio de investigación. Aunque en principio no se diseñó para ello, es evidente que, con el tiempo, ha supuesto un incentivo importante para el PDI de las universidades y el PI de los OPIS en su tarea investigadora.

El intento de establecer un sexenio similar de transferencia parece que está en sus etapas finales y esperemos que, una vez establecido, tenga un efecto llamada similar al que tuvo el sexenio de investigación para potenciar la transferencia e intercambio de conocimiento en el sistema de I+D+I español. En los últimos años se han aprobado leyes (Ley 17/2022, de 5 de septiembre, por la que se modifica la Ley 14/2011, de 1 de junio, de la Ciencia, la Tecnología y la Innovación, y Ley Orgánica 2/2023, de 22 de marzo, del Sistema Universitario) que permiten y facilitan la transferencia e intercambio de conocimiento y solo es necesario que las medidas que permiten las leyes se implementen de la mejor manera posible.

Quisiera señalar tan solo dos aspectos que podrían ayudar a dicha implementación y ambas tienen que ver con lo que ahora se conocen con Oficinas de Transferencia de Conocimiento (OTCs) y que antiguamente eran las OTRIs (por cierto, muy adecuado en el cambio de nombre porque se puede y se debe transferir e intercambiar conocimiento en todos sus ámbitos). Como es evidente, ambos aspectos van a estar estrechamente relacionados.

Actualmente, cada institución (universidades, OPIS) tiene su propia OTC normalmente con una infradotación de medios tanto humanos como materiales. Su escaso personal suele estar muy comprometido con los objetivos de su OTC pero, habitualmente, no posee la formación ni a veces la capacitación técnica suficiente como para cumplir eficazmente con dichos objetivos. Uno obvio es la comercialización de los resultados de la investigación para lo que se necesitan verdaderos técnicos profesionales en la materia.

¿Cómo podría mejorarse esto? Una solución bastante clara es mancomunando las capacidades de las distintas OTCs profesionalizando sus medios y su personal. No parece de recibo que al menos en lo que respecta a una Comunidad Autónoma, no exista una estructura que cobije, coordine y establezca directrices claras a las distintas OTCs que existen en su propia Comunidad Autónoma. Esto permitiría que, con los mismos medios, la agregación dé esfuerzos y capacidades de lugar a una mayor eficacia y eficiencia de sus actividades mimetizando lo que ya existe en varias regiones europeas donde se ha demostrado que este tipo de estructuras resultan interfaces útiles y exitosas entre las instituciones investigadoras y el tejido económico-empresarial de la región correspondiente.

Estas estructuras deberían resultar también en centros de asesoramiento para el personal investigador sobre la protección de sus resultados de investigación y sobre los pasos a dar para la creación de empresas basadas en el conocimiento y en cualquier actividad emprendedora de esta naturaleza.

En definitiva, lo que propongo es un fortalecimiento de las OTCs para que cumplan con sus funciones respecto a la transferencia e intercambio de conocimiento.

No quiero terminar este artículo sin un comentario optimista con respecto al futuro. Tenemos a los y las jóvenes mejor preparados, España es un país plenamente integrado en las instituciones e infraestructuras científicas internacionales, somos un referente en Europa en cuanto a nuestra participación

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2055

en Horizonte Europa y en el diseño de los futuros programas marco y hemos dado un impulso en los últimos años muy importante en cuanto a la financiación de la I+D+I. Queda mantener el rumbo, y que los gobiernos, tanto el central como los autonómicos, interioricen de verdad que invertir en investigación y en transferencia e intercambio de conocimiento es una de las mejores inversiones de futuro que puede hacer una sociedad avanzada y libre.

José Manuel Pingarrón

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid

C-e: pingarro@ucm.es

ORCID: 0000-0003-2271-1383

Catedrático de Química Analítica en la Universidad Complutense de Madrid (1994). Premio de Investigación en Química Analítica de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) (2012). Fellow de la International Society of Electrochemistry (ISE) (2017). Premio de Investigación Científica del Grupo de Electroquímica de la RSEQ (2018). Premio a la Carrera Distinguida de la RSEQ (2025).

Vicerrector de Transferencia de Conocimiento y Emprendimiento de la UCM (2015-2018). Presidente de la Red OTRI (2015-2016). Secretario Ejecutivo de la división de I+D+I de la CRUE (2016-2018). Secretario General de Universidades en los Ministerios de Ciencia, Innovación y Universidades, y de Universidades (2018-2024).

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 277-286
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2086

La revista de la Real Sociedad Española de Química

INVESTIGACIÓN QUÍMICA

Aromaticidad molecular

Molecular aromaticity

Miquel Solà

Institut de Química Computacional i Catàlisi y Departament de Química, Universitat de Girona.

PALABRAS CLAVE:
Hückel
Baird
Möbius
Sexteto π de Clar
Hirsch

RESUMEN:
La aromaticidad molecular, como tantas otras nociones básicas en química, no es un concepto bien definido debido a su naturaleza no observable. A pesar de su carácter impreciso, es un concepto de gran importancia. En esta revisión, analizamos primero y de forma breve la historia de la aromaticidad, su naturaleza cuántica, y demostramos que, a pesar de la falta de una definición precisa, existen varias reglas de conteo de electrones muy simples que siguen un gran número de compuestos aromáticos orgánicos e inorgánicos. Finalmente, presentamos los tipos principales de aromaticidad y analizamos las formas más habituales de cuantificar la aromaticidad, destacando el hecho que los diferentes descriptores no siempre producen los mismos resultados.

KEYWORDS:
Hückel
Baird
Möbius
Clar π-sextet
Hirsch

ABSTRACT:
Molecular aromaticity, like so many other basic notions in chemistry, is not a well-defined concept due to its unobservable nature. Despite its imprecise nature, it is a concept of utmost importance. In this review, we first briefly review the history of aromaticity and its quantum nature. We demonstrate that, despite the lack of a precise definition, several very simple electron-counting rules exist that are followed by a large number of organic and inorganic aromatic compounds. Finally, we comment on the main types of aromaticity and analyze the most common ways of quantifying aromaticity, highlighting the fact that different descriptors do not speak always with the same voice.

Un poco de historia

Este año celebramos los 200 años del descubrimiento del benceno por parte de Michael Faraday.[1] La Figura 1 recoge los principales descubrimientos que se han producido a lo largo de estos dos siglos en el campo de la aromaticidad. Cuando Michael Faraday obtuvo el benceno en 1825 por destilación del residuo oleoso derivado de la producción de gas de alumbrado, lo denominó bicarburo de hidrógeno porque pensó que la relación entre carbono e hidrógeno era de 2:1. A pesar de que se trataba de un compuesto insaturado, observó que era mucho menos reactivo que el trans-2-buteno. Esta menor reactividad se ha considerado desde entonces una característica experimental de los compuestos aromáticos. Unos años más tarde, en 1834, Mitscherlich obtuvo el benceno mediante destilación seca de ácido benzoico con cal y estableció correctamente su fórmula como C_6H_6.[2] Ya en 1856, Hoffman utilizó por primera vez el término «aromático» para referirse a diversos compuestos con propiedades similares a las del benceno.[3] Desde entonces, el concepto de aromaticidad ha experimentado una enorme evolución. Con el tiempo, se ha producido una notable expansión en el número de sistemas aromáticos conocidos y en nuestra comprensión de la aromaticidad. Diez años después, tras su célebre sueño de la serpiente mordiendo su propia cola (ouroboros), no sabemos si real o imaginario, August Kekulé propuso una estructura molecular para el benceno consistente en un anillo de carbono de seis miembros con enlaces simples y dobles alternados.[4] La piridina, la primera molécula heteroaromática, la obtuvo Thomas Anderson en 1868 a través de sus estudios sobre la destilación de aceite de hueso y otras materias animales.[5]

Entrado el S. XX, en 1911, Wilstätter y Waser produjeron ciclooctatetraeno,[6] un anillo de carbono de ocho miembros con enlaces simples y dobles alternados que tenía una reactividad mucho mayor que de la del benceno. La borazina, $B_3H_6N_3$, se obtuvo en 1926 mediante una reacción de diborano con amoníaco.[7] Esta molécula representa el primer compuesto heteroaromático inorgánico sintetizado. En 1929, Kathleen Lonsdale consigue la primera estructura de rayos X del hexametilbenceno,[8] demostrando que todos los enlaces C–C del anillo bencénico tienen la misma longitud. En 1931, Hückel aplicó su teoría simplificada de orbitales moleculares (OM) a moléculas conjugadas,[9-12] y estableció las bases para la regla de los $4n + 2$ electrones π, desarrollada unos años más tarde por Doering y Detert.[13] Esta fue la primera de una serie de reglas de aromaticidad y permitió explicar la alta estabilidad del benceno y la alta reactividad del ciclooctatetraeno. Wigner

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: M. Solà. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 277-286, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2086

* C-e: miquel.sola@udg.edu

Manuscrito recibido: 24/10/2025 · aceptado: 05/12/2025

y Seitz,[14] en 1933, desarrollan el modelo de gelatina (jellium), que algunos autores relacionan con los superátomos,[15] y otros con la aromaticidad.[16] Ya en 1938, Evans y Warhurst notaron por primera vez la analogía entre los electrones π del benceno y los seis electrones deslocalizados en el estado de transición cíclico de la reacción de Diels-Alder entre butadieno y etileno,[17] sugiriendo la existencia de estados de transición aromáticos. Con este descubrimiento, la aromaticidad se extiende de sistemas estables y poco reactivos a los estados de transición. La síntesis del catión tropilio, $C_7H_7^+$, por Doering y Knox en 1954 se considera la primera verificación experimental de la regla 4*n* + 2 de Hückel.[18] Cuatro años más tarde, Johnson y Bovey formularon la primera teoría que describe el efecto de la corriente cíclica en anillos aromáticos.[19] En 1959, Longuet-Higgins y Salem sugirieron por primera vez que el sistema π del benceno presenta tendencias distorsionadoras, [20] es decir, favorece una estructura D_{3h} en lugar de la D_{6h} experimentalmente observada, mientras que Winstein introdujo el concepto de homoaromaticidad.[21] Este mismo año, Lipscomb determina la estructura del ion $B_{10}H_{10}^{2-}$.[22] Este descubrimiento junto con la síntesis en 1962 de los primeros derivados del *closo*-dodecaborato y *closo*-decaborato por el grupo de Muetterties trasladan el concepto de aromaticidad de las dos dimensiones a las tres dimensiones.[23] Por otro lado, la llamada aromaticidad de Möbius para anillos conjugados de 4*n* π-electrones fue descrita teóricamente por Heilbronner en 1964,[24] aunque experimentalmente hubo que esperar casi 40 años para ser confirmada por Herges et al.[25] En 1972, Clar extendió la regla 4*n* + 2 de Hückel de especies monocíclicas a hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP) bencenoides formulando la regla del sexteto π.[26,27] Glidewell y Lloyd presentaron más tarde una extensión de la regla de Clar a los HAP no-bencenoides.[28] La existencia de la aromaticidad en el estado triplete más bajo en energía (T_1) para anillos conjugados monocíclicos de 4*n* electrones π fue predicha por Baird en 1972.[29] La identificación de estados fundamentales tripletes de los sistemas planos $C_5H_5^+$ y $C_5Cl_5^+$ confirmó sus predicciones.[30,31] Por primera vez, se aplicaba la aromaticidad no solo en el estado fundamental, sino también a los estados excitados. En 1979, Dewar propuso el concepto de σ-aromaticidad para explicar la reducida tensión del anillo de ciclopropano,[32] mientras que Chandrasekhar, Jemmis y Schleyer introdujeron una doble aromaticidad σ + π para describir la estabilización del catión 3,5-deshidrofenilo.[33] De esta forma se introducían dos nuevos conceptos, la aromaticidad σ y la aromaticidad doble. Tres años después, Roper et al. sintetizaron el primer metalabenceno,[34] un osmabenceno, mostrando que también los metales podían estar involucrados en los sistemas aromáticos e iniciando así un nuevo grupo de especies aromáticas, los llamados compuestos metaloaromáticos. En 1985, el descubrimiento de los fulerenos,[35] llevó a Hirsch y colaboradores unos años más tarde a introducir la aromaticidad esférica con la regla $2(n + 1)^2$.[36] Para terminar el S. XX, en 1996, Schleyer et al. desarrollaron el denominado desplazamiento químico independiente del núcleo (NICS),[37] un indicador de tipo magnético que ha sido ampliamente utilizado en la literatura. Hay que comentar que un año antes, Bühl y van Wüllen habían utilizado la misma medida, aunque no en el ámbito de la aromaticidad.[38]

Ya en el S. XXI, Giambiagi y colaboradores introducen el índice de deslocalización multicéntrico de gran valor para las medidas de aromaticidad.[39] Por su parte, en el 2001, Boldyrev, Wang y colaboradores detectaron una serie de cúmulos bimetálicos que contenían Al_4^{2-}, el primer compuesto σ- y π-aromático totalmente metálico, interaccionando con un catión M^+ (M = Li, Na, Cu). Dos años más tarde, este mismo grupo publicaba el descubrimiento del clúster $Li_3Al_4^-$,[40] con un anillo de Al_4^{4-} que presentaba aromaticidad σ y antiaromaticidad π, una situación que se conoce con el nombre de aromaticidad conflictiva. El mismo grupo descubrió en 2007 el primer cúmulo metálico, Ta_3O_3,[41] que presentaba δ-aromaticidad, con lo que el concepto de aromaticidad daba un nuevo paso. Este mismo año, el grupo de Harry Anderson et al. publicaban su primer nanoanillo de porfirina,[42] extendiendo los límites del tamaño

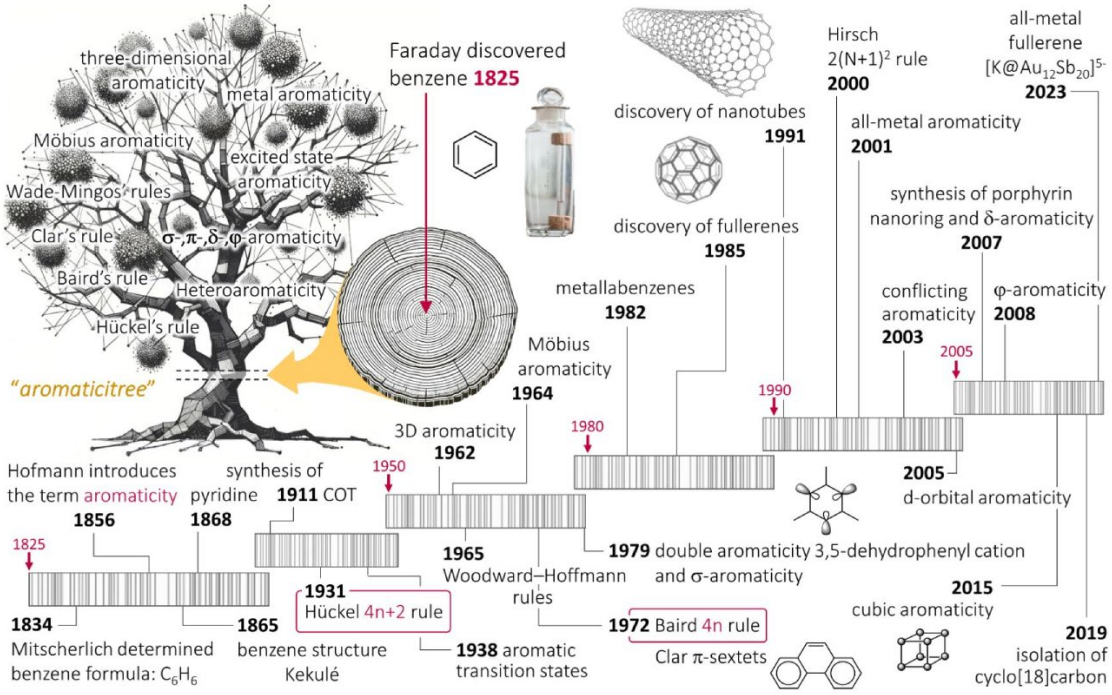


Figura 1. El árbol de la aromaticidad con diferentes tipos de aromaticidad y una ilustración dendrocronológica de la aromaticidad: seguimiento de los anillos de crecimiento del concepto a través de los descubrimientos relevantes.
Reimpreso con permiso de la autora de la Ref. [68]. Copyright 2024, S. Escayola, Universitat de Girona.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

de los sistemas aromáticos. El concepto de aromaticidad ϕ fue introducido por Tsipis et al. en 2008 a partir de estudios teóricos de sistemas cíclicos conteniendo uranio.[43] Recientemente se ha utilizado la aromaticidad ϕ para describir la aromaticidad de un clúster prismático de Bi_6 sintetizado en el grupo de Dehnen,[44] aunque hay investigadores que consideran que se trata de una afirmación no suficientemente fundamentada.[45] En el año 2015, se formuló la regla de aromaticidad de sistemas cúbicos para describir la aromaticidad de un sistema con un clúster de $[Zn^I]_8$. Y ya en el 2019, Anderson, Gross y colaboradores consiguieron sintetizar unas pocas moléculas de C_{18}, un anillo de carbono que algunos autores consideran aromático,[47-51] mientras que otros lo clasifican como no-aromático.[52-53] Finalmente comentar que recientemente ha salido publicada la síntesis de una serie de fulerenos inorgánicos, clústeres más o menos esféricos formados únicamente por átomos metálicos, de gran interés desde un punto de vista de la aromaticidad.[54-56]

Hay que destacar que después del descubrimiento de la aromaticidad en clústeres totalmente metálicos, la aromaticidad es un concepto aplicable en toda la tabla periódica, a los estados fundamentales y excitados, a los puntos estacionarios estables y metaestables, y a sistemas bidimensionales y tridimensionales. Es un concepto amplio y profundamente arraigado en la química cotidiana, no exento de crítica y controversia.[57-67]

Fundamentos cuánticos

Que la aromaticidad es un fenómeno cuántico se hace evidente comparando las soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger para la partícula en una caja monodimensional y la partícula en un anillo.[69] En las dos ecuaciones, el hamiltoniano solo contiene el término de energía cinética y son muy parecidas si la primera se expresa en coordenadas cartesianas y la segunda en coordenadas polares, siendo las condiciones de contorno la diferencia principal de su solución. Las energías relativas de los diferentes estados cuánticos que se obtienen se muestran en la Figura 2 para una caja de longitud igual a $L = 2\pi R$, siendo R el radio del anillo. En el estado fundamental, la energía cinética de la partícula en un anillo es cero (partícula en reposo) y su función de onda está totalmente deslocalizada. En la partícula en una caja monodimensional, la energía cinética del estado fundamental es $\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ y la función de onda está parcialmente localizada en el centro de la caja que es donde hay la probabilidad máxima de encontrar la partícula. Estos modelos físicos muestran que, dentro de la mecánica cuántica, una partícula deslocalizada en un circuito cerrado es más estable que el mismo sistema abierto. La estabilización aromática se entiende mediante estos modelos sencillos.

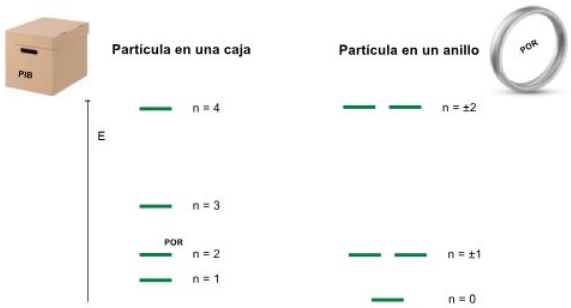


Figura 2. Los niveles de energía de una partícula en una caja unidimensional (izquierda) y de la partícula en un anillo (derecha).

Definición

Uno de los temas más controvertidos y debatidos en química, especialmente en química teórica y computacional, es la definición de aromaticidad. Dado que la aromaticidad no es una propiedad directamente medible, no puede definirse inequívocamente. Por consiguiente, constituye un unicornio químico en el sentido que le dan Frenking y Krapp,[70] al igual que otros muchos conceptos importantes no observables en química.[71] Aun así, teniendo en cuenta lo comentado en el apartado anterior, creo que la mejor definición de aromaticidad es la que dieron Chen, Schleyer y colaboradores en su artículo de 2005. Según ellos:

> La aromaticidad es una manifestación de la deslocalización electrónica en circuitos cerrados, ya sean bidimensionales o tridimensionales, lo que resulta en una disminución de la energía, a menudo considerable, y en una variedad de propiedades químicas y físicas inusuales. Estas incluyen una tendencia a la igualación de la longitud de enlace, una reactividad inusual y características espectroscópicas particulares, así como propiedades magnéticas distintivas relacionadas con fuertes corrientes de anillo inducidas.[72]

En esta definición hay dos aspectos de la aromaticidad irrenunciables: 1) deslocalización electrónica en circuitos cerrados, y 2) estabilización energética. Si no se cumplen estos dos requisitos, la molécula no se puede considerar aromática. Como propiedades adicionales habituales en compuestos aromáticos tenemos la simetría, los espectros UV-Vis, y las corrientes de anillo.

Reglas de aromaticidad

Los compuestos aromáticos clásicos acostumbran a tener distancias de enlace iguales y elevada simetría. Es el caso de compuestos aromáticos arquetípicos como C_6H_6, Al_4^{2-}, $B_{12}H_{12}^{-2}$, C_{60}^{10+} o $C_5H_5^+$, este último en su estado triplete más bajo en energía. Las estructuras simétricas encontradas en especies aromáticas resultan en capas de orbitales moleculares degenerados. En este caso, la última capa puede estar completamente llena para formar una estructura de capa cerrada, o puede estar semillena con electrones del mismo espín. Estos dos tipos de estructura electrónica estabilizan las moléculas aromáticas de manera similar a como se estabilizan las moléculas de los elementos del grupo principal con ocho electrones de valencia en su capa de valencia (regla del octeto), los complejos de metales de transición con dieciocho electrones de valencia, o los de elementos f con treinta y dos electrones de valencia.[73] Esta estructura electrónica de capa cerrada o con la última capa semillena es la base de las diversas reglas de aromaticidad que se discutirán en las siguientes subsecciones.[74] Estas reglas pueden aplicarse a especies altamente simétricas, pero también a especies menos simétricas o asimétricas relacionadas con compuestos aromáticos como, por ejemplo, la piridina. La Figura 3 contiene el desarrollo histórico de las reglas de aromaticidad más relevantes.

Reglas para la aromaticidad bidimensional

En 1931, Erich Hückel puso el germen de la regla de aromaticidad más conocida, la regla de Hückel,[9,11-12] finalmente establecida por Doering y Detert.[13] Esta regla establece que los anulenos monocíclicos π-conjugados de simetría D_{Nh} con $4n + 2$ electrones π ($n = 0, 1, 2, 3\ldots$) en el estado fundamental (S_0) son aromáticos, mientras que aquellos con $4n$ electrones π son antiaromáticos.[75-76] El origen de esta regla es la distribución

© 2025 Real Sociedad Española de Química

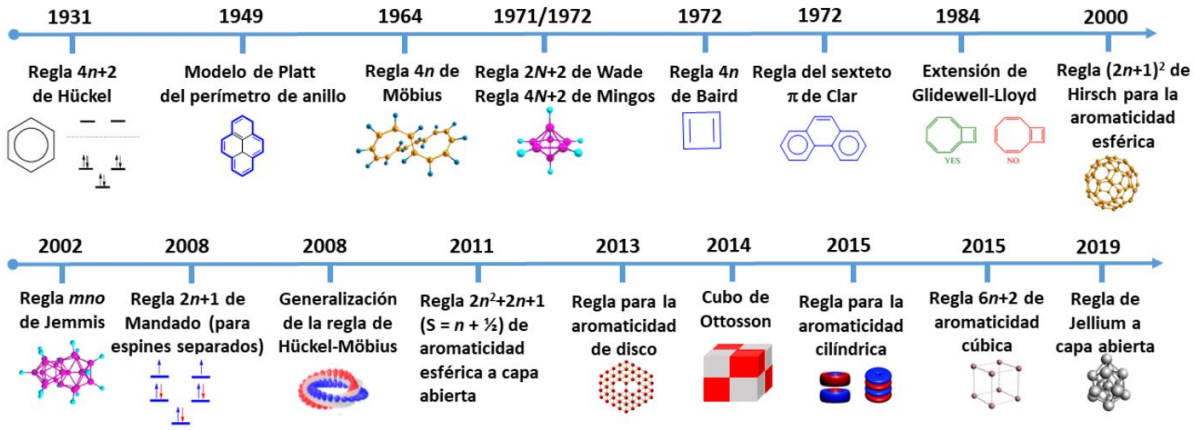


Figura 3. Desarrollo histórico de las reglas de aromaticidad más relevantes.

de orbitales moleculares π en anulenos D_{Nh}. El orbital molecular de menor energía se forma por las interacciones en fase de todos los orbitales atómicos p. El resto de los orbitales, excepto el último para valores pares de N, que tiene todos los orbitales p desfasados, se forman por pares de orbitales moleculares degenerados. Luego, se obtienen estructuras electrónicas de capa cerrada para el siguiente número de electrones π: 2, 6, 10, 14…, es decir, $4n + 2$ electrones π. En 1972, Colin Baird encontró que los anulenos π-conjugados monocíclicos de simetría D_{Nh} en su estado triplete más bajo en energía (T_1) son aromáticos con $4n$ electrones π (lo que lleva a una última capa medio llena con electrones del mismo espín) y antiaromáticos con $4n + 2$.[29] Las reglas de Baird y Hückel fueron generalizadas a estados de diferente espín por Soncini y Fowler.[77] Según estos autores, los anulenos π-conjugados monocíclicos de $4n + 2$ electrones π en el estado electrónico más bajo con espín par (singlete, quintete...) y aquellos de $4n$ electrones π en el estado electrónico más bajo con espín impar (triplete, septete...) son aromáticos. Mandado et al. demostraron que las reglas de Hückel y Baird, así como la extensión de Soncini-Fowler, pueden fusionarse en una sola regla si se consideran los electrones α y β por separado.[78] En este caso, los anulenos D_{Nh} con un número impar ($2n + 1$) de electrones α y β son aromáticos, mientras que aquellos con un número par ($2n$) de electrones α y β son antiaromáticos.

La aromaticidad de Möbius es la deslocalización electrónica particular que se encuentra en especies conjugadas cíclicas que tienen una topología molecular que se asemeja a la de una banda de Möbius.[24,79-80] Estas especies presentan una inversión de fase en el orbital molecular π más estable. El orbital molecular más estable es doblemente degenerado. El resto de los orbitales, excepto el último para valores N impares, también vienen agrupados de dos en dos. En este caso, las estructuras electrónicas de capa cerrada, que proporcionan estabilización aromática, se obtienen con 4, 8, 12,…, es decir, $4n$ electrones π (n = 1, 2, 3…). La regla de Möbius se opone a la regla de Hückel y, en consecuencia, los anulenos de tipo Möbius con $4n + 2$ electrones π son antiaromáticos. La aromaticidad de Möbius fue descrita teóricamente por primera vez por Craig y Paddock para sistemas organometálicos en 1958,[81] y en 1964, fue ampliada por Heilbronner para los anulenos.[24]

El cubo de Ottosson que se muestra en la Figura 4 fue diseñado para resumir en un esquema simple varias combinaciones de (anti)aromaticidad en anulenos en función del número de electrones π ($4n$ frente a $4n + 2$),[82] el estado electrónico (S_0 frente a T_1) y la topología (Hückel frente a Möbius). Por ejemplo, un sistema de $4n + 2$ electrones π en su estado T_1 y con topología de Möbius es aromático, como lo indica el cubo rojo inferior, derecho y posterior de la Figura 4.

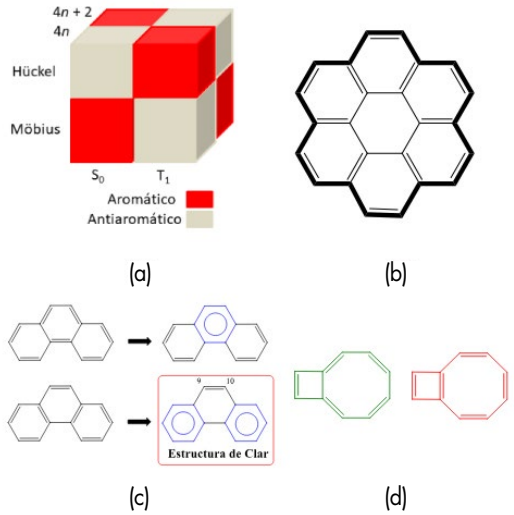


Figura 4. (a) Cubo de Ottosson; (b) Coroneno con el perímetro en trazo más grueso; (c) Dos de las cinco estructuras covalentes de resonancia de Kekulé del fenantreno y sus correspondientes sextetos π aromáticos de Clar que se indican con un círculo. La estructura con el mayor número de sextetos π aromáticos es la denominada estructura de Clar; (d) Las dos posibles estructuras de resonancia del biciclodeca[6.2.0]pentaeno.

La regla $4n + 2$ de Hückel se cumple estrictamente solo en sistemas monocíclicos como el benceno y el ciclooctatetraeno. Los HAP, como el coroneno no cumplen esta regla. El coroneno tiene 24 electrones π y, en consecuencia, es antiaromático según la regla de Hückel. Sin embargo, sus propiedades fisicoquímicas son más similares a las de las especies aromáticas que a las antiaromáticas. El modelo de perímetro de anillo de Platt,[83] que fue un primer intento de extender la regla de Hückel a los HAP, divide los HAP en perímetro y núcleo interno. El carácter aromático del HAP es el del anuleno del perímetro (18 electrones π en el coroneno, marcado en trazo grueso en la Figura 4b) y el núcleo interno representa una perturbación menor de este carácter aromático. Sin embargo, esta simple adaptación de la

© 2025 Real Sociedad Española de Química

regla de Hückel no funciona en muchos hidrocarburos conjugados policíclicos (HCP) no bencenoides,[84] como el bifenileno, que tiene 12 electrones π en el perímetro.

Una mejora del modelo de Platt para describir la aromaticidad en los HAP es el denominado modelo del sexteto π de Clar.[26-27] En este modelo, la aromaticidad se considera una propiedad local de los anillos de seis miembros de los HAP. Un sexteto π aromático se define como un anillo único similar al benceno, con seis electrones π localizados separados de los anillos adyacentes por enlaces simples formales C–C. Por ejemplo, la estructura de resonancia del fenantreno en la parte inferior de la Figura 4c tiene un sexteto π más que la de la parte superior, lo que, según el modelo de Clar, representa una descripción más realista del fenantreno. De hecho, la estructura de rayos X del fenantreno muestra que el enlace C9–C10 (ver Figura 4c) es el más corto de todos los enlaces C–C.[85] Según este modelo, los dos anillos externos del fenantreno son los más aromáticos, y el enlace C9–C10 es el más reactivo. Además, el fenantreno con dos sextetos π es más estable que su isómero antraceno, con un único sexteto π. La teoría y la computación han respaldado ampliamente las predicciones de la regla del sexteto π de Clar.[86-87]

La regla del sexteto π de Clar tiene una restricción esencial: solo puede utilizarse con especies bencenoides. Para superar esta limitación y extender la regla de Clar a los HCP no bencenoides, Glidewell y Lloyd formularon una regla más general que establece que la población total de electrones π en sistemas policíclicos conjugados tiende a formar los grupos $4n + 2$ más pequeños y a evitar la formación de los grupos $4n$ más pequeños.[28] Para sistemas bencenoides (es decir, HCPs con solo anillos de seis miembros), la regla de Glidewell y Lloyd se reduce a la regla del sexteto π de Clar. La Figura 4d muestra un ejemplo de un HCP no bencenoide, el biciclodeca[6.2.0]pentaeno, en el que la aplicación de la regla de Glidewell y Lloyd lleva a la conclusión de que la estructura en verde es más relevante que la estructura en rojo para explicar sus propiedades electrónicas y moleculares. La regla de Glidewell y Lloyd es seguida por la mayoría de los HCPs, según un estudio sistemático en una amplia serie de HCPs.[84]

Reglas para la aromaticidad tridimensional

A partir del análisis de boranos poliédricos, King y Rouvray,[88] primero en 1977 y posteriormente Aihara en 1978,[89] introdujeron el concepto de aromaticidad tridimensional (3D). Un estudio más reciente de Ottosson et al. identificó los prerrequisitos para que un compuesto químico pueda ser considerado aromático en 3D:[90] i) OM triplemente degenerados (al menos) como los encontrados en moléculas tetraédricas o de simetría superior; ii) una estructura electrónica de capa cerrada, que resulta en un conteo electrónico de $6n + 2$ en el caso de moléculas tetraédricas u octaédricas; iii) una extensa deslocalización electrónica que involucra a la molécula 3D completa, lo que lleva a la estabilización por resonancia; y iv) propiedades (optoelectrónicas y magnéticas) similares en las tres direcciones xyz. Algunos compuestos cumplen estas condiciones. Las primeras especies conocidas con aromaticidad 3D fueron los closo boranos, $[B_NH_N]^{2-}$, especies tienen una estructura de poliedro con caras triangulares y son altamente estables,[91] como los sistemas $[B_{10}H_{10}]^{2-}$ o $[B_{12}H_{12}]^{2-}$ y derivados, sintetizados a finales de la década de 1950.[22,92] Obedecen la regla de electrones $2N + 2$ de Wade, donde N es el número de vértices del poliedro o la regla de Mingos que es $4N + 2$.[93,94] Las dos reglas son equivalentes, pero la regla de Wade se refiere a los electrones de la caja (todos los electrones de valencia excepto los de los enlaces B–H), mientras que la regla de Mingos también incorpora los electrones de los enlaces B–H, por lo que el $4N + 2$ en la regla de Mingos designa el número total de electrones de valencia. Se ha demostrado que la regla de Wade-Mingos, formulada inicialmente para cúmulos de borano, también es aplicable a otros cúmulos de grupos principales, así como a fases e iones de Zintl.[95]

La regla de Wade-Mingos se refiere a la aromaticidad debida a la deslocalización electrónica de los electrones dentro de la caja poliédrica. La regla $2(n + 1)^2$ de Hirsch es una regla para la aromaticidad esférica de los electrones en la superficie de la esfera.[36] Se basa en que la ecuación de Schrödinger de un gas de electrones uniforme que rodea la superficie de una esfera es la misma que la del rotor rígido y, en consecuencia, las funciones de onda de este modelo se caracterizan por el número cuántico del momento angular l (l = 0, 1, 2…), similar a la situación encontrada para los orbitales atómicos. Cada nivel de energía está degenerado $2l + 1$ veces y, por lo tanto, las capas π están completamente llenas cuando tenemos 2, 8, 18, 32, 50, 72… electrones, es decir, $2(n + 1)^2$ electrones (n = 0, 1, 2…,). Considerando que el sistema de electrones π de un fulereno icosaédrico puede aproximarse al de un gas de electrones sobre una superficie esférica, entonces los fulerenos icosaédricos cargados como C_{20}^{2+}, C_{60}^{10+} y C_{70}^{2-} (pero no los neutros C_{20}, C_{60} o C_{70}, por ejemplo) entre otros, son fulerenos aromáticos, ya que tienen 18 (n = 2), 50 (n = 4) y 72 (n = 5) electrones, respectivamente. Los sistemas esféricos con un último nivel de energía con el mismo espín medio lleno y el resto doblemente lleno deberían ser aromáticos, de forma similar a como la regla $4n$ de Baird extiende la aromaticidad a los estados tripletes más bajos en energía. Esta aromaticidad esférica de capa abierta,[96] se alcanza cuando los compuestos esféricos tienen $2n^2 + 2n + 1$ electrones y un espín $S = n + ½$, como en el caso del C_{60}^{1-} con S = 11/2 (n = 5).

El modelo esférico de jellium,[14] que es un modelo cuántico exacto para el gas de electrones uniforme, pudo explicar satisfactoriamente las abundancias experimentales reportadas de metales alcalinos, alcalinotérreos y clústeres de oro de 2, 8, 18, 20, 34 y 40 átomos registrados en espectros de masas.[97] Los niveles de energía de los electrones de valencia para dicho modelo son $1S^21P^61D^{10}2S^21F^{14}2P^61G^{18}2D^{10}3S^21H^{22}2F^{14}3P^6$… y, por lo tanto, con 2, 8, 18, 20, 34, 40, 58, 68, 70, 92, 106, 112… electrones se obtiene una estructura electrónica de capa cerrada, y, en consecuencia, puede considerarse un jellium aromático. Similar a la regla de Wade-Mingos, la regla de jellium se refiere a la aromaticidad interna de los electrones de la caja, mientras que la regla de Hirsch describe la aromaticidad externa de los electrones deslocalizados en la superficie de las especies esféricas. Se ha formulado una regla de aromaticidad jellium de capa abierta,[16] equivalente a la regla de Baird. Finalmente, se han vinculado ciertas ocupaciones orbitales con aromaticidades de disco (de hecho esta es de tipo 2D),[98] cilíndricas,[99] octaédricas,[100] y cúbicas.[101]

Tipos de aromaticidad

La Tabla 1 contiene una lista no exhaustiva de más de 70 tipos de aromaticidad detectados en la literatura. A mediados del siglo XX, había únicamente dos tipos, la aromaticidad y la antiaromaticidad. Sin embargo, en las últimas décadas el número adjetivos unidos al concepto de aromaticidad ha crecido de forma incesante y nada parece indicar que se vaya a detener. La variedad de formas de aromaticidad enriquece el campo y demuestra que se trata de un concepto vivo, en continua evolución más de 200 años después del descubrimiento del bence-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2086

no. Sin embargo, esta proliferación también puede generar la impresión de un ámbito excesivamente frenético, inflacionario y apoyado en un concepto difuso. Si cualquier compuesto sintetizado puede considerarse aromático, el término corre el riesgo de devaluarse y perder su capacidad explicativa. Urge tomar conciencia del problema y evitar añadir adjetivos cuando sea posible. En algunos casos sucede que una misma situación se describe con diferentes adjetivos. Hay compuestos que son aromáticos en el estado fundamental (S_0) y en el primer estado excitado (T_1). Esta circunstancia se ha descrito como aromaticidad adaptativa, aromaticidad dual, aromaticidad de dos estados, y aromaticidad multiestado. Cada autor utiliza un término diferente con la esperanza que a la larga prevalezca el suyo. Sin embargo, esta práctica daña el concepto y debería evitarse. Por otro lado, sería recomendable que sustituyéramos, por ejemplo, la "*transition state aromaticity*" por "*the transition state is aromatic*" para reducir el número de adjetivos conectados con el concepto de aromaticidad. En su esencia, el fenómeno de la aromaticidad observado en un estado de transición de una reacción de Diels-Alder y en el benceno es el mismo, estabilización energética ligada a deslocalización electrónica en circuito cerrado, y, por consiguiente, no es necesario considerar la aromaticidad de este estado de transición como una aromaticidad diferente a la de los estados estacionarios estables. Finalmente comentar que una explicación de los diferentes tipos de aromaticidad más relevantes se puede encontrar en la ref. [102].

Tabla 1. Lista no exhaustiva de diferentes tipos de aromaticidad que se pueden encontrar en la literatura.

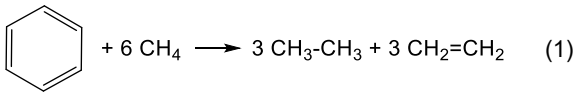
Extraídos de la ref. [71]	Otros
Pseudo, cuasi, tridimensional (3D), σ, σ*-, π-, δ-, φ-, y, doble, anti, homo, Hückel, Möbius, Craig-Möbius, metal or metala or metalo, múltiple, conflictiva, Shannon, hetero, super, bishomo, biciclo, homo-anti, bishomoanti, spiro, trishomo, antihomo, quelato, cruci, dihidro, heteroanti, heterohomo, homohetero, hidro, hiper, hiperconjugativa, mono, monohomo, no, pro, de disco, cuasianti, sila, pre, y cúbica.	Magnética, intrínsica, local, global, Baird, de estado excitado, adaptativa, de dos estados, dual, multiestado, híbrida Hückel-Baird, esférica, Hirsch, esférica de capa abierta, octaédrica, cilíndrica, captodativa, push-pull, Jellium de capa abierta, Clar, macrocíclica, de estado de transición, de anillos apilados, 2D-en-3D, inorgánica, tubular, all-metal, Heilbronner-Möbius, dinámica, Zimmerman-Möbius…

Medidas de aromaticidad

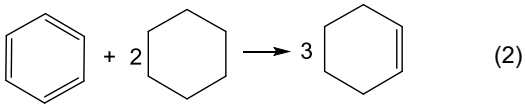
La aromaticidad es una propiedad física que no puede cuantificarse directamente mediante ningún experimento ni tampoco puede extraerse directamente de la función de onda mediante un operador, ya que no está bien definida. La medida de diversas características típicas de los compuestos aromáticos, como la estabilización energética, la igualación de la longitud de enlace, el comportamiento magnético ligado a las corrientes de anillo inducidas y la deslocalización electrónica, se utiliza para cuantificar indirectamente la aromaticidad de un compuesto determinado. Las siguientes subsecciones describen los descriptores de aromaticidad más utilizados de estas cuatro categorías. No hay un indicador de aromaticidad que funcione correctamente en todas las situaciones. En este sentido, es altamente recomendable usar varios descriptores de aromaticidad y que sean preferentemente de diferentes categorías.[103]

Medidas basadas en propiedades energéticas

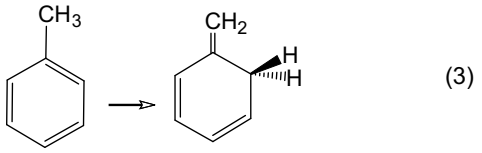
Como ya se ha comentado, la estabilidad energética debido a la deslocalización electrónica es una de las características más significativas del fenómeno de aromaticidad. La denominada energía de estabilización aromática (EEA) es quizás el parámetro más importante para evaluar la aromaticidad o antiaromaticidad de compuestos cíclicos conjugados. Se puede calcular teórica o experimentalmente a partir de reacciones isodésmicas,[104,105] u homodesmóticas adecuadas.[106,107] Las reacciones isodésmicas exigen un número igual de enlaces formales simples y dobles en productos y reactivos. Las reacciones homodesmóticas son un caso particular de reacciones isodésmicas en las que existe el mismo número de enlaces entre átomos dados en cada estado de hibridación. El número de átomos de hidrógeno unidos a los átomos en estados de hibridación dados también debe coincidir en productos y reactivos. Las reacciones homodesmóticas son preferidas porque minimizan los errores debidos a la compensación de tensión, hiperconjugación, efectos anoméricos, etc.[108] En el caso del benceno, se pueden construir varias reacciones isodésmicas u homodesmóticas. Como ejemplo de reacción isodésmica podemos considerar la siguiente:



y de reacción homodesmótica:



Cyránski recopiló quince EEAs del benceno calculadas a partir de reacciones isodésmicas y homodesmóticas con valores que oscilaban entre 66.9 y 18.4 kcal/mol.[109] Al considerar las correcciones de conjugación, hiperconjugación y protoramificación, las amplias divergencias de las evaluaciones de la EEA del benceno se reducen y se obtiene un valor de EEA de alrededor de 29 kcal/mol.[110,111] Finalmente comentar que un método muy usado para determinar EEAs son las energías de estabilización de isomerización (EEI) descritas por primera vez por Schleyer y Pühlhofer.[112] La EEI se obtiene a partir de la diferencia de energía entre un derivado de metilo de un anuleno y una especie isomérica con una conjugación acíclica y un grupo metileno exocíclico. En el caso del benceno, la EEI se deriva de la siguiente reacción:



Medidas basadas en propiedades electrónicas

Una de las características principales de los compuestos aromáticos es la deslocalización cíclica de electrones en circuitos de dos o tres dimensiones. Dado que esta deslocalización electrónica no es observable, no existe ningún aparato experimental que permita su medición. Desde un punto de vista teórico, existen varios descriptores electrónicos de aromaticidad y aquí mencionamos solo algunos de los más utilizados.[113,114]

El índice de fluctuación aromática (FLU),[115] mide la uniformidad de la deslocalización electrónica a lo largo del anillo molecular a partir de las diferencias con respecto a una molécula aromática de referencia, utilizando la ecuación (4):

© 2025 Real Sociedad Española de Química

$$FLU(\mathrm{A}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[\left(\frac{V(A_i)}{V(A_{i-1})}\right)^{\alpha}\left(\frac{\delta(A_i,A_{i-1})-\delta_{ref}(A_i,A_{i-1})}{\delta_{ref}(A_i,A_{i-1})}\right)\right] \quad (4)$$

donde el anillo considerado está formado por los átomos de la cadena $\{A\} = \{A_1, A_2, \ldots A_N\}$, $A_0 \equiv A_N$, la deslocalización atómica, *V(A)*, se define por la ecuación (5),

$$V(A) = \sum_{A\neq B}\delta(A,B) \quad (5)$$

y el índice de deslocalización entre los átomos *A* y *B*, *δ(A,B)*,[116,117] para funciones de onda monodeterminantales de capa cerrada, se obtiene de la ecuación (6),

$$\delta(A,B) = 4\sum^{occ.MO} S_{ij}(A)S_{ij}(B) \quad (6)$$

La suma en la ecuación (6) se aplica a todos los orbitales moleculares ocupados. $S_{ij}(A)$ es el solapamiento entre los orbitales moleculares *i* y *j* dentro de la cuenca del átomo *A*. En la ecuación (4), α vale 1 o -1 para asegurar que la razón de deslocalizaciones atómicas sea siempre mayor o igual a 1. Un sistema es más aromático cuanto menor sea el valor de FLU.

La definición del índice de deslocalización de la ecuación (6) puede generalizarse para estudiar el enlace multicéntrico mediante la definición de un índice de deslocalización multicéntrico entre los *N* centros A_1 a A_N. Según Giambiagi y colaboradores,[39] la forma del índice multicéntrico para funciones de onda monodeterminantales de capa cerrada viene dada por la ecuación (7):

$$I_{ring}(A) = 2^N\sum_{i_1,i_2,i_3\ldots,i_N}^{OCC} S_{i_1i_2}(A_1)S_{i_2i_3}(A_2)\ldots S_{i_Ni_1}(A_N) \quad (7)$$

Bultinck y colaboradores definieron un nuevo índice multicéntrico,[118] *MCI* como una extensión del índice I_{ring} según:

$$\mathrm{MCI}(A) = \frac{1}{2N}\sum_{P(A)} I_{ring}(A) \quad (8)$$

donde *P(A)* representa todas las permutaciones posibles entre los centros A_1 a A_N. Un sistema o un anillo es más aromático cuanto mayor sea el valor de I_{ring} y *MCI*.

Medidas basadas en propiedades geométricas

La igualación de la longitud de los enlaces constituye la base de los descriptores geométricos de la aromaticidad. Aunque se han publicado muchos descriptores de aromaticidad geométricos, el índice HOMA (modelo de oscilador armónico de aromaticidad) es el más utilizado. Se define como:[119,120]

$$HOMA = 1 - \frac{\alpha}{n}\sum_{i=1}^{n}(R_{opt} - R_i)^2 \quad (9)$$

donde n es el número de enlaces considerados y a es una constante empírica seleccionada para obtener HOMA = 0 para un sistema modelo no aromático. Cuando HOMA = 1, se asume que el sistema con todos los enlaces iguales a un valor óptimo de R_{opt} es completamente aromático. Para los enlaces C–C, C–N, C–O, N–N,[120] C–B,[121] y B–B,[122] α = 257.7, 93.5, 157.4, 130.3, 104.5 y 244.1, mientras que R_{opt} = 1.388, 1.334, 1.265, 1.309, 1.424 y 1.567 Å, respectivamente.

Medidas basadas en propiedades magnéticas

En presencia de un campo magnético externo, las moléculas (anti)aromáticas presentan una corriente de anillo que crea un campo magnético inducido proporcional al campo magnético externo B_0, según la ecuación (10):

$$\vec{B}_{ind} = -\vec{\vec{\sigma}}\vec{B}_o \quad (10)$$

donde $\vec{\vec{\sigma}}$ es el tensor de apantallamiento magnético. Si la molécula es aromática, produce una corriente de anillo diatrópica, mientras que las moléculas antiaromáticas generan corrientes de anillo paratrópicas. La intensidad de las corrientes de anillo puede utilizarse como indicador de aromaticidad. Cuanto más intensa sea la corriente de anillo, más (anti)aromática será la molécula. De hecho, una de las evidencias experimentales indirectas más claras de la presencia de una corriente de anillo la proporcionan los desplazamientos químicos observados por resonancia magnética nuclear (RMN). El campo magnético inducido afecta los desplazamientos químicos de los átomos de H unidos a anillos (anti)aromáticos.[123] En especies aromáticas, el campo magnético inducido en la posición de los átomos de H tiene la misma dirección que el campo externo y los protones en los anillos aromáticos aparecen a desplazamientos químicos más altos en comparación con los protones vinílicos. Lo mismo, pero al revés, pasa en los anillos antiaromáticos. Los valores de RMN de ^{1}H pueden tomarse como una medida de aromaticidad.

El desplazamiento químico independiente del núcleo (NICS) es un índice de aromaticidad simple y ampliamente disponible.[37] Se define como el valor del apantallamiento isotrópico absoluto calculado en el centro de un anillo o en algún otro punto de interés del sistema cambiado de signo. Se obtiene promediando los elementos diagonales del tensor de apantallamiento magnético en la ecuación (10) en todas las direcciones, como se muestra en la ecuación (11):

$$NICS = -\frac{1}{3}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) = -\sigma_{av} \quad (11)$$

El NICS puede calcularse en cualquier punto del espacio, si bien normalmente se calcula en el centro del anillo. Los anillos aromáticos suelen tener un NICS negativo calculado en el centro del anillo (NICS(0)). Cuanto más negativo sea el valor de NICS, más aromático será el anillo. Cabe destacar que el NICS en el centro del anillo de benceno, que es de -8.9 ppm, es el resultado de un NICS(π) negativo de -20.7 ppm y un NICS(σ) positivo de 13.8 ppm.[72] Para eliminar el efecto de los electrones σ que no están relacionados con la aromaticidad, se puede usar NICS(1), es decir, el valor de NICS a 1 Å por encima o por debajo del centro del plano del anillo, que se considera que refleja mejor los efectos de los electrones π,[124] o con el componente tensorial fuera del plano correspondiente ($\mathrm{NICS(1)}_{zz}$). Otra opción es usar la contribución π del componente tensorial de apantallamiento magnético fuera del plano calculado en el centro del anillo o a 1 Å por encima o por debajo del plano del anillo ($\mathrm{NICS(0)}_{\pi zz}$ y $\mathrm{NICS(1)}_{\pi zz}$, respectivamente). Entre muchas definiciones relacionadas con NICS en compuestos orgánicos, se ha obtenido que $\mathrm{NICS(1)}_{zz}$ y $\mathrm{NICS(0)}_{\pi zz}$ son las mejores medidas de aromaticidad basadas en el cálculo de NICS.[125] Aunque su uso está ampliamente extendido, el NICS no está exento de críticas.[126-128]

Tests de aromaticidad

Todos los índices que hemos visto en los apartados anteriores representan aproximaciones (a veces arbitrarias) al problema de la medición de la aromaticidad, y no existe una propiedad única que pueda considerarse una medida directa de la aromaticidad. Como ya se ha dicho los índices existentes desgraciadamente no siempre dan resultados consistentes entre sí. Así, por ejemplo, las predicciones basadas en criterios magnéticos de aromaticidad a menudo se desvían de las basadas en crite-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

rios energéticos.[129] Sería conveniente disponer de herramientas que nos indicaran que índices son más fiables. Afortunadamente, la experiencia química acumulada proporciona ejemplos en los que la mayoría de los químicos coincidirían en las tendencias esperadas de aromaticidad para una serie dada de compuestos. En un trabajo de hace unos años, utilizamos una serie de estos ejemplos para formular pruebas de aromaticidad y aplicarlas a un grupo de índices.[130,131] Entre los índices seleccionados, los que dieron mejores resultados fueron los índices electrónicos y, en particular, el MCI, aunque ninguno de los índices está exento de crítica dado que todos ellos fallaron en algunas de las pruebas.

Conclusiones

El concepto de aromaticidad ha evolucionado a lo largo de los 200 años que han transcurrido desde el descubrimiento del benceno. Lo que inicialmente era aromaticidad del estado fundamental se ha extendido a los estados excitados, lo que era aromaticidad de especies estables ahora también afecta a los estados de transición, lo que era aromaticidad en hidrocarburos cíclicos π-conjugados se ha ampliado a aromaticidad de especies metálicas, la aromaticidad en dos dimensiones ha incorporado una tercera dimensión y lo que era aromaticidad π ahora es también aromaticidad σ, δ o ϕ. La cuantificación de la aromaticidad se basa en estudios de diversas propiedades observadas en compuestos aromáticos, como la igualación de la longitud de enlace, la estabilización energética, el comportamiento magnético relacionado con las corrientes de anillo generadas y la deslocalización electrónica. Estas características se han utilizado para definir una amplia variedad de índices de aromaticidad, incluyendo índices estructurales, energéticos, magnéticos y electrónicos. Es recomendable utilizar más de una escala de aromaticidad al examinar la aromaticidad de un grupo de sustancias. Por otro lado, la existencia de reglas de aromaticidad que especifican el número necesario de electrones para alcanzar este atributo facilita la identificación de sustancias aromáticas.

Agradecimientos

El autor de este artículo manifiesta su agradecimiento a la Agencia Española de Investigación (MICIU/AEI/10.13039/501100011033) por el proyecto PID2023-147424NB-I00 y a la Generalitat de Catalunya por el proyecto 2021SGR623 y el premio ICREA Academia 2024. También quiere hacer constar la gratitud a la Dra. Sílvia Escayola por la Figura 1.

Bibliografía

[1] M. Faraday, *Philos. Trans. R. Soc. London* **1825**, *115*, 440-446, https://doi.org/10.1098/rstl.1825.0022.
[2] E. Mitscherlich, *Ann. Pharm.* **1834**, *9*, 39-48, https://doi.org/10.1002/jlac.18340090103.
[3] A. W. Hofmann, *Proc. R. Soc. Lond.* **1856**, *8*, 1-3, https://doi.org/10.1098/rspl.1856.0002.
[4] A. Kekulé, *Bull. Soc. Chim. Fr. (Paris)* **1865**, *3*, 98-110.
[5] T. Anderson, *Trans. R. Soc. Edinburgh* **1868**, *25*, 205-216, https://doi.org/10.1039/JS8692200406.
[6] R. Willstätter, E. Waser, *Ber. Dtsch Chem. Ges.* **1911**, *44*, 3423-3445, https://doi.org/10.1002/cber.191104403216.
[7] A. Stock, E. Pohland, *Ber. Dtsch Chem. Ges.* **1926**, *59*, 2215-2223, https://doi.org/10.1002/cber.19260590907.
[8] K. Lonsdale, *Trans. Faraday Soc.* **1929**, *25*, 352-366, https://doi.org/10.1039/TF9292500352.
[9] E. Hückel, *Z. Physik* **1931**, *70*, 204-286, https://doi.org/10.1007/BF01339530.
[10] E. Hückel, *Z. Physik* **1931**, *72*, 310-337, https://doi.org/10.1007/BF01341953.
[11] E. Hückel, *Z. Physik* **1932**, *76*, 628-648, https://doi.org/10.1007/BF01341936.
[12] E. Hückel, *Z. Elektrochemie* **1937**, *43*, 827-849, https://doi.org/10.1002/bbpc.19370431016.
[13] W. v. E. Doering, F. L. Detert, *J. Am. Chem. Soc.* **1951**, *73*, 876-877, https://doi.org/10.1021/ja01146a537.
[14] E. Wigner, F. Seitz, *Phys. Rev.* **1933**, *43*, 804-810, https://doi.org/10.1103/PhysRev.43.804.
[15] Z. Luo, A. W. Castleman, *Acc. Chem. Res.* **2014**, *47*, 2931-2940, https://doi.org/10.1021/ar5001583.
[16] J. Poater, M. Solà, *Chem. Commun.* **2019**, *55*, 5559-5562, https://doi.org/10.1039/C9CC02067E.
[17] M. G. Evans, E. Warhust, *Trans. Faraday Soc* **1938**, *34*, 614-624, https://doi.org/10.1039/TF9383400614.
[18] W. v. E. Doering, L. H. Knox, *J. Am. Chem. Soc.* **1954**, *76*, 3203-3206, https://doi.org/10.1021/ja01641a027.
[19] C. E. Johnson, F. A. Bovey, *J. Chem. Phys.* **1958**, *29*, 1012-1014, https://doi.org/10.1063/1.1744645.
[20] H. C. Longuet-Higgins, L. Salem, *Proc. Roy. Soc. A* **1959**, *251*,172-185, https://doi.org/10.1098/rspa.1959.0100.
[21] S. Winstein, *J. Am. Chem. Soc.* **1959**, *81*, 6524-6525, https://doi.org/10.1021/ja01533a052.
[22] W. N. Lipscomb, A. R. Pitochelli, M. F. Hawthorne, *J. Am. Chem. Soc.* **1959**, *81*, 5833-5834, https://doi.org/10.1021/ja01530a073.
[23] W. H. Knoth, H. C. Miller, D. C. England, G. W. Parshall, E. L. Muetterties, *J. Am. Chem. Soc.* **1962**, *84*, 1056-1057, https://doi.org/10.1021/ja00865a040.
[24] E. Heilbronner, *Tetrahedron Lett.* **1964**, *5*, 1923-1928, https://doi.org/10.1016/S0040-4039(01)89474-0.
[25] D. Ajami, O. Oeckler, A. Simon, R. Herges, *Nature* **2003**, *426*, 819-821, https://doi.org/10.1038/nature02224.
[26] E. Clar, *The Aromatic Sextet*, Wiley, New York, **1972**, https://doi.org/10.1002/zfch.19730130531.
[27] M. Solà, *Front. Chem.* **2013**, *1*, 22, https://doi.org/10.3389/fchem.2013.00022.
[28] C. Glidewell, D. Lloyd, *Tetrahedron* **1984**, *40*, 4455-4472, https://doi.org/10.1016/S0040-4020(01)98821-0.
[29] N. C. Baird, *J. Am. Chem. Soc.* **1972**, *94*, 4941-4948, https://doi.org/10.1021/ja00769a025.
[30] R. Breslow, H. W. Chang, R. Hill, E. Wasserman, *J. Am. Chem. Soc.* **1967**, *89*, 1112-1119, https://doi.org/10.1021/ja00981a015.
[31] M. Saunders, R. Berger, A. Jaffe, J. M. McBride, J. O'Neill, R. Breslow, J. M. Hoffmann Jr., C. Perchonock, E. Wasserman, R. S. Hutton, V. J. Huck, *J. Am. Chem. Soc.* **1973**, *95*, 3017-3018, https://doi.org/10.1021/ja00790a049.
[32] M. J. S. Dewar, *Bull. Soc. Chim. Belg.* **1979**, *88*, 957-967, https://doi.org/10.1002/bscb.19790881201.
[33] J. Chandrasekhar, E. D. Jemmis, P. v. R. Schleyer, *Tetrahedron Lett.* **1979**, *20*, 3707-3710, https://doi.org/10.1016/S0040-4039(01)95503-0.
[34] G. P. Elliott, W. R. Roper, J. M. Waters, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* **1982**, 811-813, https://doi.org/10.1039/C39820000811.
[35] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, *Nature* **1985**, *318*, 162-163, https://doi.org/10.1038/318162a0.
[36] A. Hirsch, Z. Chen, H. Jiao, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2000**, *39*, 3915-3917, https://doi.org/10.1002/1521-3773(20001103)39:21<3915::AID-ANIE3915>3.0.CO;2-O.
[37] P. v. R. Schleyer, C. Maerker, A. Dransfeld, H. Jiao, N. J. R. van Eikema Hommes, *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, *118*, 6317-6318,

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.1021/ja960582d.
[38] M. Bühl, C. van Wüllen, *Chem. Phys. Lett.* **1995**, *247*, 63-68, https://doi.org/10.1016/0009-2614(95)01193-6.
[39] M. Giambiagi, M. S. de Giambiagi, C. D. dos Santos, A. P. de Figueiredo, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2000**, *2*, 3381-3392, https://doi.org/10.1039/B002009P.
[40] A. E. Kuznetsov, K. A. Birch, A. I. Boldyrev, H.-J. Zhai, L.-S. Wang, *Science* **2003**, *300*, 622-625, https://doi.org/10.1126/science.1082477
[41] H.-J. Zhai, B. B. Averkiev, D. Y. Zubarev, L.-S. Wang, A. I. Boldyrev, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, *46*, 4277-4280, https://doi.org/10.1002/anie.200700442.
[42] M. Hoffmann, C. J. Wilson, B. Odell, H. L. Anderson, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, *46*, 3122-3125, https://doi.org/10.1002/anie.200604601.
[43] A. C. Tsipis, C. E. Kefalidis, C. A. Tsipis, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 9144-9155, https://doi.org/10.1021/ja802344z.
[44] B. Peerless, A. Schmidt, Y. J. Franzke, S. Dehnen, *Nature Chem.* **2023**, *15*, 347-356, https://doi.org/10.1038/s41557-022-01099-5.
[45] D. W. Szczepanik, M. Sola, *ChemRxiv, preimpresión* **2023**, https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2023-dkvdg-v2.
[46] K. Kaiser, L. M. Scriven, F. Schulz, P. Gawel, L. Gross, H. L. Anderson, *Science* **2019**, *365*, 1299-1301, https://doi.org/10.1126/science.aay1914.
[47] G. V. Baryshnikov, R. R. Valiev, A. V. Kuklin, D. Sundholm, H. Ågren, *J. Phys. Chem. Lett.* **2019**, *10*, 6701-6705, https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.9b02815.
[48] C. Dai, D. Chen, J. Zhu, *Chem. Asian J.* **2020**, *15*, 2187-2191, https://doi.org/10.1002/asia.202000528.
[49] N. D. Charistos, A. Muñoz-Castro, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2020**, *22*, 9240-9249, https://doi.org/10.1039/D0CP01252A.
[50] P. W. Fowler, N. Mizoguchi, D. E. Bean, R. W. A. Havenith, *Chem. Eur. J.* **2009**, *15*, 6964-6972, https://doi.org/10.1002/chem.200900322.
[51] C. Pan, Z. Liu, *ChemPhysChem* **2025**, *26*, e202400912, https://doi.org/10.1002/cphc.202400912.
[52] M. Solà, D. W. Szczepanik, *Pure & Appl. Chem.* **2025**, *97*, 1149-1157, https://doi.org/10.1515/pac-2025-0465.
[53] M. Baranac-Stojanović, *Chem. Asian J.* **2025**, *20*, e202500295, https://doi.org/10.1002/asia.202500295.
[54] Y.-H. Xu, W.-J. Tian, A. Muñoz-Castro, G. Frenking, Z.-M. Sun, *Science* **2023**, *382*, 840-843, https://doi.org/10.1126/science.adj6491.
[55] C.-C. Shu, D. W. Szczepanik, A. Muñoz-Castro, M. Solà, Z.-M. Sun, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 14166-14173, https://doi.org/10.1021/jacs.4c03024.
[56] Y.-S. Huang, H.-L. Xu, W.-J. Tian, Z.-S. Li, S. Escayola, M. Solà, A. Muñoz-Castro, Z.-M. Sun, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 9407-9414, https://doi.org/10.1021/jacs.4c16401.
[57] G. Binsch, *Naturwissenschaften* **1973**, *60*, 369-374, https://doi.org/10.1007/BF00602510.
[58] A. T. Balaban, *Pure & Appl. Chem.* **1980**, *52*, 1409-1429, https://doi.org/10.1351/pac198052061409.
[59] D. Lloyd, *J. Chem. Inf. Comp. Sci.* **1996**, *36*, 442-447, https://doi.org/10.1021/ci950158g.
[60] T. M. Krygowski, M. K. Cyrański, Z. Czarnocki, G. Häfelinger, A. R. Katritzky, *Tetrahedron* **2000**, *56*, 1783-1796, https://doi.org/10.1016/S0040-4020(99)00979-5.
[61] A. Stanger, *Chem. Commun.* **2009**, 1939-1947, https://doi.org/10.1039/B816811C.
[62] R. Hoffmann, *Am. Sci.* **2015**, *103*, 18-22, https://doi.org/10.1511/2015.112.18.
[63] M. Solà, *Front. Chem.* **2017**, *5*, 22, https://doi.org/10.3389/fchem.2017.00022.
[64] G. Merino, M. Solà, I. Fernández, C. Foroutan-Nejad, P. Lazzeretti, G. Frenking, H. L. Anderson, D. Sundholm, F. P. Cossío, M. A. Petrukhina, J. Wu, J. I. Wu, A. Restrepo, *Chem. Sci.* **2023**, *14*, 5569-5576, https://doi.org/10.1039/D2SC04998H.
[65] I. Agranat, *Struct. Chem.* **2024**, *35*, 715-720, https://doi.org/10.1007/s11224-024-02328-y.
[66] M. Baranac-Stojanović, *Chemistry* **2025**, *7*, 127, https://doi.org/10.3390/chemistry7040127.
[67] H. Ottosson, *Chem. Sci.* **2023**, *14*, 5542-5544, https://doi.org/10.1039/D3SC90075D.
[68] S. Escayola, *Exploring the Boundaries of Aromaticity Through Computational Analysis of Excited States and Complex Molecular Topologies*, Universitat de Girona, Girona, **2024**.
[69] M. Solà, F. M. Bickelhaupt, *J. Chem. Educ.* **2022**, *99*, 3497-3501, https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.2c00523.
[70] G. Frenking, A. Krapp, *J. Comput. Chem.* **2007**, *28*, 15-24, https://doi.org/10.1002/jcc.20543.
[71] J. Grunenberg, *Int. J. Quantum Chem.* **2017**, *117*, e25359, https://doi.org/10.1002/qua.25359.
[72] Z. Chen, C. S. Wannere, C. Corminboeuf, R. Puchta, P. v. R. Schleyer, *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 3842-3888, https://doi.org/10.1021/cr030088+.
[73] J.-P. Dognon, C. Clavaguéra, P. Pyykkö, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, *46*, 1427-1430, https://doi.org/10.1002/anie.200604198.
[74] M. Solà, *Nature Chem.* **2022**, *14*, 585-590, https://doi.org/10.1038/s41557-022-00961-w.
[75] R. Breslow, *Chem. Eng. News* **1965**, *43*, 90-100, https://doi.org/10.1021/ar50072a001.
[76] R. Breslow, *Acc. Chem. Res.* **1973**, *6*, 393-398, https://doi.org/10.1021/ar50072a001.
[77] A. Soncini, P. W. Fowler, *Chem. Phys. Lett.* **2008**, *450*, 431-436, https://doi.org/10.1016/j.cplett.2007.11.053
[78] M. Mandado, A. M. Graña, I. Pérez-Juste, *J. Chem. Phys.* **2008**, *129*, 164114, https://doi.org/10.1063/1.2999562.
[79] R. Herges, *Chem. Rev.* **2006**, *106*, 4820-4842, https://doi.org/10.1021/cr0505425.
[80] H. S. Rzepa, *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 3697-3715, https://doi.org/10.1021/cr030092l.
[81] D. P. Craig, N. L. Paddock, *Nature* **1958**, *181*, 1052-1053, https://doi.org/10.1038/1811052a0.
[82] M. Rosenberg, C. Dahlstrand, K. Kilså, H. Ottosson, *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 5379-5425, https://doi.org/10.1021/cr300471v.
[83] J. R. Platt, *J. Chem. Phys.* **1949**, *17*, 484-495, https://doi.org/10.1063/1.1747293.
[84] O. El Bakouri, J. Poater, F. Feixas, M. Solà, *Theor. Chem. Acc.* **2016**, *135*, 205, https://doi.org/10.1007/s00214-016-1970-1.
[85] M. I. Kay, Y. Okaya, D. E. Cox, *Acta Cryst. B* **1971**, *27*, 26-33, https://doi.org/10.1107/S0567740871001663.
[86] M. Randić, *Chem. Phys. Lett.* **2014**, *601*, 1-5, https://doi.org/10.1016/j.cplett.2014.03.073.
[87] G. Portella, J. Poater, M. Solà, *J. Phys. Org. Chem.* **2005**, *18*, 785-791, https://doi.org/10.1002/poc.938.
[88] R. B. King, D. H. Rouvray, *J. Am. Chem. Soc.* **1977**, *99*, 7834-7840, https://doi.org/10.1021/ja00466a014.
[89] J. Aihara, *J. Am. Chem. Soc.* **1978**, *100*, 3339-3342, https://doi.org/10.1021/ja00479a015.
[90] O. El Bakouri, D. W. Szczepanik, K. Jorner, R. Ayub, P. Bultinck, M. Solà, H. Ottosson, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 8560-8575, https://doi.org/10.1021/jacs.1c13478.
[91] M. P. Pitt, M. Paskevicius, D. H. Brown, D. A. Sheppard, C. E. Buckley, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 6930-6941, https://

© 2025 Real Sociedad Española de Química

doi.org/10.1021/ja400131b.
[92] A. R. Pitochelli, F. M. Hawthorne, *J. Am. Chem. Soc.* **1960**, *82*, 3228-3229, https://doi.org/10.1021/ja01497a069.
[93] K. Wade, *J. Chem. Soc. D: Chem. Commun.* **1971**, 792-793, https://doi.org/10.1039/C29710000792.
[94] D. M. P. Mingos, *Nature Phys. Sci.* **1972**, *236*, 99-102, https://doi.org/10.1038/physci236099a0.
[95] C. Liu, I. A. Popov, Z. Chen, A. I. Boldyrev, Z.-M. Sun, *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 14583-14597, https://doi.org/10.1002/chem.201801715.
[96] J. Poater, M. Solà, *Chem. Commun.* **2011**, *47*, 11647-11649, https://doi.org/10.1039/c1cc14958j.
[97] N. Cohen, S. W. Benson, *Chem. Rev.* **1993**, *93*, 2419-2438, https://doi.org/10.1021/cr00023a005.
[98] T. B. Tai, R. W. A. Havenith, J. L. Teunissen, A. R. Dok, S. D. Hallaert, M. T. Nguyen, A. Ceulemans, *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 10595-10600, https://doi.org/10.1021/ic401596s.
[99] L. V. Duong, H. T. Pham, N. M. Tam, M. T. Nguyen, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16*, 19470-19478, https://doi.org/10.1039/C4CP01996B.
[100] O. El Bakouri, M. Duran, J. Poater, F. Feixas, M. Solà, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, *18*, 11700-11706, https://doi.org/10.1039/C5CP07011B.
[101] P. Cui, H.-S. Hu, B. Zhao, J. T. Miller, P. Cheng, J. Li, *Nature Commun.* **2015**, *6*, 6331, https://doi.org/10.1038/ncomms7331.
[102] M. Solà, en *Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering, vol. 2*, Elsevier, **2023**, pp. 189-209, https://doi.org/10.1016/B978-0-12-821978-2.00061-1.
[103] J. Poater, I. García-Cruz, F. Illas, M. Solà, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2004**, *6*, 314-318, https://doi.org/10.1039/B309965B.
[104] W. J. Hehre, R. Ditchfiel, L. Radom, J. A. Pople, *J. Am. Chem. Soc.* **1970**, *92*, 4796-4801, https://doi.org/10.1021/ja00719a006.
[105] J. A. Pople, L. Radom, W. J. Hehre, *J. Am. Chem. Soc.* **1971**, *93*, 289-300, https://doi.org/10.1021/ja00731a001.
[106] P. George, M. Trachtman, C. W. Bock, A. M. Brett, *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2* **1976**, 1222-1227, https://doi.org/10.1039/P29760001222.
[107] P. George, M. Trachtman, C. W. Bock, A. M. Brett, *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2* **1977**, 1036-1047, https://doi.org/10.1039/P29770001036.
[108] M. K. Cyrański, P. v. R. Schleyer, T. M. Krygowski, H. Jiao, G. Hohlneicher, *Tetrahedron* **2003**, *59*, 1657-1665, https://doi.org/10.1016/S0040-4020(03)00137-6.
[109] M. K. Cyrański, *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 3773-3811, https://doi.org/10.1021/cr0300845.
[110] M. D. Wodrich, C. S. Wannere, Y. Mo, P. D. Jarowski, K. N. Houk, P. v. R. Schleyer, *Chem. Eur. J.* **2007**, *13*, 7731-7744, https://doi.org/10.1002/chem.200700602.
[111] A. Ciesielski, D. K. Stepień, M. A. Dobrowolski, Ł. Dobrzycki, M. K. Cyrański, *Chem. Commun.* **2012**, *48*, 10129-10131, https://doi.org/10.1039/C2CC33974A.
[112] P. v. R. Schleyer, F. Pühlhofer, *Org. Lett.* **2002**, *4*, 2873-2876, https://doi.org/10.1021/ol0261332.
[113] M. Solà, A. I. Boldyrev, M. C. Cyrański, T. M. Krygowski, G. Merino, *Aromaticity and Antiaromaticity: Concepts and Applications*, Wiley-VCH, New York, **2023**, https://doi.org/10.1002/9781119085928.
[114] F. Feixas, E. Matito, J. Poater, M. Solà, *Chem. Soc. Rev.* **2015**, *44*, 6434-6451, https://doi.org/10.1039/C5CS00066A.
[115] E. Matito, M. Duran, M. Solà, *J. Chem. Phys.* **2005**, *122*, 014109, https://doi.org/10.1063/1.1824895.
[116] X. Fradera, M. A. Austen, R. F. W. Bader, *J. Phys. Chem. A* **1999**, *103*, 304-314, https://doi.org/10.1021/jp983362q.
[117] J. Poater, M. Solà, M. Duran, X. Fradera, *Theor. Chem. Acc.* **2002**, *107*, 362-371, https://doi.org/10.1007/s00214-002-0356-8.
[118] P. Bultinck, R. Ponec, S. Van Damme, *J. Phys. Org. Chem.* **2005**, *18*, 706-718, https://doi.org/10.1002/poc.922.
[119] J. Kruszewski, T. M. Krygowski, *Tetrahedron Lett.* **1972**, *13*, 3839-3842, https://doi.org/10.1016/S0040-4039(01)94175-9.
[120] T. M. Krygowski, M. K. Cyrański, *Chem. Rev.* **2001**, *101*, 1385-1419, https://doi.org/10.1021/cr990326u.
[121] K. K. Zborowski, I. Alkorta, J. Elguero, L. M. Proniewicz, *Struct. Chem.* **2012**, *23*, 595-600, https://doi.org/10.1007/s11224-011-9907-8.
[122] K. K. Zborowski, I. Alkorta, J. Elguero, L. M. Proniewicz, *Struct. Chem.* **2013**, *24*, 543-548, https://doi.org/10.1007/s11224-012-0109-9.
[123] R. H. Mitchell, *Chem. Rev.* **2001**, *101*, 1301-1315, https://doi.org/10.1021/cr990359.
[124] C. Corminboeuf, T. Heine, G. Seifert, P. v. R. Schleyer, J. Weber, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2004**, *6*, 273-276, https://doi.org/10.1039/B313383B.
[125] H. Fallah-Bagher-Shaidaei, C. S. Wannere, C. Corminboeuf, R. Puchta, P. v. R. Schleyer, *Org. Lett.* **2006**, *8*, 863-866, https://doi.org/10.1021/ol0529546.
[126] P. Lazzeretti, *Prog. Nucl. Magn. Res. Spectr.* **2000**, *36*, 1-88, https://doi.org/10.1016/S0079-6565(99)00021-7.
[127] P. Lazzeretti, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2004**, *6*, 217-223, https://doi.org/10.1039/B311178D.
[128] R. Islas, G. Martínez-Guajardo, J. O. C. Jiménez-Halla, M. Solà, G. Merino, *J. Chem. Theory Comput.* **2010**, *6*, 1131-1135, https://doi.org/10.1021/ct100098c.
[129] J. Aihara, *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 2873-2879, https://doi.org/10.1021/ja056430c.
[130] F. Feixas, E. Matito, J. Poater, M. Solà, *J. Comput. Chem.* **2008**, *29*, 1543-1554, https://doi.org/10.1002/jcc.20914.
[131] F. Feixas, J. O. C. Jiménez-Halla, E. Matito, J. Poater, M. Solà, *J. Chem. Theory Comput.* **2010**, *6*, 1118-1130, https://doi.org/10.1021/ct100034p.

Miquel Solà

Institut de Química Computacional i Catàlisi y Departament de Química, Universitat de Girona, 17003 Girona

C-e: miquel.sola@udg.edu
ORCID: 0000-0002-1917-7450

Doctorado con premio extraordinario (UAB, 1991). Tras varios meses en una consultoría, se traslada a la Universidad de Girona (UdG). Realiza investigación post-doctoral con los Profs. Baerends y Ziegler. Desde 2003 es catedrático en la UdG. Recibe el premio ICREA Academia en 2009, 2014 y 2024, en 2013 el premio de química física de la RSEQ y en 2025 la medalla de la RSEQ, en 2019 el reconocimiento de miembro honorario de la Sociedad Polaca de Química y en 2023 es nombrado fellow de la Royal Society of Chemistry. Es coautor de más de 500 artículos (h = 77), 43 capítulos de libro, un libro y ha dirigido 28 tesis doctorales.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 287-291
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2091

La revista de la Real Sociedad Española de Química

INVESTIGACIÓN QUÍMICA

"200" Aniversario del descubrimiento del Benceno y su papel en el "100" Aniversario de la Mecánica Cuántica

"200" Aniversary of the discovery of benzene and its role in the "100" Aniversary of quantum mechanics

Juan Casado

Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga.
Instituto Universitario de Investigación de Nanomateriales y Nanotecnología -IMANA-, Universidad de Málaga.

PALABRAS CLAVE:
Benceno
Mecánica cuántica
Híbrido de resonancia
Aromaticidad
Grafeno

RESUMEN:
La encrucijada de fechas que supone el año 2025 entre el descubrimiento del benceno en 1825 y el de la Mecánica Cuántica en 1925, se usa como motivo para describir los principales hitos que el autor considera sobre la aplicación de la Mecánica Cuántica al conocimiento de la estructura electrónica de la molécula de benceno (híbrido de resonancia y aromaticidad). Igualmente, se resaltan algunas enseñanzas clave que ha proporcionado la Mecánica Cuántica a la compresión de la estructura del grafeno y que son relevantes desde un punto de vista químico, conceptos tales como estructuras en zigzag metálica o *arm-chair* semiconductoras.

KEYWORDS:
Benzene
Quantum mechanics
Resonance hybrid
Aromaticity
Graphene

ABSTRACT:
The crossroad represented by this 2025 year between the discovery of benzene in 1825 and quantum mechanics in 1925, is taken to describe the main milestones that emerged when quantum mechanics was applied to the interpretation of the electronic structure of benzene (resonance hybrid and aromaticity). Also, the comprehensive understanding of the electronic shape of graphene owing to quantum mechanics is revealed through the description of chemically intuitive concepts such as *zigzag* or *arm-chair* structures.

Introducción

En el presente año 2025 se conmemora, quizás con pocas celebraciones, el 200 aniversario del descubrimiento de la molécula de benceno por Michael Faraday.[1] La importancia de la molécula de benceno en el desarrollo de la química básica y fundamental (i.e., compresión del enlace químico entre átomos) y en química aplicada es incuestionable. Por ello, el presente número de la revista Anales de Química va a subrayar aspectos de actual relevancia del benceno y de sus herederos en su 200 "cumpleaños". Simultáneamente, en este año 2025, también se celebra el 100 aniversario del "descubrimiento" de la Mecánica Cuántica que sitúa dicho hito en la presentación de la ecuación de Schrödinger revelada por Erwin Schrödinger en el histórico año de 1925.[2] Por tales motivos, Naciones Unidas proclamó el año 2025 como el Año Internacional de la Ciencia y las Tecnologías Cuánticas (IYQ). [3]

Esta encrucijada de fechas (Figura 1) me ha hecho reflexionar sobre la relevancia que tuvo, ha tenido y tiene la Química en el desarrollo de la Mecánica Cuántica. Esta reflexión está alimentada por la personal impresión del escaso papel de la Química Cuántica en las celebraciones del IYQ. A riesgo de estar equivocado en esta afirmación, revelándola en positivo, me lleva a dejar las tareas más cotidianas en Química Física y centrarme en describir el papel de la Química en la Mecánica Cuántica, y nada mejor que tomar el benceno como sustrato reconociblemente químico sobre el que evaluar y destacar el papel único de la Química Cuántica. Los hitos que se destacan a continuación son los más relevantes en opinión del autor, por ello, ya disculpo por adelantado la inintencionada omisión de

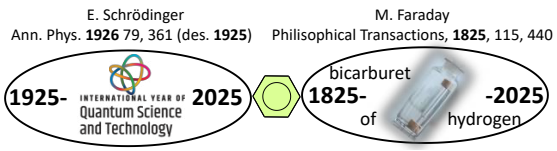


Figura 1. Logo del "*International Year of Quantum Science and Technology*" conmemorando el descubrimiento de la ecuación de Schrödinger en 1925 (publicada en 1926) junto a la muestra de benceno destilada por Faraday del aceite de ballena en 1825 (se muestra en la *Royal Society of Chemistry* en Londres). Faraday nombra a este desconocido compuesto como "*bicarburet of hydrogen*"; posteriormente, Eilhard Mitscherlich en 1933 acuña el nombre de "benceno".

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: J. Casado. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 287-291, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2091

* C-e: casado@uma.es

Manuscrito recibido: 24/10/2025 · aceptado: 05/12/2025

otros ejemplos que seguramente serán igual de pertinentes. En resumen, en este artículo se describe el papel fundamental de la Química Cuántica en la Mecánica Cuántica y se reclama su papel en los eventos que la Física celebra en este IYQ 2025.

Animado por esta situación, y dicho sea de paso, todo catalizado por el profesor Nazario Martín León, incombustible motor de una parte de la mejor química de moléculas aromáticas basadas en benceno que se hace en España, me propongo describir los hitos de la Mecánica Cuántica relacionados con la molécula de benceno. La combinación de Química Cuántica y benceno ha permitido un profundo conocimiento de las propiedades energéticas y electrónicas del mismo; y, visto de otro modo, los estudios cuánticos sobre el benceno han aportado significativamente al desarrollo de la Química Cuántica. A continuación, se presentan los datos desde un punto de vista "cualitativo" (i.e., en muchos casos también se muestran las expresiones analíticas de las funciones de onda pertinentes) con énfasis en establecer una secuencia conductora, conceptual y temporal, entre los diversos ejemplos.

1. Las primeras aplicaciones de la Mecánica Cuántica sobre sistemas químicos o moléculas

El primer cálculo mecano-cuántico sobre una molécula lo realiza el físico danés Øyvind Burrau en 1927 considerando el ion positivo de la molécula de hidrógeno, H_2^+.[4] La resolución de la ecuación de Schrödinger en coordenadas elípticas confocales del H_2^+ proporciona soluciones exactas, pero poco o nada intuitivas. Alternativamente, se desarrolla la metodología de resolución aproximada de la ecuación de Schrödinger para este mismo H_2^+ consistente en proponer una solución genérica, tal que una combinación lineal de orbitales atómicos (CLOA, del átomo de H), y pedirle a la ecuación de Schrödinger que nos proporcione la mejor solución de entre todas las de esta forma (método variacional). Solemos decir que la solución CLOA es muy **intuitiva** lo cual es lógicamente así pues forzamos a que lo sea. La intuición de la solución CLOA radica en que en ésta nos aparecen los cambios o evolución de los orbitales atómicos de partida tras la formación de la molécula H_2^+, lo que relacionamos con la formación del ***enlace químico***. La solución CLOA del H_2^+ es la primera descripción en Química Cuántica, entendida como la aplicación de la Mecánica Cuántica a moléculas. Se deduce desde el punto de vista físico que 1 electrón es compartido por 2 núcleos proporcionando una solución de menor energía que la de los átomos por separado. Esta comparación matemática es muy sugerente y entronca con la mística de la Mecánica Cuántica. En cierta forma, la "imposibilidad" de entender la solución exacta y la preferencia por la solución aproximada nos indica que la realidad (solución exacta) es muy compleja, de modo que nos conformamos o estamos limitados a entender una propia proyección de la compleja realidad (nuestra proyección en forma de una solución combinación lineal).

Este ejemplo de la solución de H_2^+ puede emplearse en la enseñanza de la Química Cuántica para destacar cómo el nuevo paradigma de la Mecánica Cuántica difiere sustancialmente de la interpretación clásica. En Física Clásica, la solución electrostática del problema de dos cargas puntuales positivas situadas a una distancia dada (fija) y compartiendo una carga negativa puntual proporciona una solución metaestable (máximo de energía) para la carga negativa situada a la mitad de distancia en el eje entre las cargas positivas. En Mecánica Cuántica, el estado físico asimilable es la molécula H_2^+ con 1 electrón compartido entre las dos cargas positivas de los núcleos. Aquí, resulta que la interpretación probabilística y ondulatoria de la función de onda hace que dicho estado (electrón compartido por los dos núcleos sobre el eje entre ellos) sea un mínimo absoluto de energía y, por ello, perpetuamente estable. La reflexión de esta comparación clásico-cuántica nos revela que la materia del Universo se sostiene gracias a la realidad cuántica de la misma.

En 1927, Heitler y London describen la aplicación de la Mecánica Cuántica al problema completo del enlace químico para la molécula de H_2.[5] Aquí aparece la primera interpretación del enlace químico entre átomos por la nueva física, ahora ya con los ingredientes fundamentales de la nueva teoría cuántica: ecuación de Schrödinger y función de onda y principio de exclusión de Pauli.

La primera resolución mecano-cuántica aproximada del H_2 se realizan mediante la aplicación de la teoría del enlace de valencia, i.e., TEV. Dicha teoría representa la versión mecano-cuántica más próxima a las teorías previas del enlace químico, fundamentalmente la de Lewis (i.e., los enlaces químicos se forman apareando pares de electrones, ver Figura 2). El carácter intuitivo de la TEV es evidente, pues construimos la función de onda a partir de pares de electrones agrupados según la fórmula estructural de la molécula. La función de onda se completa tomando combinaciones lineales de todos estos pares (enlaces) de electrones. Todo, conjuntamente, hizo que la TEV fuese inicialmente la más utilizada en las soluciones de la Mecánica Cuántica al estudio de moléculas. Tal forma de la función de onda representa la visión del enlace químico en la que el electrón de cada átomo se intercambia con el núcleo vecino, "compartiéndose" así los electrones (enlace covalente).

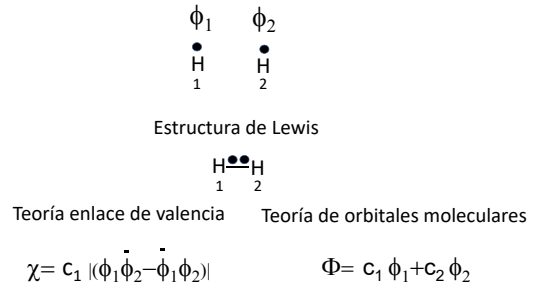


Figura 2. Fórmula estructural (estructura de Lewis) de la molécula de H_2 definiéndose un enlace químico sencillo entre los dos átomos de hidrógeno. Función de onda en la teoría del enlace de valencia para la molécula de H_2 a partir de las funciones de onda de los orbitales 1s del átomo de hidrógeno (ϕ_1 y ϕ_2). Así cada enlace químico (de Lewis) se convierte en una función de onda tal como se muestra en el H_2. También se indica la solución de la Teoría de Orbitales Moleculares que supone una combinación lineal directa de los orbitales atómicos 1s de cada átomo de hidrógeno. Funciones de onda sin normalizar.

2. Las primeras aplicaciones de la Mecánica Cuántica a la molécula de benceno

En este contexto de la TEV se propone la aplicación de la mecánica cuántica para la resolución de la estructura electrónica de la molécula de benceno en 1933.[6,7] Merece la pena mencionar con cierto detalle esta primera solución mecano-cuántica del benceno realizada con la TEV.

La función de onda del estado fundamental del benceno en la TEV se construye tomando como base las estructuras electrónicas propuestas hasta ese año 1933 para la molécula de benceno y que eran fundamentalmente las estructuras de enlaces alternantes de Kékulé y las de Dewar tal, tal y como se repre-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

sentan en la Figura 3 (i.e., en esta figura también se representan otras estructuras propuestas posteriormente y denominadas iónicas). Esta función de onda propuesta parte de la separación de los electrones π de los electrones σ, reteniendo sólo las contribuciones de los 6 orbitales p_z, uno de cada átomo.

La función de onda mecano-cuántica proporcionada (i.e., los coeficientes que aparecen en la función de onda propuesta) por la descripción TEV del benceno en su estado fundamental muestra que los coeficientes de las estructuras de Kekulé (i.e., con enlaces dobles y simples alternantes) son los mayores y además iguales. Esto indica que el peso de ambas estructuras es idéntico y, por tanto, no diferenciables. Pauling interpreta este hecho como que la estructura compuesta de ambas formas de Kekulé es una solución de menor energía que las estructuras de Kekulé por separado (i.e., teoría de variaciones) abriendo paso a la aparición del concepto de **resonancia** (híbridos de resonancia).[6] Esta nueva interpretación supera la existente, propuesta por Kekulé, y en la que las dos formas con enlaces dobles y simples alternantes se intercambiaban rápidamente dando lugar a una estructura intermedia dinámicamente en equilibrio en la que todos los enlaces CC son idénticos. La solución de la función de onda TEV del benceno ahora establece que ambas son indistinguibles (no se intercambian) resultado de que ambas participan con las mismas amplitudes de probabilidad; por ello, la estructura final es el resultado de la superposición mecano-cuántica de ambas formas.

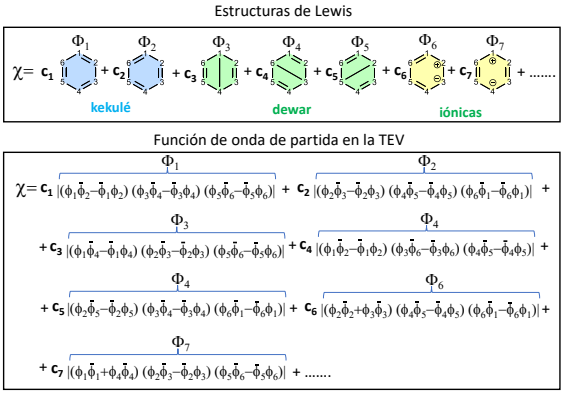


Figura 3. Estructuras de Lewis más relevantes del benceno, en particular, las estructuras de pre-mecano-cuánticas de Kekulé y Dewar son claramente intuitivas. Función de onda para el estado fundamental de la molécula de benceno según la teoría del enlace de valencia primeramente desarrollada por Heitler y London en la molécula de H_2. Cada función ϕ representa la función de onda de un electrón *pz* del átomo de carbono y éste acompañado de un guion en la parte superior indica el espín β (i.e., la ausencia de guion representa electrón con espín α). Nótese la correspondencia de los coeficientes c_n en la descripción cualitativa y cuantitativa de la función de onda del benceno.

2. La teoría de Hückel de Orbitales Moleculares aplicada al benceno

La entrada de la teoría de orbitales moleculares para describir la estructura electrónica del benceno es anterior a la TEV, en 1931, con el trabajo fundacional de Erich Hückely la aparición de la teoría de Hückel de orbitales moleculares, i.e., HMO.[8] La teoría HMO se diferencia de la TEV en la función de onda de partida que se propone, y que se compone de un orbital p_z por cada átomo para todos los átomos que contribuyan al sistema en cuestión. En el caso del benceno, asumiendo igualmente la separación entre electrones s y p, serían 6 orbitales p_z para 6 átomos (i.e., 6 electrones en total). Por tanto, la función de onda de partida no establece ningún requerimiento sobre la estructura química de la molécula (solamente el número de electrones en orbitales p_z); por ejemplo, la función de onda es analíticamente igual para benceno que para hexatrieno, ambos compuestos de 6 electrones p, tal y como se muestra en la Figura 4. La conectividad entre átomos que diferencia a hexatrieno y benceno se introduce en la forma del determinante secular en la Figura 4 (ver coeficientes en rojo en los determinantes respectivos de una y otra molécula). Consecuentemente, la teoría HMO, y en general la teoría de orbitales moleculares, adolece de la intuición química que se refleja claramente en la TEV al construir la función de onda de partida desde los enlaces compartidos entre pares de átomos. Dicho de otro modo, mientras que los coeficientes c_1 y c_2 en la función de onda del estado fundamental del benceno en la TEV dan cuenta del peso de las estructuras de Lewis de Kekule (Figura 3), los coeficientes c_1 y c_2 (amplitudes de probabilidad) en las funciones de onda de los orbitales moleculares resultantes de la teoría HMO dan cuenta del peso de cada orbital atómico en el orbital molecular.

Con los orbitales moleculares del benceno en la HMO se introduce el concepto de orbitales deslocalizados (i.e., función de onda electrónica deslocalizada) que da lugar a un nuevo paradigma en la teoría químico-cuántica tal que la comprensión de la estructura electrónica de moléculas en términos de **deslocalización electrónica** (i.e., la densidad electrónica está repartida por los seis átomos de carbono del benceno).

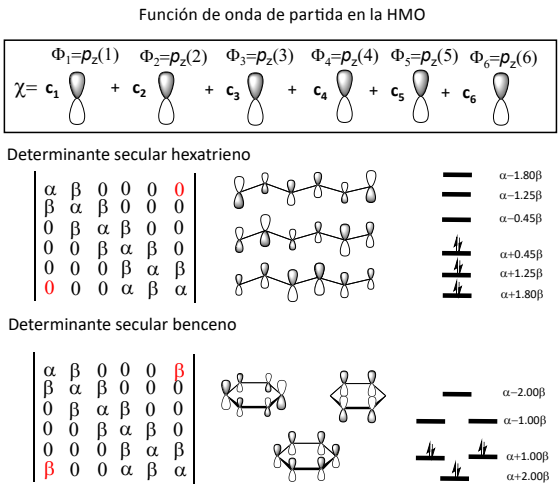


Figura 4. Función de onda de partida en la teoría de Hückel de orbitales moleculares. La combinación lineal genérica de orbitales atómicos p_z es común al hexatrieno y benceno. La distinción entre ambos compuestos en la HMO aparece en los determinantes seculares (ver componentes en rojo) debido a la diferente conectividad entre átomos. Se representan pictóricamente las funciones de onda de los orbitales ocupados del hexatrieno y benceno, así como sus energías según la teoría HMO.

La aplicación de la teoría HMO al benceno comparada con su aplicación al ciclobutadieno resultó explicar la diferencia de estabilidad entre uno (E_T=6a+8b) y otro (E_T=4a+2b) compuesto. A pesar de que ambos tienen formas resonantes kekulianas posibles y sus orbitales moleculares son similarmente deslocalizados, tal como se muestra en la Figura 5. La teoría HMO da cuenta de la mayor estabilidad del benceno frente al ciclobutadieno y, de modo general, explica satisfactoriamente la particular estabilidad de los compuestos π-cíclicos con un numero 4n+2 de electrones respecto a los parientes con 4n

© 2025 Real Sociedad Española de Química

electrones, o **aromaticidad**, en justa referencia a los compuestos aromáticos o basados en benceno. La particular estabilidad por aromaticidad encuentra una justificación intuitiva y lógica dentro del concepto de deslocalización electrónica en teoría de orbitales moleculares (mayor deslocalización implica menor confinamiento electrónico y consecuentemente menor energía o mayor estabilidad). Hoy día existe una importante comunidad de químicos dedicados a los estudios de aromaticidad y en la definición de índices que den cuenta de ella, entre ellos varios índices relacionados con la deslocalización electrónica.[9] La panoplia de compuestos orgánicos e inorgánicos a los que se le aplica el concepto de aromaticidad para analizar sus propiedades de estabilidad es, a día de hoy, enorme.

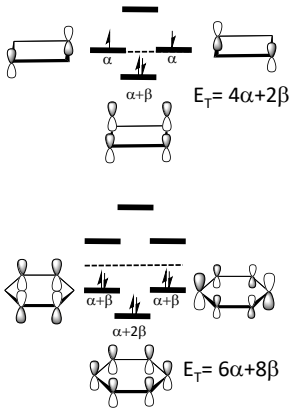


Figura 5. Representación pictórica de las funciones de onda de los orbitales ocupados y semiocupados del benceno y ciclobutadieno así como sus energías según la teoría HMO.

3. Cien años de contribución de la química cuántica a compuestos bencenoides: el grafeno

El parentesco estructural y electrónico entre benceno y grafeno no requiere mucha más explicación. La aplicación por primera vez de la Mecánica Cuántica al grafeno la realiza Philip R. Wallace en 1947 en la búsqueda de la descripción cuántica del grafito (i.e., en ese momento el grafito era un material de moda gracias a sus propiedades conductoras de la electricidad y también al usarse en reactores nucleares en creciente desarrollo tras la Segunda Guerra Mundial).[10]

El tratamiento cuántico del grafeno parte de las mismas asunciones que la del benceno, u otros, consistente en el establecimiento de una función de onda de partida o prueba (i.e., intuitiva) y posterior resolución de la ecuación de Schrödinger. Al ser grafeno un sistema periódico bidimensional, debemos partir de una función de onda que contenga dicha propiedad periódica, lo que se introduce con una función de Bloch definida en el espacio recíproco (espacio de momentos, k, y distancias R en espacio recíproco). La función de onda se completa multiplicando dicha función de Bloch por una combinación lineal de las funciones de onda atómica relevantes (orbital p_z del carbono) de cada uno de los dos átomos de la base de la red, tal y como se muestra en la Figura 6.

Esta función de onda es incorporada en la ecuación de Schrödinger considerando un hamiltoniano en la aproximación de *tight binding model* en la que, tal y como en la teoría de Hückel, se consideran sólo los electrones π y las interacciones a vecinos. La ecuación secular contiene dos elementos (combinación lineal de dos sumandos provenientes de la descripción de los dos átomos de la base de la red), cuya resolución da lugar a la aparición de dos bandas cuyos espectros de energía en

$$\Phi = \sum_{R'} e^{ikR'} C_A \phi_A(r-R') + \sum_{R'} e^{ikR'} C_B \phi_B(r-R')$$

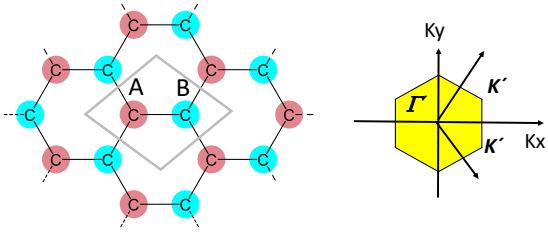


Figura 6. Función de onda de partida (se omite el factor de normalización) como combinación lineal de las funciones atómicas p_z de los átomos A y B en la resolución mecano-cuántica de la ecuación de Schrödinger para el grafeno (solamente con electrones π). La parte exponencial (en color) corresponden a las funciones de Bloch para reproducir la estructura periódica bidimensional. Abajo, i) a la derecha, red cristalina real (hexagonal) del grafeno donde cada color indica los átomos distintos en la estructura; ii) a la izquierda se representa la red recíproca (espacio de momentos) indicando los puntos relevantes de la primera zona de Brillouin.

función de los dos vectores de ondas del eje x (k_x) e y (k_y) en la primera zona de Brillouin (espacio recíproco) se representa en la Figura 7a. Como cada átomo proporciona un electrón, la banda de menor energía está totalmente llena (banda de valencia) mientras que la banda de mayor energía está completamente vacía (banda de conducción).

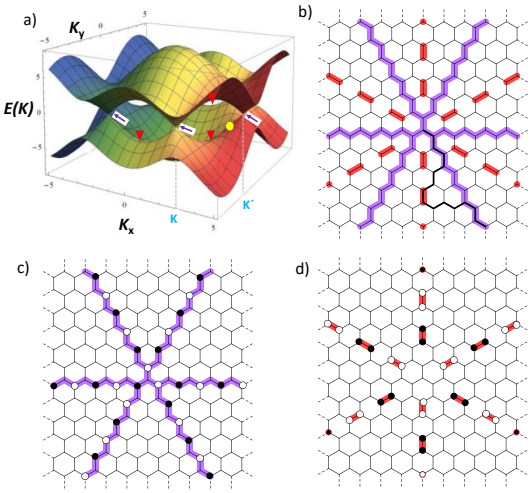


Figura 7. Figura 7. a) Representación de la energía de la estructura de bandas de grafeno donde se indican los puntos de Dirac (se muestran algunos con flechas violetas), los mínimos entre puntos de Dirac (se muestran algunos con triángulos rojos) y con círculo amarillo algún punto entre el mínimo local y el punto de Dirac. Se indican también algunos puntos característicos de la primera zona de Brillouin (Γ, K y K´); b) estructuras en zigzag y *arm-chair* asociadas a los puntos de Dirac y valles (mínimos locales) destacadas en color violeta y rojo respectivamente; c) estructura orbitálica de las estructuras zigzag; y d) estructura orbitálica de las estructuras arm-chair.

En esta representación de la energía frente a momento existen 6 puntos característicos donde las bandas de valencia y conducción se tocan a la altura energética del nivel de Fermi del sistema, o **puntos de Dirac**. Dichos puntos de contacto forman conos denominados **conos de Dirac** (i.e., las estructuras de dichos conos de Dirac determinan parte de las propiedades más rompedoras de grafeno, por ejemplo, el comportamiento relativista

© 2025 Real Sociedad Española de Química

de estos electrones). Como el contacto se produce en un punto, la densidad de estados a esta energía es muy baja y se revela el comportamiento semimetálico del grafeno. El comportamiento metálico del grafeno se obtiene por dopado, bien tipo *p*- o tipo *n*-, por oxidación o reducción. Los 6 puntos en los conos de Dirac forman un hexágono revelando la simetría hexagonal de la estructura. Entre cada dos puntos de Dirac hay un valle con un mínimo local de energía donde existe una diferencia neta de energía entre la banda de valencia y de conducción y que corresponden a zonas con comportamiento semiconductor. Desplazándonos desde estos mínimos hasta los puntos de Dirac, el gap de energía entre la banda de valencia y de conducción se reduce.

La interpretación de la estructura electrónica del grafeno puede trasladarse cualitativamente a su estructura molecular (más afín a la interpretación química) del modo que sigue. Los 6 puntos de Dirac del grafeno se representan en la Figura 7b y corresponden a secuencias *all-trans* de los sucesivos enlaces entre átomos consecutivos, denominados estructuras en **zigzag** y que, supuesto un punto central, parten ramificadamente describiendo la simetría hexagonal (ver estructuras coloreados en violeta en Figura 7b). Por su parte, los 6 valles (mínimos locales) que existen entre cada dos puntos de Dirac corresponden a secuencias de enlaces entre átomos no conectados directamente y que se sitúan sobre estructuras *all-cis* y que se denominan estructuras ***arm-chair*** (ver estructuras coloreados en rojo en Figura 7b). Igualmente partiendo de un punto central, las estructuras *arm-chair* se despliegan hexagonalmente entre cada dos estructuras zigzag. Finalmente, si tomamos un punto (amarillo en Figura 7a) situado entre un punto de Dirac y un mínimo, su energía viene dictada por la contribución de una parte *arm-chair* y una zigzag (dependiendo del contenido relativo de una y otra la energía será más cercana al punto de Dirac o al mínimo).

Las estructuras en zigzag tienen una composición orbitálica que se asemeja a orbitales cristalinos no-enlazantes, en los que no existen dos átomos de carbono consecutivos que contengan contribución p_z. El carácter no-enlazante de estos orbitales del cristal revela intuitivamente que se sitúen en el nivel de Fermi del grafeno (punto de Dirac) tal y como se muestra en la Figura 7c. Por otra parte, en los mínimos en los valles entre puntos de Dirac, los orbitales tienen contribuciones enlazantes entre los carbonos unidos de las estructuras *arm-chair,* lo que reduce la energía respecto al nivel de Fermi, tal y como se muestra en la Figura 7d. Es interesante indicar la relevancia actual de las nanocintas de grafeno,[11] (i.e., *graphene nanoribons*) donde los estados no-enlazantes en las estructuras *zig-zag* se desplazan hacia la periferia de dichas estructuras y pasan a denominarse **estados de borde** (*edge states*) donde se revelan igualmente las propiedades topológicas de estos sistemas. Los estados de borde sobre estructuras en *zig-zag* se revelan con comportamiento metálico mientras que los bordes con estructura *arm-chair* son semiconductores. La física de grafeno y de las nanocintas de grafeno y su comprensión mecano-cuántica primero y su validación experimental después, ha supuesto en los últimos 30 años una de las más importantes contribuciones a la física de la materia condensada.

Conclusiones

En este artículo aprovechamos la encrucijada de fechas entre el 200 aniversario del descubrimiento por Michael Faraday del benceno y el 100 aniversario de la ecuación de Schrödinger por Erwin Schrödinger que supone la aparición de la Mecánica Cuántica (este año 2025 celebra el IYQ). Para ello, se repasan los primeros cálculos químico-cuánticos sobre la molécula de benceno que aparecen casi inmediatamente después de la Mecánica Cuántica. Dichos cálculos abarcan el uso de la teoría de enlace de valencia primeramente y de la teoría de orbitales moleculares (teoría de Hückel) después. Se destacan las primeras definiciones emergentes de la aplicación de la teoría cuántica al benceno, como híbridos de resonancia o aromaticidad. Finalmente, aunque algunos años después, se mencionan también las bases de la aplicación de la Mecánica Cuántica por primera vez al grafeno, y se repasan los principales conceptos estructurales que se utilizan hoy en día para la compresión de las estructuras de grafeno en física de materia condensada, tales como las nanocintas de grafeno.

Agradecimientos

Agradezco la lectura detallada de este manuscrito y de los subsiguientes comentarios, cambios y/o adiciones por parte de los profesores de Química Física, Francisco Javier Ramírez Aguilar y Enrique Ortí Guillén.

Bibliografía

[1] M. Faraday, *Philosophical Transactions*, **1825**, 115, 440, https://doi.org/10.1098/rstl.1825.0022.
[2] E. Schrödinger, *Ann. Phys.* **1926**, *79*, 361, https://doi.org/10.1002/andp.19263840404.
[3] UNESCO, "International Year of Quantum Science and Technology" disponible en https://www.unesco.org/en/years/quantum-science-technology, (consultado: 15/12/2025).
[4] Ø. Burrau, *Naturwissenschaften* **1927**, *15* (16-17), 1, https://doi.org/10.1007/BF01504875.
[5] W. Heitler, F. London, *Zeitschrift für Physik*, **1927**, *44*, 455-472, https://doi.org/10.1007/BF01397394.
[6] L. Pauling, *J. Chem. Phys.*, **1933**, *1*, 280, https://doi.org/10.1063/1.1749284.
[7] L. Pauling, G.W.J. Wheland, *J. Chem. Phys.*, **1933**, *1*, 362, https://doi.org/10.1063/1.1749304.
[8] E. Hückel, *J. Chem. Phys.*, **1931**, *70*, 104-186, https://doi.org/10.1007/BF01339530.
[9] M. Solá, *Nat. Chem.*, **2022**, 585-590, https:/ doi.org/10.1038/s41557-022-00961-w.
[10] P. R. Wallace, *Phys. Rev.*, **1947**, *71*, 622-644, https:/ doi.org/10.1103/PhysRev.71.622.
[11] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B*, **1996**, *54*, 17954-17961, https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.17954.

Juan Casado

Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, Campus de Teatinos, s/n, 9071 Málaga. Instituto Universitario de Investigación de Nanomateriales y Nanotecnología IMANA, Universidad de Málaga

C-e: casado@uma.es
ORCID: 0000-0003-0373-1303

Catedrático de Química Física en la Universidad de Málaga. Licenciatura y Doctorado en Ciencias Químicas por la Universidad de Málaga. Premio Jóvenes Investigadores y Premio de Investigación de Excelencia por la Real Sociedad Española de Química en 2005 y 2018. Reconocimientos de *Author Profile* y *Top Author* por la revista *Angewandte Chemie International Edition* y Fellow de la Royal Society of Chemistry. Su grupo de investigación "Física de Moléculas" se dedica a la caracterización espectroscópica y fotofísica de moléculas conjugadas y de capa abierta. También desarrolla una línea de investigación de propiedades moleculares quirales.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 292-301
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2099

La revista de la Real Sociedad Española de Química

INVESTIGACIÓN QUÍMICA

Nanografenos moleculares: el legado del benceno en la química del carbono

Molecular nanographenes: The legacy of benzene in carbon chemistry

Juan Lión-Villar[1], Patricia Izquierdo-García[1], Jesús M. Fernández-García[1] y Nazario Martín[2,*]

[1] *Departamento de Química Orgánica I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid.*

[2] *IMDEA-Nanociencia, Campus de Cantoblanco, Madrid.*

PALABRAS CLAVE:
Benceno
Carbono
Aromaticidad
Grafeno
Nanografenos

RESUMEN:

Este artículo describe la versatilidad estructural del carbono y la evolución conceptual desde el benceno hasta los nanomateriales de carbono. Expone el papel de la aromaticidad, desde las propuestas de Kekulé hasta las reglas de Hückel y Clar, y cómo estos principios explican estabilidad y reactividad en hidrocarburos aromáticos policíclicos. Analiza el surgimiento del grafeno y otros materiales 2D, así como el desarrollo de nanografenos con propiedades electrónicas modulables mediante tamaño, bordes y defectos. Se detalla la relevancia de la quiralidad en nanografenos moleculares y la influencia de las barreras de racemización en sus propiedades ópticas. Finalmente, se destacan las bicapas quirales y cómo el grado de solapamiento controla su comportamiento electroquímico y optoelectrónico.

KEYWORDS:
Benzene
Carbon
Aromaticity
Graphene
Nanographenes

ABSTRACT:

The article outlines carbon's structural versatility and the conceptual path from benzene to carbon nanomaterials. It reviews aromaticity, from Kekulé's proposals to Hückel's and Clar's rules, explaining stability and reactivity in polycyclic aromatic hydrocarbons. It then examines graphene and other 2D materials, followed by nanographenes whose electronic properties depend on size, edge structure, and defects. Molecular nanographenes with induced chirality are discussed, emphasizing how racemization barriers control chiroptical behavior. The article concludes with chiral bilayer nanographenes, showing how interlayer overlap governs their electrochemical and photophysical properties, establishing bilayer effects as a design tool for tuning optoelectronic performance.

Alótropos de carbono: del macromundo al nanomundo

El carbono es uno de los elementos químicos naturales más versátiles y abundantes de la Tabla Periódica, ya que posee la capacidad de formar diversos alótropos, cada uno con propiedades estructurales, mecánicas y electrónicas distintas (Figura 1). Su capacidad para combinar orbitales en distintas geometrías le permite adoptar hibridaciones sp, sp^2 y sp^3, lo que facilita la formación de una amplia diversidad de estructuras. Estas incluyen estructuras nanométricas cero-dimensionales (0D), como los fullerenos y los puntos de carbono,[1,2] unidimensionales (1D), como los nanotubos de carbono;[3] bidimensionales (2D), como el grafeno o el γ-grafino;[4,5] y los clásicos alótropos tridimensionales (3D) macroscópicos como el grafito y el diamante.

Cada uno de estos alótropos presenta propiedades y aplicaciones distintivas. Por ejemplo, el diamante, una red tridimensional de átomos de carbono con hibridación sp^3, es conocido por su extrema dureza y alta conductividad térmica. En contraste, el grafito, compuesto por láminas de átomos de carbono con hibridación sp^2 dispuestos en una red hexagonal, presenta una excelente conductividad eléctrica a lo largo de los planos, pero una débil unión entre capas, dominada por fuerzas de van der

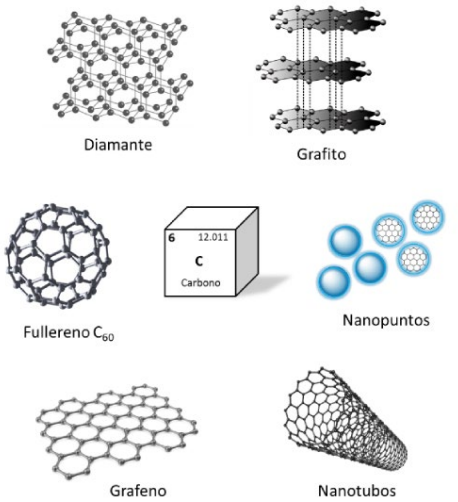


Figura 1. Alótropos del carbono más representativos.

CÓMO CITAR: J. Lión-Villar, P. Izquierdo-García, J.M. Fernández García, N. Martín. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 292-301, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2099

* C-e: nazmar@ucm.es

Manuscrito recibido: 20/11/2025 · aceptado: 05/12/2025

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Waals.[6] La singular estructura en capas de este material permite su exfoliación, lo que resultó clave para el aislamiento posterior del grafeno, una lámina de grosor atómico derivada del grafito.[7] Con el desarrollo de la nanotecnología y la computación, los alótropos del carbono podrían ampliarse para incluir otras nanoformas y abrir nuevos campos de investigación como nuevos materiales en electrónica, almacenamiento de energía o biomedicina, entre otros.

Benceno y aromaticidad: un viaje de 200 años

El fascinante viaje que conecta moléculas sencillas con los nanomateriales de carbono más avanzados comenzó con una molécula icónica: el benceno. En 1825,[8] Michael Faraday aisló esta molécula por primera vez al fraccionar el fluido obtenido del denominado "gas portátil", empleado como combustible en las farolas londinenses, marcando el inicio de dos siglos de exploración en química aromática. Faraday nombró inicialmente a esta sustancia como "bicarburo de hidrógeno", deduciendo una composición C_6H_3 basada en un peso equivalente del hidrógeno estimado de forma incorrecta en aquel tiempo. En 1833, Eilhard Mitscherlich realizó análisis elementales y determinó que el benceno presentaba una proporción de carbono a hidrógeno de 1:1, lo que corresponde a la fórmula empírica CH.[9] La notable estabilidad del benceno desafiaba las expectativas de los hidrocarburos insaturados conocidos hasta el momento. Este hallazgo despertó un gran interés por la estructura del benceno y los compuestos relacionados – llamados aromáticos por Hofmann debido a su olor característico – y representó uno de los primeros pasos en la comprensión de este grupo de moléculas orgánicas.[10]

En 1865 Friedrich August Kekulé introdujo la idea del benceno como una estructura cíclica de fórmula molecular C_6H_6, defendiendo esta estructura a partir de evidencias empíricas.[11] La estructura molecular se refinó con el tiempo hasta que, en 1872, Kekulé representó finalmente el icónico anillo del benceno con enlaces simples y dobles alternos que intercambian rápidamente su posición (Figura 2), algo que hoy en día puede visualizarse mediante técnicas avanzadas de microscopía.[12] Las implicaciones de la teoría estructural de Kekulé fueron enormes, tanto para el desarrollo de la ciencia química como para las aplicaciones tecnológicas, siendo ampliamente reconocida como una de las ideas más revolucionarias del siglo XIX.[13]

En 1931, Erich Hückel formuló los requisitos de una molécula para ser considerada aromática, la conocida regla de los "4n+2 electrones π", mediante la cual se podían identificar los compuestos aromáticos.[14,15] Sin embargo, esta regla es estrictamente válida para sistemas monocíclicos conjugados. Para explicar el comportamiento de todos los hidrocarburos policíclicos, cuarenta años después Erich Clar propuso un enfoque más general en su libro *The Aromatic Sextet*.[16] La regla de Clar establece que la estructura de resonancia de Kekulé con el mayor número de sextetes aromáticos π disjuntos – seis electrones π localizados en un anillo de tipo benceno, separados por enlaces simples C–C de los anillos adyacentes – es la más relevante a la hora de caracterizar las propiedades de los hidrocarburos aromáticos policíclicos (del inglés, PAHs). Por tanto, cuantos más sextetes de Clar tenga una molécula, mayor será su estabilidad. Las particularidades químicas de la mayoría de los PAHs son consecuencia directa de la aplicación de los postulados de Clar. Por ejemplo, las posiciones más reactivas del antraceno (y de otros acenos) son las posiciones 9 y 10, ya que una funcionalización química en el anillo central produce dos sextetes de Clar en el producto de reacción. De forma similar, según la estructura por difracción

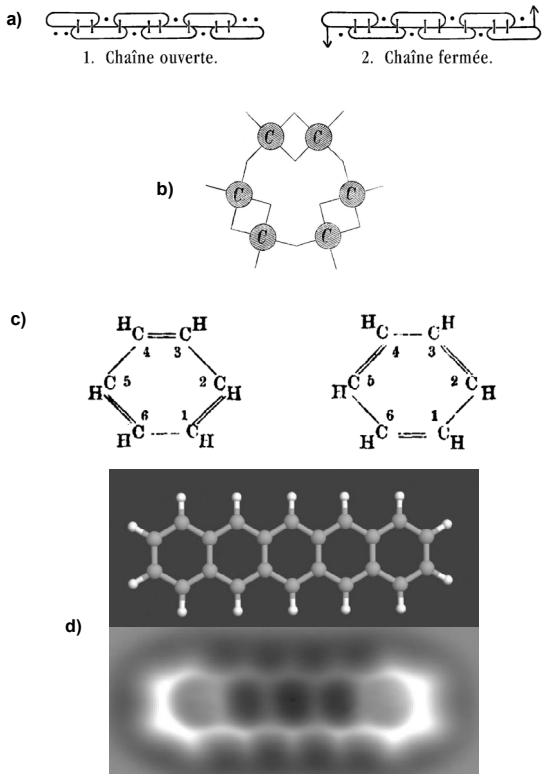


Figura 2. Representaciones del benceno realizadas por Kekulé en los años 1865 (a), 1866 (b) y 1872 (c). Molécula de pentaceno visualizada por nc-AFM (d). Adaptado de Refs. [12] y [13].

de rayos X del fenantreno, el enlace C–C más corto corresponde al doble enlace del anillo central en la estructura de Clar (Figura 3). A pesar de sus limitaciones, la utilidad de la regla del sextete de Clar como herramienta intuitiva, sencilla y eficaz para predecir y explicar la mayoría de las propiedades en especies polibencenoides es incuestionable.[17]

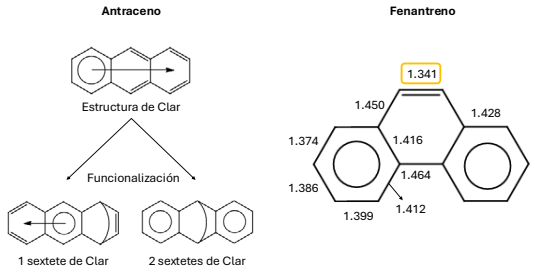


Figura 3. Izquierda: estructura de Clar del antraceno, antes y después de su funcionalización química. Derecha: distancias de enlace experimentales del fenantreno, en Å.

La estabilidad excepcional del benceno, frente a otras moléculas insaturadas como el ciclooctatetraeno o el ciclobutadieno, se explica por la aromaticidad, que refleja la deslocalización cíclica de electrones π en un sistema conjugado. Aunque fundamental en química, la aromaticidad sigue siendo un concepto no directamente medible, evaluable únicamente a través de sus efectos observables sobre propiedades estructurales y reactivas.[18] Las definiciones suelen basarse en observables experimentales y en magnitudes obtenidas por cálculos teóricos, pero aún hoy los científicos seguimos buscando un índice global de aromaticidad para caracterizar las propiedades generales de los compuestos aromáticos. En este sentido, se enumeran a con-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

tinuación los diferentes criterios aceptados actualmente como indicadores de aromaticidad:

- **Electrónicos**: La deslocalización cíclica de electrones en un circuito cerrado de átomos genera una densidad de corriente de anillo – diatrópica para compuestos aromáticos, paratrópica para antiaromáticos. Estas corrientes pueden detectarse y cuantificarse experimentalmente mediante espectroscopía de RMN a través del apantallamiento o desapantallamiento de protones cercanos al sistema aromático. Además, los cálculos teóricos de desplazamiento químico independiente del núcleo (NICS),[19,20] y la anisotropía de la densidad de corriente inducida (ACID),[21,22] son los métodos estándar para determinar el efecto de apantallamiento magnético y para identificar corrientes de anillo, respectivamente.
- **Energéticos**: La clásica energía de estabilización aromática confiere una reactividad química particular a las moléculas aromáticas, que tienden a sufrir sustituciones en lugar de adiciones electrófilas. Esta energía puede estimarse hoy con gran precisión mediante métodos computacionales modernos sin necesidad de sistemas de referencia externos.
- **Estructurales**: Una consecuencia de la deslocalización electrónica en un anillo aromático es la uniformidad de sus longitudes de enlace. El análisis cristalográfico por difracción de rayos X es clave para determinar experimentalmente este indicador.
- **Magnéticos**: La densidad de corriente de anillo provoca una repulsión diamagnética exacerbada – la susceptibilidad magnética – entre moléculas aromáticas y campos magnéticos externos, como descubrió Faraday y describió teóricamente Linus Pauling en 1936,[23] que también puede confirmarse empíricamente.

Como resultado de todas las evidencias empíricas que deben analizarse para atribuir aromaticidad a una sustancia química, se puede concluir, como ya señaló Schleyer en 2001,[24] que "las restricciones iniciales – los compuestos aromáticos debían ser planos y estar confinados a anillos con 4n+2 electrones π – hace tiempo que han desaparecido". En este sentido, las tendencias actuales indican que la aromaticidad es aplicable a "electrones de orbitales *p* o *s*, sistemas cerrados o abiertos, moléculas conjugadas bidimensionales o tridimensionales, interacciones por enlace o por el espacio, y en estados fundamentales o excitados", según los comentarios de Wu.[18] El campo de la aromaticidad, por tanto, se ha expandido para incluir una gran variedad de entidades químicas más allá de los hidrocarburos aromáticos policíclicos clásicos.

El famoso sueño de Kekulé merece un gran reconocimiento.[25] Los últimos 200 años han constituido un avance lento pero constante hacia la comprensión de los fundamentos de la aromaticidad y cómo manipularla a voluntad para el avance de la física, la química y la ciencia de materiales. La idea de Kekulé para explicar la estabilidad y estructura del benceno mediante un anillo cerrado con electrones deslocalizados dio un significado más profundo al descubrimiento inicial de Faraday y sentó las bases para el desarrollo de la teoría estructural y el estudio de los hidrocarburos aromáticos policíclicos y, más recientemente, de toda la familia de materiales basados en grafeno.

Un puzle de benceno: hidrocarburos aromáticos policíclicos

Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) son moléculas orgánicas formadas por múltiples anillos de benceno fusionados. Estos compuestos conservan las características aromáticas del benceno, incluida la estabilidad derivada de la deslocalización electrónica, y presentan propiedades electrónicas y ópticas que dependen de su tamaño y disposición estructural. Los PAHs se forman de manera natural mediante la combustión incompleta de materia orgánica, como ocurre durante incendios forestales o actividad volcánica, aunque también pueden ser sintetizados artificialmente para obtener propiedades específicas con fines industriales o científicos.

Los PAHs de pequeño tamaño son sustancias bien conocidas desde el siglo XIX, pero a medida que crecen en tamaño y complejidad, sus propiedades se transforman. Por ejemplo, mientras que sistemas pequeños como el naftaleno o el antraceno exhiben niveles de energía discretos debido a su limitada conjugación π, los PAHs más grandes como el coroneno o los acenos más largos muestran propiedades semimetálicas similares a las del grafeno. La síntesis y el estudio de los PAHs también han allanado el camino para el desarrollo de los nanografenos (NGs), proporcionando información clave sobre cómo la estructura molecular influye en propiedades como la conductividad electrónica, la fluorescencia y la reactividad química.[26] Estos conocimientos son fundamentales para diseñar materiales con funcionalidades específicas en los que el control a nivel atómico permite un ajuste fino de las propiedades finales.

Grafeno y otros materiales bidimensionales

El grafeno, una forma alotrópica bidimensional del carbono, despertó un enorme interés en la comunidad científica desde su aislamiento a partir del grafito en 2004. Su descubrimiento marcó un hito para disciplinas como la física, la química o la ciencia de materiales, dando lugar a los denominados materiales bidimensionales o materiales 2D y al surgimiento de nuevos avances tecnológicos. El grafeno está compuesto por una sola capa de átomos de carbono con hibridación sp^2 dispuestos en una red hexagonal bidimensional tipo "panal de abeja", y presenta propiedades eléctricas, térmicas y mecánicas extraordinarias, lo que le convierte en un material prometedor para una amplia gama de aplicaciones, tales como almacenamiento de energía, catálisis y biomedicina.[27] Por ejemplo, su estructura electrónica se caracteriza por tener bandas de conducción y valencia que se tocan (cero *bandgap*) en los llamados "puntos de Dirac" (ubicados en los vértices de la zona de Brillouin hexagonal), lo que le confiere una movilidad electrónica alta, una densidad de corriente eléctrica elevada y un transporte balístico de electrones a temperatura ambiente. Además, el grafeno posee notables propiedades mecánicas, combinando una resistencia alta a la tracción con un peso extremadamente ligero (0.77 mg m^{-2}) y grosor de tan solo un átomo. Es transparente, impermeable al paso de gases y presenta una conductividad térmica alta y una gran área superficial. Las propiedades del grafeno – y, por ende, sus posibles aplicaciones – dependen en gran medida de la calidad y el tamaño de sus cristales, los cuales están determinados por el método de producción. Por ello, desarrollar técnicas accesibles para producir grafeno de alta calidad es crucial para su integración en tecnologías futuras.[28,29]

Más allá del grafeno, el descubrimiento de otros materiales bidimensionales, como los dicalcogenuros de metales de transición o el nitruro de boro hexagonal, ha ampliado este campo en los últimos años. Estos materiales, cada uno con propiedades electrónicas y ópticas únicas, pueden apilarse o combinarse con grafeno para formar heteroestructuras con funcionalidades a medida, aportando aún más versatilidad a las aplicaciones de los materiales 2D.[30] Actualmente, los materiales bidimensionales (2D) se han extendido a otros elementos químicos de la Tabla Periódica, dando lugar a un nuevo escenario científico

© 2025 Real Sociedad Española de Química

con materiales 2D constituidos por uno o varios elementos químicos cuyas propiedades físicas y químicas representan uno de los campos más activos de la ciencia actual.

Desde 2018, el grupo liderado por Jarillo-Herrero (MIT) ha realizado varias contribuciones al campo del grafeno, abriendo un nuevo ámbito de investigación conocido como "twistrónica", en el cual se apilan dos o más láminas de grafeno con un ángulo de giro controlado entre sus redes cristalinas, formando un patrón de interferencia de tipo moiré (Figura 4a). Las heteroestructuras resultantes, los llamados "materiales moiré" presentan propiedades muy distintas de las de sus componentes individuales: por ejemplo, dos capas de grafeno superpuestas con un ángulo de 1.1° muestran dominios tanto aislantes como superconductores a 1.7 K, como resultado de las interacciones entre sus electrones.[31,32]

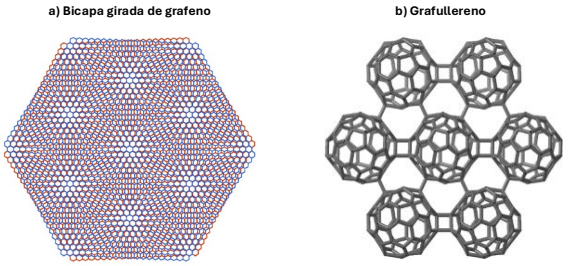


Figura 4. (a) Patrones de moiré formados por bicapas giradas de grafeno. (b) Estructura química del grafullereno. Reproducido de Ref. [33].

En cuanto a otros materiales bidimensionales basados en carbono, cabe destacar el grafullereno, descrito recientemente,[33] un polímero bidimensional de fullerenos, sintetizado mediante la unión de moléculas de C_{60} en láminas hexagonales tipo grafeno (Figura 4b). Esta combinación creativa resalta la existencia de toda una familia de alótropos superatómicos del carbono de dimensiones superiores e inferiores, que podrían sintetizarse y explorarse en un futuro próximo. Siendo un campo tan versátil y dinámico, el verdadero potencial de los materiales 2D aún no ha sido plenamente revelado y promete seguir revolucionando los dispositivos basados en materiales cuánticos, así como la industria de la optoelectrónica.

Nanografenos: un futuro por descubrir

A pesar de los avances impredecibles que la investigación en grafeno puede generar, la ya comentada ausencia de *bandgap* en este material supone un desafío para su aplicación en la industria de semiconductores. Esta limitación ha desviado parte del interés científico hacia los nanografenos, que ofrecen una solución al introducir fenómenos cuánticos con propiedades electrónicas dependientes del tamaño, los bordes y la estructura, capaces de modular su comportamiento electrónico. Los nanografenos son materiales semiconductores cuyas propiedades optoelectrónicas pueden diseñarse mediante síntesis química para aplicaciones específicas. Estos derivados nanométricos del grafeno (Figura 5) incluyen puntos cuánticos de grafeno, nanocintas de grafeno y nanografenos moleculares, y constituyen un puente entre la química molecular de los hidrocarburos aromáticos policíclicos y la química de materiales como el grafeno.

Los puntos cuánticos de grafeno, análogos grafénicos de los puntos cuánticos de carbono, son pequeños fragmentos de grafeno, generalmente de menos de 10 nm, que exhiben fotoluminiscencia dependiente del tamaño, debido al confinamiento cuántico de sus electrones. Su fluorescencia ajustable y su biocompatibilidad los hacen atractivos para aplicaciones como bioimagen, biosensado u optoelectrónica.[34] Estos materiales también conservan la elevada área superficial, la estabilidad química y la movilidad electrónica del grafeno, lo que los convierte en candidatos prometedores para dispositivos de almacenamiento de energía, como supercondensadores y baterías.[35] Sin embargo, carecen de un control atomístico sobre su morfología, lo que dificulta establecer relaciones claras entre estructura y actividad para modular sus propiedades a voluntad.[36]

Por otro lado, las nanocintas de grafeno son nanoestructuras grafénicas cuasi-unidimensionales, que presentan una relación entre su longitud y su ancho superior a 10. También pueden considerarse fragmentos recortados de una red de grafeno, cuyas propiedades electrónicas – especialmente la separación entre las bandas de conducción y de valencia (*bandgap*) y la movilidad de portadores de carga – dependen fuertemente de su anchura y de la estructura de sus bordes.[37]

La última de las subclases de nanografenos, y aquella que nos detendremos a estudiar con mayor profundidad, es la de los nanografenos moleculares.[38] Estas nanorredes hexagonales se obtienen mediante síntesis orgánica por pasos, cuya versatilidad permite controlar con precisión la forma, tamaño y topología benceno a benceno. En vista del creciente interés por el desarrollo de los nanografenos, en 2012 Müllen y colaboradores definieron el concepto de *moléculas de grafeno* como PAHs que presentan dimensiones de 1 a 5 nm. Mientras que nanografenos serían aquellos fragmentos de grafeno que oscilan entre 1 y 100 nm. A partir de este tamaño, las redes hexagonales de carbono sp^2 (>100 nm) debían considerarse grafeno.[39]

Teniendo en cuenta estas definiciones, a lo largo de la última década se han establecido los conceptos de nanografenos y, más específicamente, nanografenos moleculares, para referirse a aquellas estructuras de carbono sp^2 obtenidas de manera monodispersa, cuya red π-extendida presenta un tamaño de al menos 1 nm. El sistema de referencia es el hexa-*peri*-hexabenzocoroneno (Figura 5c), cuya estructura hexagonal formada por 13 anillos de benceno fusionados presenta un diámetro de aproximadamente 1 nm.

En las últimas dos décadas se han descrito nanografenos moleculares de diversas geometrías, topologías, tamaños, fun-

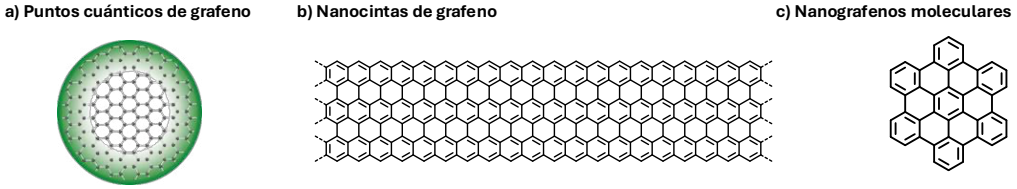


Figura 5. (a) Puntos cuánticos de grafeno (GQDs). (b) Nanocintas de grafeno (GNRs). (c) Nanografenos moleculares.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2099

cionalización, etc. Esta variedad estructural se ha conseguido mediante reacciones convencionales de química orgánica (aproximación ascendente o "bottom-up"), la cual ha permitido el control con precisión atómica de las estructuras.

Entre los diseños estructurales más interesantes descritos en los últimos años destacan los nanografenos que presentan propiedades quirópticas y fotofísicas (absorción y emisión de luz).

La quiralidad es la *"propiedad geométrica de aquellas estructuras que no son superponibles con sus imágenes especulares"* (Lord Kelvin, 1907).[40] En nanografenos moleculares, esta propiedad geométrica se ha estudiado mediante la inducción de asimetría en la red hexagonal, siendo necesario "escapar" de la planicidad inherente del grafeno. En cuestiones de simetría, el requisito para que una estructura sea quiral es la ausencia de planos de simetría y centros de inversión.

Las modificaciones más habituales en el estudio de nanografenos quirales son la introducción de ciclos no-hexagonales,[41] y la formación de estructuras hexagonales estéricamente congestionadas – como helicenos y twistacenos.[42] La presencia de estos *defectos* que desvían las estructuras de la planicidad dan lugar a ejes de quiralidad en torno a los cuales un grupo de átomos se organiza de manera que no son superponibles con su imagen especular o enantiómero (definición de eje de quiralidad según el "*Gold Book*" de la IUPAC).[43]

Estas modificaciones para crear asimetría son requisito (geométrico) indispensable pero no suficiente para la estabilidad de las propiedades quirales. Para ello es necesario estudiar el proceso de isomerización y conocer la barrera energética necesaria para transformar un isómero en su imagen especular (barrera de racemización o enantiomerización, obtenida de manera experimental o teórica, respectivamente). Así, la barrera energética determina la estabilidad de las propiedades quirópticas.

Las barreras de isomerización se pueden determinar y estudiar mediante distintas técnicas experimentales, como puede ser: cromatografía líquida de alta eficacia (de sus siglas en inglés HPLC), resonancia magnética nuclear (del inglés NMR) o dicroísmo circular (del inglés CD). Además, se pueden determinar teóricamente mediante la utilización de cálculos DFT.[44]

Atendiendo al valor de la barrera de isomerización, se puede establecer una clasificación de los diferentes nanografenos,[45] y relacionar los motivos estructurales con el valor de la barrera de isomerización y la estabilidad de las propiedades quirales:

1. **Nanografenos flexibles** (<10 kcal·mol^{-1}). Presentan una rápida interconversión que hace indistinguibles a los enantiómeros. Por ejemplo, el [7]circuleno (Figura 6a) presenta una barrera de apenas 0.05 kcal·mol^{-1}. En aquellas estructuras que contienen anillos no hexagonales, la disminución de la profundidad de la superficie curvada implica la disminución de la barrera de isomerización (en este caso la profundidad de la silla es de 1.1 Å). Por otro lado, la flexibilidad de los helicenos depende del número de anillos *orto*-fusionados, un mayor número de anillos formando el heliceno implica una mayor desviación de la planicidad y, con ello, el incremento de la barrera de isomerización. Como se muestra en la Figura 6b, la formación de [4]helicenos conlleva una elevada flexibilidad, los isómeros generados por la asimetría de los helicenos se observan únicamente en estado sólido.[46]

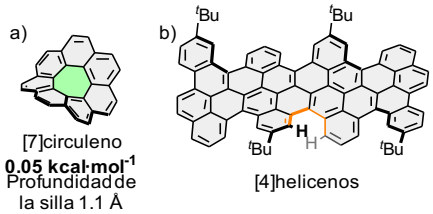


Figura 6. Moléculas flexibles basadas en estructuras quirales de [7]circuleno y [4]heliceno.

2. **Nanografenos con quiralidad detectable** (10–20 kcal·mol^{-1}). Las barreras de racemización relativamente bajas permiten distinguir enantiómeros únicamente mediante técnicas espectroscópicas. En este rango se encuentran, por ejemplo, los hexa[7]circulenos (~17 kcal·mol^{-1}), donde la profundidad de las deformaciones tipo silla incrementa la estabilidad relativa de los isómeros. Como se muestra en la Figura 7, el nanografeno descrito por Itami y colaboradores,[47] fusiona anillos hexagonales con cinco anillos heptagonales en la periferia y un anillo pentagonal en el centro. El aumento de la profundidad de las sillas implica un aumento de la barrera de isomerización (comparable a la del hexa[7]circuleno). Sin embargo, la profundidad de la concavidad central (curvatura inducida por el anillo pentagonal) disminuye notablemente, disminuyendo con ello la barrera de isomerización.

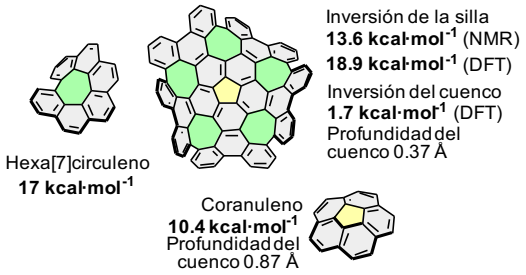


Figura 7. Nanografenos con quiralidad detectable.

3. **Nanografenos aislables** (20–35 kcal·mol^{-1}). Generalmente es posible aislarlos como enantiómeros puros, aunque la racemización ocurre con el tiempo, limitando la estabilidad de las propiedades quirópticas. Destacan las estructuras tipo "silla de montar de mono" (en inglés *monkey-saddle*), en las cuales se fusionan anillos de 5, 6 y 8 miembros, Figura 8a.[48] Dentro de este grupo también se han descrito sistemas basados en [5]heliceno funcionalizado en los anillos terminales para aumentar el impedimento estérico y, con ello, la barrera de racemización, Figura 8b.[49]

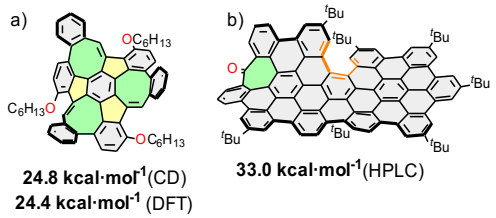


Figura 8. Nanografenos cuya barrera es suficientemente elevada para poder aislar sus isómeros.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

4. **Nanografenos estereoquímicamente rígidos** (>35 kcal·mol^{-1}). Presentan una estabilidad frente a la racemización suficiente para aplicaciones quirópticas. Habitualmente se logran mediante la incorporación de helicenos de más de seis anillos *orto*-fusionados (≥[6]heliceno), Figura 9a.[50] Aunque también se ha observado que la introducción de anillos no hexagonales (generalmente relacionados con una flexibilidad elevada) de 8 y 9 miembros en estructuras de *pseudo*-[5]heliceno da lugar a barreras elevadas (>38.3 kcal·mol^{-1}), Figura 9b.[51]

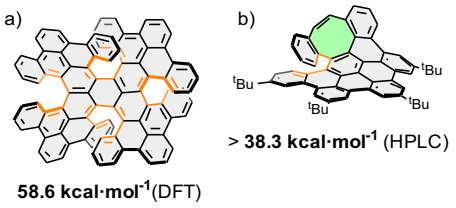


Figura 9. Nanografenos estereoquímicamente rígidos (estables).

Por tanto, siguiendo la clasificación se pueden identificar las estructuras que presentan propiedades derivadas de la quiralidad estables en el tiempo. Una de las propiedades más prometedoras por sus potenciales aplicaciones en sensores, electrónica orgánica o bioimagen, entre otras, es la luminiscencia circularmente polarizada (del inglés CPL).[52]

Entre los nanografenos estereoquímicamente rígidos con respuesta quiróptica, los sistemas bicapa quirales –formados por dos nanografenos unidos por un heliceno– sobresalen por su singular arquitectura. Durante los últimos cinco años, estas entidades han recibido una atención considerable, lo que ha conducido al desarrollo de nuevas estrategias de diseño orientadas a ajustar sus propiedades.

Las herramientas habitualmente utilizadas para la modificación de las propiedades optoelectrónicas han sido la variación de la extensión-π, los efectos de borde, la incorporación de defectos (anillos no hexagonales y helicenos) y la funcionalización con heteroátomos. Sin embargo, en estudios recientes se han observado un *efecto bicapa*.[53]

Simultáneamente a la descripción del grafeno bicapa y sus propiedades (materiales moiré, Figura 4a), en 2018 nuestro grupo de investigación describió el primer nanografeno bicapa quiral, Figura 10b.[54] La estructura consiste en dos unidades de HBC covalentemente conectadas por una subestructura de [10]heliceno.

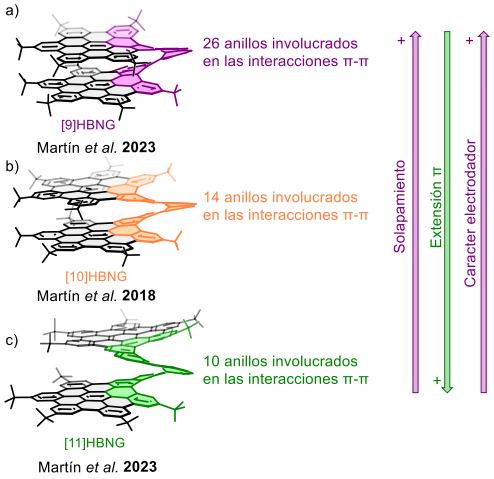


Figura 10. Nanografenos bicapa quirales, en inglés "*helical bilayer nanographenes, HBNG*".

En 2023, se llevó a cabo el estudio sistemático y comparativo de las estructuras bicapa quirales representadas en la Figura 10.[55] Estos nanografenos consisten en dos unidades de HBCs conectadas por helicenos de distinta longitud [9], [10] y [11]heliceno. La topología del heliceno da lugar a quiralidad inherente a la estructura, permitiendo además la separación espacial controlada de las capas y su orientación enfrentada. Los HBCs se disponen a la distancia de las interacciones π-π en el grafito (aproximadamente 3.6 Å) y la longitud del heliceno determina el número de anillos involucrados en las interacciones intramoleculares entre las capas, lo que establece el grado de solapamiento π-π. Este solapamiento se determinó a partir de las estructuras de rayos-X de monocristal. El nanografeno [9]HBNG es una bicapa totalmente solapada, con 26 anillos de benceno involucrados en las interacciones π-π, [10]HBNG está parcialmente solapado, con 14 anillos involucrados en las interacciones π-π, y [11]HBNG presenta únicamente 10 anillos participando las interacciones.

El estudio de las propiedades electroquímicas por voltamperometría cíclica (Figura 11) mostró que la variación del carácter electrodador y electroaceptor de estas estructuras es contraria a lo esperable teniendo en cuenta la extensión π. A priori, se esperaría que la estructura más π-extendida, [11]HBNG, presentase el mayor carácter electrodador (menor potencial de oxidación). Sin embargo, la tendencia observada es la contraria, como reflejan los potenciales de oxidación de onda media obtenidos mediante voltamperometría cíclica: [9]HBNG ($E_{ox1}^{1/2}$= 0.35 V) < [10]HBNG ($E_{ox1}^{1/2}$= 0.46 V) < [11]HBNG ($E_{ox1}^{1/2}$= 0.52 V), y los potenciales de reducción de onda media: [9]HBNG ($E_{red1}^{1/2}$= –2.18 V) < [10]HBNG ($E_{red1}^{1/2}$= –2.23 V) ~ [11]HBNG ($E_{red1}^{1/2}$= –2.22 V).

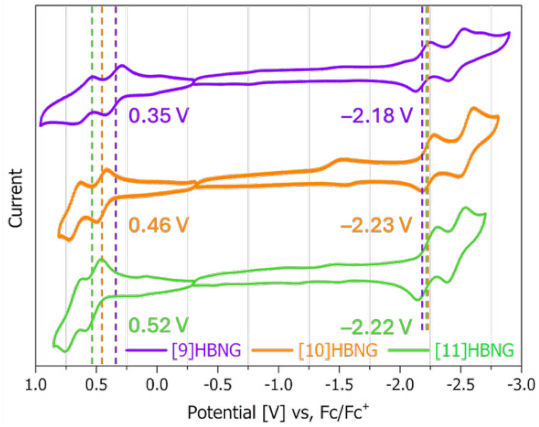


Figura 11. Voltamperogramas correspondientes a las estructuras [9]HBNG, [10]HBNG y [11]HBNG.

Mediante estudios de espectroelectroquímica se identificó un efecto de valencia mixta en la estructura [9]HBNG con mayor solapamiento. La proximidad de las capas a distancias características de las interacciones π–π favorece la estabilización de las especies radical-catión y dicatión entre ellas, lo que se traduce en una disminución del potencial de oxidación. Estas observaciones sobre la variación de las propiedades electroquímicas reflejan el impacto que tiene el grado de solapamiento en los nanografenos bicapa. A mayor grado de solapamiento, más carácter electrodador y electroaceptor.

Este *efecto bicapa* –variación de las propiedades según el grado de solapamiento– también se ve reflejado en las propiedades de emisión de fluorescencia. La estructura menos

© 2025 Real Sociedad Española de Química

π-extendida y más solapada [9]HBNG presenta la emisión más desplazada a mayor longitud de onda, debido a la mayor interacción electrónica entre las capas a través del espacio.

Por último, se determinaron las propiedades quirópticas mediante CD y CPL. Estas estructuras presentan factores de disimetría (de absorción y emisión, g_{abs} y g_{lum}, respectivamente) muy elevados para estructuras de carbono,[56] con valores de $|g_{lum}| = 3.6 \times 10^{-2}$ para [9]HBNG. Sin embargo, estos valores dependen también de la alineación óptima entre los momentos dipolares de transición eléctricos y magnéticos.

Por tanto, el efecto bicapa dependiente del grado de solapamiento puede considerarse una herramienta adicional para el diseño y modulación de las propiedades en nanografenos moleculares. En este sentido, el creciente interés por los nanografenos bicapa quirales ha llevado al diseño de nuevas estructuras con diferentes grados de solapamiento, topologías de los anillos y/o número de capas, Figura 12.

En 2023, Feng y colaboradores describieron un nanografeno bicapa π-extendido y no bencenoide basado en tres unidades *pseudo*-HBC fusionadas mediante anillos de cinco y siete miembros, lo que dio lugar a un [10]heliceno, Figura 12a.[57] La presencia de los anillos de siete miembros provoca el cierre del borde interno del heliceno, generando un solapamiento completo entre las capas y una distancia interlaminar de 3.24 Å. La comunicación entre las capas a través del espacio se confirmó mediante medidas de espectroelectroquímica y cálculos DFT. Además, los enantiómeros del nanografeno muestran propiedades quirópticas destacadas, con un factor de disimetría de luminiscencia $|g_{lum}| = 1.3 \cdot 10^{-3}$.

Ese mismo año, Gong y coautores presentaron el nanografeno bicapa representado en la Figura 12b, que incorpora un núcleo de pentadecabenzo[9]heliceno con cuatro unidades HBC fusionadas.[58] Su elevada rigidez estructural y el gran número de anillos bencénicos implicados en interacciones π-π (28) originan una distancia interlaminar aún menor, de 2.9 Å. El estudio de las propiedades quiropticas mostró valores excepcionalmente altos de $|g_{lum}| = 4.5 \cdot 10^{-2}$.

Por otra parte, en 2023, Tan y colaboradores ampliaron el estudio hacia sistemas multicapa, describiendo los nanografenos tricapa mostrados en la Figura 12c,d.[59] Estos nanografenos están formados por tres unidades de HBC unidas mediante [8] helicenos con diferente topología. La inclusión de anillos de cinco miembros en la estructura (Figura 12d) reduce el solapamiento entre las capas debido a la apertura del borde interno del heliceno en comparación con la estructura formada por anillos de benceno (Figura 12c), a pesar de que ambas presentan el mismo número de anillos formando los helicenos. Esta diferencia estructural y de solapamiento se refleja directamente en las propiedades optoelectrónicas y electroquímicas: el nanografeno con mayor solapamiento (Figura 12c), presenta un potencial de oxidación más bajo ($E_{ox1}^{1/2}$ = 0.18 V *vs* $E_{ox1}^{1/2}$ = 0.25 V, nanografenos tricapa Figura 12c y 12d, respectivamente), excitones más fuertemente ligados (1.70 eV frente a 1.47 eV) y tiempos de vida media de fotoluminiscencia más largos (10.2 ns frente a 7.0 ns).

Además de las bicapas conectadas covalentemente por helicenos, recientemente nuestro grupo de investigación ha descrito dos nanografenos bicapa que consisten en dos unidades de HBC conectadas por un núcleo de spirobifluoreno, Figura 13.[60]

En estas estructuras la conjugación-π entre capas está minimizada o suprimida, reduciendo la comunicación electrónica a través de enlaces. La estructura tridimensional está estabilizada por interacciones π-π entre 10 anillos de benceno superpuestos (una unidad de perileno en cada capa) y presenta una distancia interlaminar de 3.7 Å. Este diseño permite la comunicación

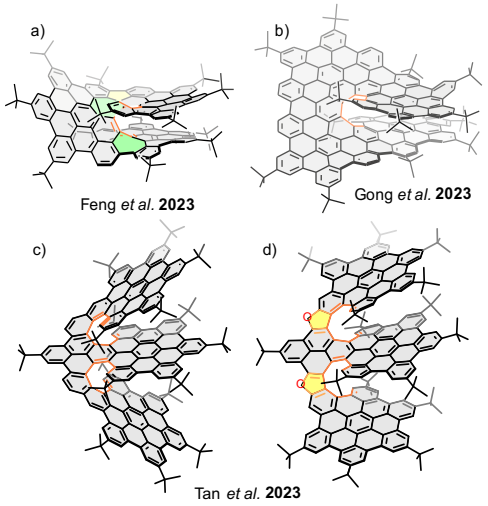


Figura 12. Nanografenos bicapa y tricapa con variaciones en la extensión π, la topología de los anillos y el número de capas.

entre capas y manifiesta un efecto bicapa similar al observado en los HBNGs. El análisis por voltamperometría cíclica de la estructura representada en la Figura 13a mostró un primer potencial de oxidación de $E_{ox1}^{1/2}$ = 0.57 V, notablemente menor al del sistema de referencia *tert*-butil-HBC ($E_{ox1}^{1/2}$ = 0.63 V). Esta disminución se atribuye exclusivamente a las interacciones π-π a través del espacio, ya que otros HBCs enlazados por espirobifluoreno no muestran este efecto, descartando la influencia de la espiroconjugación.

Posteriormente, se sintetizó un nanografeno con carácter dador-aceptor, con cinco átomos de flúor (electroaceptores) en una capa de HBC y cinco grupos *tert*-butilo (electrodadores) en la otra, Figura 13b. Esta disposición induce una transferencia electrónica en el estado fundamental desde la capa donadora hacia la aceptora, originando una especie zwitteriónica en la que coexisten el catión-radical y el anión-radical.

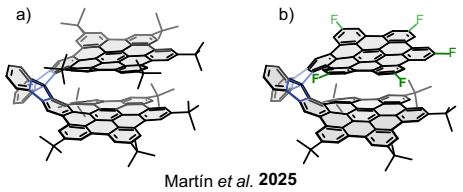


Figura 13. Nanografenos bicapa conectados por spirobifluoreno.

En la síntesis de nanografenos moleculares quirales destaca un hito importante por el desafío de diseño y sintético que supone: la síntesis enantioselectiva o enantiocontrolada. Estas aproximaciones permiten la obtención de nanografenos enantioméricamente puros con propiedades quirópticas definidas, lo que facilitará el desarrollo de sus aplicaciones.

En 2024, nuestro grupo de investigación describió, por primera vez, la síntesis enantioselectiva de un nanografeno basado en dos unidades de HBC truncados conectados por un núcleo de triindano quiral, Figura 14a.[61] La síntesis consiste en tres pasos claves: (1) reducción enantioselectiva de Corey-Bakshi-Shibata, (2) sustitución bencílica enantiospecífica mediante una ciclación de tipo Friedel-Crafts, que da lugar a la estructura central de triindano reteniendo la información quiral; y (3) una reacción de Scholl enantiospecífica que establece la quiralidad helicoidal final e induce la grafitización estereocontrolada.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

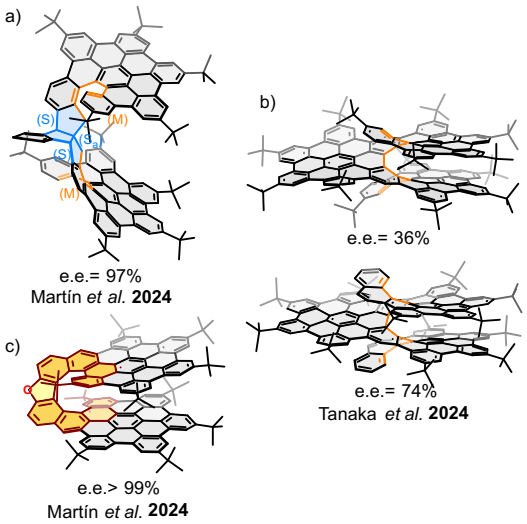


Figura 14. Nanografenos bicapa quirales sintetizados de manera enantioselectiva y enantiocontrolada.

En el mismo año, Tanaka y colaboradores describieron la síntesis enantioselectiva de los nanografenos mostrados en la Figura 14b.[62] En este caso, la reacción clave es la ciclación enantioselectiva [2+2+2] en presencia de $Ni(cod)_2$ combinada con (R)-1-(2-difenilfosfino-1-naftil)isoquinolina, que transfiere la información quiral.

Alternativamente, nuestro grupo de investigación ha descrito una aproximación directa y fácilmente escalable para la síntesis enantiocontrolada de nanografenos bicapa quirales.[63] En este caso se describe la síntesis de un HBNG (Figura 14c) basada en dos pasos clave: la resolución química de enantiómeros seguida de una reacción de grafitización estereoespecífica.

Conclusiones

Este artículo resume el significativo legado del benceno, cuya estructura y la teoría de la aromaticidad sentaron las bases para la química aromática del carbono y el surgimiento de los nanomateriales basados en carbono. A lo largo de dos siglos, el concepto de aromaticidad ha evolucionado, pasando de las propuestas de Kekulé y las reglas de Hückel y Clar a un marco conceptual más amplio aplicable a diversas entidades químicas, dimensionalidades y estados electrónicos.

La investigación ha establecido a los nanografenos moleculares (NGs) como un puente esencial que conecta la química molecular de los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) con la ciencia de materiales basada en alótropos del carbono como los fullerenos, los nanotubos o el grafeno. Gracias a la versatilidad de la síntesis orgánica *bottom-up*, es posible obtener estas nanoestructuras con control atómico sobre su forma, tamaño y topología. Este control resulta crucial para superar las limitaciones del grafeno, como su *bandgap* cero, y para controlar fenómenos cuánticos clave como el confinamiento electrónico, y el carácter semiconductor de los nanografenos.

Un área de investigación destacada es la de los nanografenos moleculares quirales, cuyas propiedades quiróptica, dicroísmo circular (CD) o luminiscencia circularmente polarizada (CPL), dependen directamente de la estabilidad frente a la racemización. La clasificación de los NGs según esta barrera energética permite un diseño racional de estructuras quiróptica-mente estables, logradas mediante la introducción controlada de anillos no hexagonales o helicenos.

Finalmente, los recientes avances en nanografenos moleculares bicapa han revelado que el grado de solapamiento π–π entre las dos capas, actúa como una nueva herramienta de diseño para ajustar las propiedades funcionales de forma predecible. Este solapamiento, al promover interacciones π–π a través del espacio, modula eficazmente el carácter electrodador/aceptor y desplaza la emisión de fluorescencia, debido a una comunicación electrónica a través del espacio entre capas.

En conjunto, los nanografenos moleculares no solo honran el legado del benceno al ofrecer modelos moleculares de nanomateriales basados en carbono, sino que también impulsan la frontera de la ciencia de materiales, abriendo vías prometedoras para la fabricación de dispositivos optoelectrónicos y fotónicos de próxima generación con funcionalidades a la carta.

Bibliografía

[1] X. Xu, R. Ray, Y. Gu, H. J. Ploehn, L. Gearheart, K. Raker, W. A. Scrivens, *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 12736-12737, https://doi.org/10.1021/ja040082h.
[2] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, *Nature* **1985**, *318*, 162-163, https://doi.org/10.1038/318162a0.
[3] S. Iijima, *Nature* **1991**, *354*, 56-58, https://doi.org/10.1038/354056a0.
[4] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, *Science* **2004**, *306*, 666-669, https://doi.org/10.1126/science.1102896.
[5] J. Li, Y. Han, *Giant* **2023**, *13*, 100140, https://doi.org/10.1016/j.giant.2023.100140.
[6] J. D. Bernal, *Proc. R. Soc. Lond. A* **1924**, *106*, 749-773, https://doi.org/10.1098/rspa.1924.0101.
[7] J. L. Delgado, M. A. Herranz, N. Martín, *J. Mater. Chem.* **2008**, *18*, 1417-1426, https://doi.org/10.1039/B717218D.
[8] M. Faraday, *Phil. Trans. R. Soc.* **1825**, *115*, 440-466, https://doi.org/10.1098/rstl.1825.0022.
[9] E. Mitscherlich, *Ann. Pharm.* **1834**, *9*, 39-48, https://doi.org/10.1002/jlac.18340090103.
[10] A. W. Hofmann, *Proc. R. Soc. Lond.* **1856**, *8*, 1-3, https://doi.org/10.1098/rspl.1856.0002.
[11] A. Kekulé, *Bull. Soc. Chim. Fr.* **1865**, *3*, 98-110.
[12] L. Gross, F. Mohn, N. Moll, P. Liljeroth, G. Meyer, *Science* **2009**, *325*, 1110-1114, https://doi.org/10.1126/science.1176210.
[13] A. J. Rocke, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 46-50, https://doi.org/10.1002/anie.201408034.
[14] E. Hückel, *Z. Physik* **1931**, *70*, 204-286, https://doi.org/10.1007/BF01339530.
[15] E. Hückel, *Z. Physik* **1931**, *72*, 310-337, https://doi.org/10.1007/BF01341953.
[16] E. Clar, *The Aromatic Sextet*, Wiley, New York, **1972**.
[17] M. Solà, *Front. Chem.* **2013**, *1*, 22, https://doi.org/10.3389/fchem.2013.00022.
[18] G. Merino, M. Solà, I. Fernández, C. Foroutan-Nejad, P. Lazzeretti, G. Frenking, H. L. Anderson, D. Sundholm, F. P. Cossío, M. A. Petrukhina, J. Wu, J. I. Wu, A. Restrepo, *Chem. Sci.* **2023**, *14*, 5569-5576, https://doi.org/10.1039/D2SC04998H.
[19] P. v. R Schleyer, C. Maerker, A. Dransfeld, H. Jiao, N. J. R. v. E. Hommes, *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, *118*, 6317-6318, https://doi.org/10.1021/ja960582d.
[20] Z. Chen, C. S. Wannere, C. Corminboeuf, R Puchta, P. v. R. Schleyer, *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 3842-3888, https://doi.org/10.1021/cr030088.
[21] R. Herges, D. Geuenich, *J. Phys. Chem. A* **2001**, *105*, 3214-3220, https://doi.org/10.1021/jp0034426.
[22] D. Geuenich, K. Hess, F. Köhler, R. Herges, *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 3758-3772, https://doi.org/10.1021/cr0300901.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

[23] L. J. Pauling, *Chem. Phys.* **1936**, *4*, 673-677, https://doi.org/10.1063/1.1749766.
[24] P. v. R Schleyer, *Chem. Rev.* **2001**, *101*, 1115-1118, https://doi.org/10.1021/cr0103221.
[25] R. Anschütz, *August Kekulé. Vol 2*, 941-942, Verlag Chemie, Berlin, **1929**.
[26] X.-Y. Wang, X. Yao, K. Müllen, *Sci. China Chem.* **2019**, *62*, 1099-1144, https://doi.org/10.1007/s11426-019-9491-2.
[27] A. K. Geim, K. S. Novoselov, *Nat. Mater.* **2007**, *6*, 183-191, https://doi.org/10.1038/nmat1849.
[28] A. K. Worku, D. W. Ayele, *Results Chem.* **2023**, *5*, 100971, https://doi.org/10.1016/j.rechem.2023.100971.
[29] P. Izquierdo-García, J. M. Fernández-García, N. Martín, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *47*, 32222-32234, https://doi.org/10.1021/jacs.4c12819.
[30] K. S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, A. H. Castro Neto, *Science* **2016**, *353*, aac9439, https://doi.org/10.1126/science.aac9439.
[31] Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, P. Jarillo-Herrero, *Nature* **2018**, *556*, 43-50, https://doi.org/10.1038/nature26160.
[32] Y. Cao, V. Fatemi, A. Demir, S. Fang, S. L. Tomarken, J. Y. Luo, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, R. C. Ashoori, P. Jarillo-Herrero, *Nature* **2018**, *556*, 80-84, https://doi.org/10.1038/nature26154.
[33] E. Meirzadeh, A. M. Evans, M. Rezaee, M. Milich, C. J. Dionne, T. P. Darlington, S.T. Bao, A. K. Bartholomew, T. Handa, D. J. Rizzo, R. A. Wiscons, M. Reza, A. Zangiabadi, N. Fardian-Melamed, A. C. Crowther, P. J. Schuck, D. N. Basov, X. Zhu, A. Giri, P. E. Hopkins, P. Kim, M. L. Steigerwald, J. Yang, C. Nuckolls, X. Roy, *Nature* **2023**, *613*, 71-76, https://doi.org/10.1038/s41586-022-05401-w.
[34] P. Tian, L. Tang, K. S. Teng, S. P. Lau, *Mater. Today Chem.* **2018**, *10*, 221-258, https://doi.org/10.1016/j.mtchem.2018.09.007.
[35] Y. Yan, J. Gong, J. Chen, Z. Zeng, W. Huang, K. Pu, J. Liu, P. Chen, *Adv. Mater.* **2019**, *31*, 1808283, https://doi.org/10.1002/adma.201808283.
[36] L. A. Ponomarenko, F. Schedin, M. I. Katsnelson, R. Yang, E. W. Hill, K. S. Novoselov, A. K. Geim, *Science* **2008**, *320*, 356-358, https://doi.org/10.1126/science.1154663.
[37] Y. Gu, Z. Qiu, K. Müllen, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 11499-11524, https://doi.org/10.1021/jacs.2c02491.
[38] N. Martín, C. Nuckolls, Eds. *Molecular Nanographenes: Synthesis, Properties, and Applications*, Wiley, New York, **2025**, https://doi.org/10.1002/9783527845019.
[39] L. Chen, Y. Hernandez, X. Feng, K. Müllen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, *51*, 7640-7654, https://doi.org/10.1002/anie.201201084.
[40] Lord Kelvin, *J. Oxford Univ. Junior Sci. Club* **1894**, *18*, 25.
[41] M. Rickhaus, M. Mayor, M. Juríček, *Chem. Soc. Rev.* **2017**, *46*, 1643-1660, https://doi.org/10.1039/C6CS00623J.
[42] M. Rickhaus, M. Mayor, M. Juríček, *Chem. Soc. Rev.* **2016**, *45*, 1542-1556, https://doi.org/10.1039/C5CS00620A.
[43] A. D. McNaught and A. Wilkinson, Eds. *IUPAC Compendium of Chemical Terminology, (the "Gold Book")*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1997**. https://doi.org/10.1351/goldbook.
[44] M. Rickhaus, L. Jundt, M. Mayor, *Chimia* **2016**, *70*, 192-202, https://doi.org/10.2533/chimia.2016.192.
[45] J. M. Fernández-García, P. Izquierdo-García, M. Buendía, S. Filippone, N. Martín, *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 2634-2645, https://doi.org/10.1039/D1CC06561K.
[46] J. Liu, B.-W. Li, Y.-Z. Tan, A. Giannakopoulos, C. Sanchez-Sanchez, D. Beljonne, P. Ruffieux, R. Fasel, X. Feng, K. Müllen, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 6097-6103, https://doi.org/10.1021/jacs.5b03017.
[47] K. Kawasumi, Q. Zhang, Y. Segawa, L. T. Scott, K. Itami, *Nat. Chem.* **2013**, *5*, 739-744, https://doi.org/10.1038/nchem.1704.
[48] T. Kirschbaum, F. Rominger, M. Mastalerz, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 270-274, https://doi.org/10.1002/anie.201912213.
[49] C. M. Cruz, I. R. Márquez, I. F. A. Mariz, V. Blanco, C. Sánchez-Sánchez, J. M. Sobrado, J. A. Martín-Gago, J. M. Cuerva, E. Maçôas, A. G. Campaña, *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 3917-3924, https://doi.org/10.1039/C8SC00427G.
[50] S. H. Pun, K. M. Cheung, D. Yang, H. Chen, Y. Wang, S. V. Kershaw, Q. Miao, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202113203, https://doi.org/10.1002/anie.202113203.
[51] M. A. Medel, R. Tapia, V. Blanco, D. Miguel, S. P. Morcillo, A. G. Campaña, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 6094-6100, https://doi.org/10.1002/anie.202015368.
[52] V. Kumar, J. L. Páez, S. Míguez-Lago, J. M. Cuerva, C. M. Cruz, A. G. Campaña, *Chem. Soc. Rev.* **2025**, *54*, 4922-4947, https://doi.org/10.1039/D4CS00745J.
[53] P. Izquierdo-García, J. Lión-Villar, J. M. Fernández-García, N. Martín, *Chem. Soc. Rev.* **2025**, 11089-11104, https://doi.org/10.1039/D4CS00804A.
[54] P. J. Evans, J. Ouyang, L. Favereau, J. Crassous, I. Fernández, J. Perles, N. Martín, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 6774-6779, https://doi.org/10.1002/anie.201800798.
[55] P. Izquierdo-García, J. M. Fernandez-García, S. Medina Rivero, M. Šámal, J. Rybáček, L. Bednárová, S. Ramírez-Barroso, F. J. Ramírez, R. Rodríguez, J. Perles, D. García-Fresnadillo, J. Crassous, J. Casado, I. G. Stará, N. Martín, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 11599-11610, https://doi.org/10.1021/jacs.3c01088.
[56] E. M. Sánchez-Carnerero, A. R. Agarrabeitia, F. Moreno, B. L. Maroto, G. Muller, M. J. Ortiz, S. de la Moya, *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 13488-13500, https://doi.org/10.1002/chem.201501178.
[57] L. Yang, Y.-Y. Ju, M. A. Medel, Y. Fu, H. Komber, E. Dmitrieva, J.-J. Zhang, S. Obermann, A. G. Campaña, J. Ma, X. Feng, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202216193, https://doi.org/10.1002/anie.202216193.
[58] Y.-J. Shen, N.-T. Yao, L.-N. Diao, Y. Yang, X.-L. Chen, H.-Y. Gong, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202300840, https://doi.org/10.1002/anie.202300840.
[59] Y.-Y. Ju, L. Chai, K. Li, J.-F. Xing, X.-H. Ma, Z.-L. Qiu, X.-J. Zhao, J. Zhu, Y.-Z. Tan, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 2815-2821, https://doi.org/10.1021/jacs.2c08746.
[60] J. Lión-Villar, J. M. Fernández-García, S. Medina Rivero, J. Perles, S. Wu, D. Aranda, J. Wu, S. Seki, J. Casado, N. Martín, *Nat. Chem.* **2025**, *17*, 1099-1106, https://doi.org/10.1038/s41557-025-01810-2.
[61] M. Buendía, J. M. Fernández-García, J. Perles, S. Filippone, N. Martín, *Nat. Synth.* **2024**, *3*, 545-553, https://doi.org/10.1038/s44160-024-00484-x.
[62] F. Morita, Y. Kishida, Y. Sato, H. Sugiyama, M. Abekura, J. Nogami, N. Toriumi, Y. Nagashima, T. Kinoshita, G. Fukuhara, M. Uchiyama, H. Uekusa, K. Tanaka, *Nat. Synth.* **2024**, *3*, 774-786, https://doi.org/10.1038/s44160-024-00527-3.
[63] P. Izquierdo-García, J. M. Fernández-García, J. Perles, N. Martín, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 34943-34949, https://doi.org/10.1021/jacs.4c14544

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Juan Lión Villar

Departamento de Química Orgánica I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avda. Complutense s/n, 28040 Madrid, España

C-e: jlion@ucm.es

ORCID: 0009-0008-9883-0104

Juan Lión-Villar se graduó en Química (2018) y obtuvo el Máster en Química Sintética e Industrial (2019) en la Universidad de Valladolid. En 2025 completó su doctorado en la Universidad Complutense de Madrid, trabajando en nanografenos moleculares para aplicaciones energéticas bajo la supervisión del Prof. Nazario Martín y del Dr. Jesús M. Fernández-García. Durante su doctorado realizó una estancia en el grupo del Prof. Colin Nuckolls en la Universidad de Columbia (EE. UU.), centrada en el desarrollo de nuevos materiales de electrodos para baterías de ion litio. Actualmente continúa investigando nano-grafenos moleculares como investigador posdoctoral en el grupo de Nazario Martín.

Patricia Izquierdo García

Departamento de Química Orgánica I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avda. Complutense s/n, 28040 Madrid, España

C-e: patrii01@ucm.es

ORCID: 0000-0002-5004-1375

Patricia Izquierdo-García nació en Madrid en 1997. Obtuvo su Grado y Máster en Química en la Universidad Complutense de Madrid en 2019 y 2020. Durante ambos estudios investigó, bajo la supervisión del Prof. Nazario Martín y del Dr. Jesús M. Fernández-García, la síntesis "*bottom-up*" de nanografenos moleculares. En 2020 inició su doctorado en el mismo grupo, centrado en nanografenos quirales, incluyendo una estancia predoctoral en Harvard con el Prof. Jarad Mason. En 2024 se doctoró y continuó en la UCM desarrollando nanografenos bicapa, desde 2025 se unió al grupo del Prof. Ben L. Feringa para trabajar en motores moleculares.

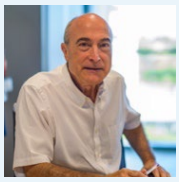
Jesús Manuel Fernández García

Departamento de Química Orgánica I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avda. Complutense s/n, 28040 Madrid, España

C-e: jesusmaf@ucm.es

ORCID: 0000-0002-7366-6845

Jesús M. Fernández-García nació en Oviedo, España. Realizó sus estudios de grado y doctorado en la Universidad de Oviedo, donde obtuvo el doctorado bajo la supervisión del Prof. Enrique Aguilar y del Prof. Manuel A. Fernández-Rodríguez. Su trabajo doctoral se centró en reacciones de cicloisomerización y cicloaddición catalizadas por oro en sistemas *push-pull*. En 2017 se incorporó al grupo del Prof. Nazario Martín en la Universidad Complutense de Madrid como investigador posdoctoral. Su investigación actual se centra en la síntesis "*bottom-up*" de nanografenos moleculares.



Nazario Martín León

Departamento de Química Orgánica I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avda. Complutense s/n, 28040 Madrid, España

C-e: nazmar@ucm.es

ORCID: 0000-0002-5355-1477

Nazario Martín es Catedrático en la Universidad Complutense de Madrid y vicedirector del Instituto IMDEA-Nanociencia. Miembro de la Real Academia de Ciencias de España, su investigación se centra en la química molecular y supramolecular de nanoestructuras de carbono, con especial atención a la quiralidad, la transferencia electrónica y aplicaciones biomédicas y fotovoltaicas. Fue Editor Jefe del *Journal of Materials Chemistry* (A, B y C, 2015-2019) y presidió la COSCE (2015-2019) y la RSEQ (2006-2012). Ha liderado la ERC Advanced Grant "Chirallcarbon", la Synergy-ERC "TomATTO" y recibió el Premio Nacional de Química "Enrique Moles" en 2020.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2099

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 302-307
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2097

La revista de la Real Sociedad Española de Química

INVESTIGACIÓN QUÍMICA

Del '*superbenceno*' a los '*superhelicenos*' para emitir CPL

From '*superbenzene*' to '*superhelicenes*' for CPL emission

José L. Páez, Lidia Hortigüela, Carlos M. Cruz, Araceli G. Campaña*

Departamento de Química Orgánica, Unidad de Excelencia de Química (UEQ), Facultad de Ciencias, Universidad de Granada.

PALABRAS CLAVE:
Nanografenos
Quiralidad
CPL
Curvatura
Heptágonos

RESUMEN:
Los nanografenos quirales representan una nueva clase de materiales con capacidad para emitir luz circularmente polarizada, posicionándose como potenciales candidatos en optoelectrónica quiral. Este trabajo reúne algunos de los últimos avances en síntesis y diseño de NGs quirales, destacando estrategias moleculares que permiten modular la respuesta de CPL. Adicionalmente, se discuten las perspectivas de futuro encaminadas a la optimización de la eficiencia de CPL y el potencial de estas entidades en aplicaciones tecnológicas avanzadas.

KEYWORDS:
Nanographenes
Chirality
CPL
Curvature
Heptagons

ABSTRACT:
Chiral nanographenes represent a new type of material capable of emitting circularly polarized light, positioning them as potential candidates in chiral optoelectronics. This work selects some of the latest advances in the synthesis and design of chiral NGs, highlighting molecular strategies that enable modulation of CPL response. Additionally, future perspectives toward optimizing CPL efficiency and the potential of these entities in advanced technological applications are discussed.

Introducción

Desde su descubrimiento en 1825 por Michael Faraday, la molécula de benceno se ha convertido en una piedra angular en el desarrollo de la ciencia de materiales, y en un nexo fundamental entre la química y la ciencia de materiales moleculares. Así, a lo largo de los últimos 200 años, se ha desarrollado una amplia variedad de materiales basados en esta unidad hexagonal aromática. En este año, celebramos además el 160 aniversario del modelo propuesto por August Kekulé para explicar su estructura. La fusión de bencenos entre sí llevó al desarrollo de la química de los hidrocarburos aromáticos policíclicos, donde la regla del sextete, con Erich Clar como fundador, resulta aún indispensable en el desarrollo de moléculas π-conjugadas. La fusión de anillos de benceno tiene su mayor representante en el grafeno, inicialmente hipotetizado por Wallace, y aislado en 2004 por Konstantin Novoselov y Andre Geim. Esta estructura formada por una monocapa bidimensional de anillos de benceno fusionados da lugar a una combinación de propiedades eléctricas, mecánicas y ópticas únicas.

Inspirados en esta red bidimensional infinita de anillos de benceno y en conjunción con las estrategias sintéticas *bottom-up*, los nanografenos (NGs) surgen como análogos finitos de dicho alótropo. Es a partir de los trabajos pioneros de Erich Clar y Klaus Müllen cuando los NGs se convierten en bloques sintéticos fundamentales para diseñar modelos graféneos a medida y poder así explorar propiedades optoelectrónicas novedosas.

Siendo el benceno la unidad estructural básica en la construcción de nanografenos, el hexa-*peri*-hexabenzocoroneno (HBC) puede considerarse la unidad hexagonal de construcción básica para sistemas de mayor tamaño, sería el denominado "*superbenceno*" tal y como lo definió K. Müllen (Figura 1).[1] Según esta denominación, la fusión de unidades de "superbenceno" daría lugar a los homólogos denominados "supeacenos" como el "supernaftaleno", "supertrifenileno" o "superfenalenilo" (Figura 1).

Siguiendo esta misma analogía, surge la familia de los "superhelicenos", donde las unidades de HBC (superbenceno) se disponen de manera helicoidal, dando lugar a helicenos con mayor conjugación π (Figura 1).[2–4] Es gracias a esta quiralidad inherente y a la extensa conjugación electrónica presente, cuando surgen propiedades únicas y diferentes de los sistemas planos o de los helicenos sencillos no extendidos.

En NGs quirales, la interacción con luz circularmente polarizada permite estudiar tanto la quiralidad del estado fundamental como la del estado excitado. La absorción preferencial entre luz

CÓMO CITAR: J. L. Paez, L. Hortigüela, C. M. Cruz, A. G. Campaña. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 302-307, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2097

* C-e: araceligc@ugr.es

Manuscrito recibido: 27/11/2025 · aceptado: 09/12/2025

© 2025 Real Sociedad Española de Química

circularmente polarizada a la izquierda o a la derecha se mide mediante dicroísmo circular (CD), cuantificado por el factor de disimetría de absorción (g_{abs}). De manera análoga, la luminiscencia circularmente polarizada (CPL) se evalúa mediante el factor de disimetría de emisión (g_{lum}). Los factores de disimetría dependen de la simetría molecular, los momentos dipolares eléctricos y magnéticos de la transición electrónica, y el ángulo entre ellos. Valores grandes de g que indican fuerte discriminación quiral. A efectos prácticos, un buen valor de g_{lum} requiere a su vez de un buen rendimiento cuántico de fluorescencia. Así surge un nuevo parámetro para evaluar de forma integral la eficiencia de CPL, el brillo CPL (B_{CPL}), que combina la absorción, la emisión y la fluorescencia, ofreciendo un índice más completo para aplicaciones prácticas de emisores quirales. Combinando las propiedades electrónicas del grafeno con la actividad quiral, los NGs quirales afloran como candidatos prometedores para el desarrollo de dispositivos optoelectrónicos y OLEDs.

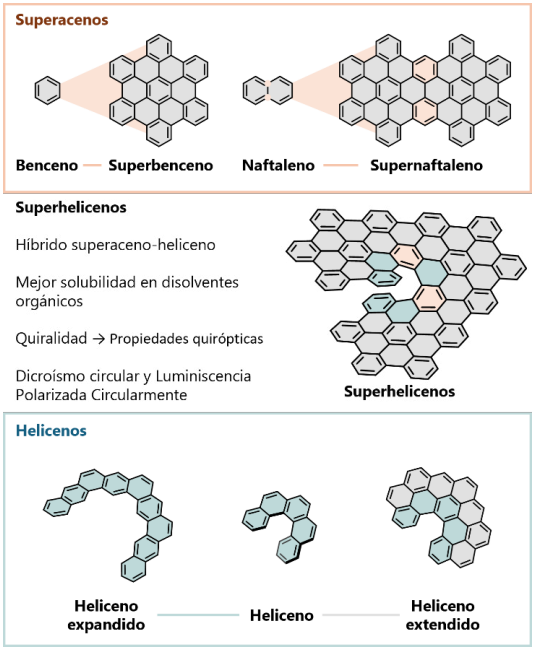


Figura 1. Características generales de los superacenos, helicenos y superhelicenos.

En los últimos años, este campo se ha orientado hacia el diseño de nanografenos modificados incluyendo heteroátomos o sistemas curvos incorporando anillos no hexagonales, dando lugar a aplicaciones en campos tan amplios como sensores, electrónica orgánica, semiconductores, bioimagen o cifrado óptico.[5]

A continuación, se recogen algunos ejemplos representativos de "*superhelicenos*" sintetizados mediante metodologías *bottom-up* y que presentan CPL.

Diseño y estrategias de síntesis de *superhelicenos* quirales

La síntesis de NGs quirales requiere de un control del tamaño, bordes y forma del sistema aromático policíclico, así como de la introducción de quiralidad. La inducción de quiralidad se logra gracias al fuerte impedimento estérico provocado por la proximidad de diferentes átomos o grupos. Las dos estrategias más utilizadas para generar este impedimento son: *i)* la inserción de grupos voluminosos, como el grupo *terc*-butilo o grupos aromáticos grandes, en posiciones específicas del perímetro del NG, para así forzar a la molécula a romper la planicidad y *ii)* la fusión de anillos para generar helicenos o espirales helicoidales en la propia estructura. En el caso de los *superhelicenos*, estos se construyen mediante la fusión de una o más unidades de hexa-*peri*-hexabenzocoroneno (HBC) con uno o varios carbohelicenos.

A continuación, se incluyen algunos ejemplos seleccionados de NGs curvos emisores de CPL, clasificados dependiendo del número de unidades de HBCs presentes.

Superhelicenos con una unidad de HBC

El representante más sencillo de esta familia es el compuesto **1** (Figura 2).[6,7] Dicho carbo[5]heliceno incrustado en la estructura de un HBC presenta un rendimiento cuántico de fluorescencia (Φ_F) de 0.11 y un valor de $|g_{lum}| = 1\times10^{-3}$. Con la extensión de dicho heliceno ([7]heliceno para el compuesto **2** y [9]heliceno para el compuesto **3**) se han observado incrementos en los valores de Φ_F (0.25 y 0.44, respectivamente) (Figura 2).[8]

Sin embargo, la inserción de un mayor número de helicenos en estas estructuras no siempre conlleva un incremento del valor de g_{lum}, ya que existen casos reportados en los que este valor es incluso menor, en comparación con sus análogos con una sola hélice.[9,10] En contraposición, una estrategia que sí ha mostrado incrementar la señal de CPL es la modificación de la topología del HBC.[11]

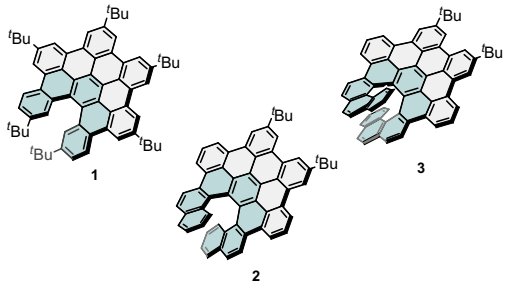


Figura 2. Nanografenos emisores de CPL con una sola unidad de HBC.

Superhelicenos con dos unidades de HBC

La siguiente familia de compuestos es aquella en la que dos unidades de HBC están conectadas por un heliceno central. Los primeros representantes de este grupo son los NGs tipo bicapa reportados, primeramente, por el grupo de Nazario Martín y posteriormente por los grupos de Xinliang Feng y Ji Ma.[12,13] Esta familia se caracteriza por presentar dos unidades de HBC conectadas por carbohelicenos de diferente longitud ([7]heliceno para **4**, [9]heliceno para **5**, [10]heliceno para **6** y [11]heliceno para **7**) (Figura 3). El compuesto **5** es el que mostró un valor notablemente alto de $|g_{lum}|$ de 3.6×10^{-2} a 575 nm. Este hecho muestra que en un [9]heliceno, la superposición y distancia entre las dos unidades de HBC es la óptima para maximizar el valor de g_{lum} en un sistema tipo bicapa.

Adicionalmente, se han estudiado sistemas basados en dos unidades de HBC en los cuales la quiralidad se introduce mediante unidades basadas en carbonos sp^3. El compuesto **8** utiliza un tripticeno como conector de las dos unidades de HBC para dar lugar a un NG quiral que muestra un valor de $|g_{lum}| = 1\times10^{-3}$.[14] Otro ejemplo interesante es la utilización de la unidad de triindano como conector quiral de dos HBC.[15] En este caso, además se consiguió por primera vez llevar a cabo una reacción de Scholl enantioespecífica, con la unidad de triidano como auxiliar quiral, para generar el compuesto

© 2025 Real Sociedad Española de Química

9 (Figura 3). Este compuesto con tres carbonos asimétricos y dos carbo[5]helicenos mostró valores de $|g_{lum}| = 1.9\times10^{-3}$ y de $B_{CPL} = 16.7\ M^{-1}\ cm^{-1}$.

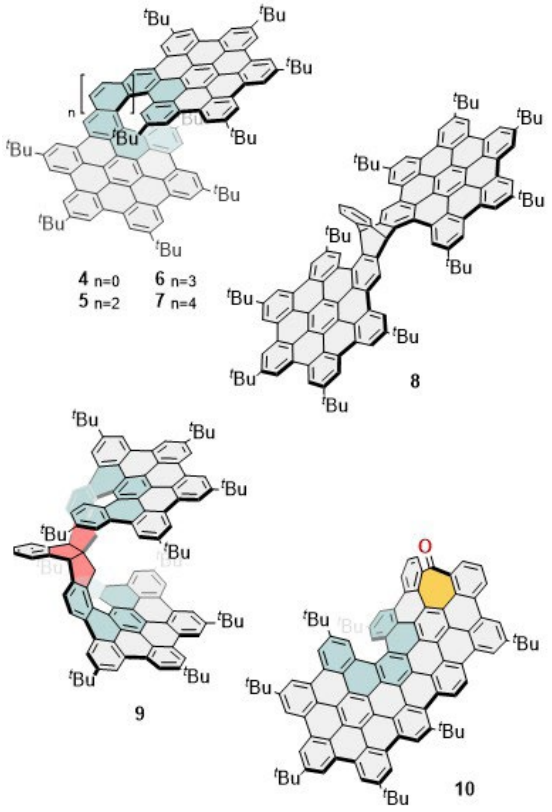


Figura 3. NGs emisores de CPL puramente carbonados que contienen dos unidades de HBC.

En 2018, nuestro grupo presentó la síntesis del primer NG quiral emisor de CPL.[16] Este NG con forma de cinta helicoidal, **10** (Figura 3), presenta dos unidades de HBC conectadas por un [5]heliceno y con curvatura negativa derivada de la inclusión de un anillo heptagonal en la periferia de uno de los HBC. Su respuesta de CPL estaba centrada en 560 nm con un valor de $|g_{lum}| = 0.23\times10^{-3}$.

También cabe destacar la incorporación de heteroátomos para modular las propiedades quirópticas de estos NGs quirales. En este sentido, la inserción de una unidad de carbazol, **11a** (Figura 4), dio lugar a desplazamientos de fluorescencia hacia el rojo (λ_{em} = 542 nm y Φ_F = 0.75) con valor de $|g_{lum}| = 1.1\times10^{-3}$.[17]

El término superheliceno fue acuñado por Norbert Jux en la síntesis del NG **12**, incorporando una unidad de furano. La inserción de átomos de oxígeno da lugar a una disminución de la respuesta de CPL en comparación con los análogos puramente carbonados. Concretamente, para los compuestos **12** ($|g_{lum}| = 0.3\times10^{-3}$) y **13** ($|g_{lum}| = 2.6\times10^{-3}$) (Figura 4) se observan valores menores respecto a sus análogos **4** y **5**, respectivamente.[4,18] Un fenómeno reseñable en **12** fue la amplificación de la respuesta de CPL en 500 veces cuando el compuesto se incorpora en una matriz aquiral de polidioctilfluoreno (PFO) presentada por el grupo de Matthew J. Fuchter, efecto que se explicó mediante una transferencia de energía de resonancia tipo Förster (FRET).

Finalmente, el compuesto **14** (Figura 4) constituye otro representante de esta familia, en el que dos unidades de HBC se conectan a través de una unidad de BINOL. El compuesto **14** exhibe valores de $|g_{lum}| = 0.23\times10^{-3}$.[19]

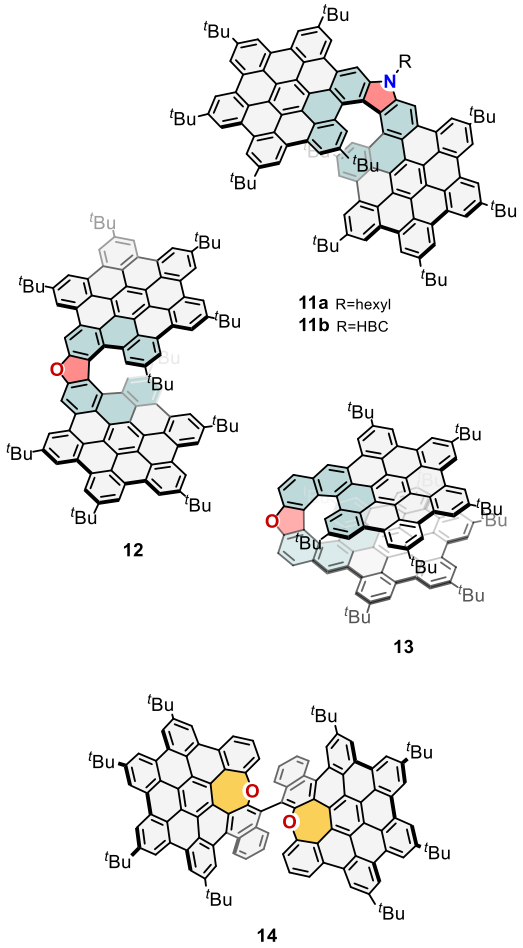


Figura 4. Nanografenos emisores de CPL conteniendo dos unidades de HBC y dopados con heteroátomos.

Superhelicenos con tres unidades de HBC

A medida que se aumenta el número de unidades de HBC surgen mayores posibilidades respecto a la topología del NG quiral. Es el caso de los compuestos **15**, **16** y **17** (Figura 5).[12,20] Estos NGs, constituidos por tres unidades de HBC, presentan una disposición relativa *orto*-, *para*- y *meta*-, haciendo posible una modulación del g_{lum} y por tanto la respuesta de CPL. Para **15** y **17**, se reportaron valores de $|g_{lum}| = 2.7\times10^{-3}$ y 8.7×10^{-3}, respectivamente. Sin embargo, fue la disposición relativa *para*- la que mostró mejores valores de respuesta de CPL ($|g_{lum}| = 13.2\times10^{-3}$ y $B_{CPL} = 176\ M^{-1}\ cm^{-1}$). Esto es debido a que esta disposición geométrica optimiza el ángulo entre los momentos dipolares eléctrico y magnético de las transiciones involucradas.

Nuestro grupo también ha contribuido en el aumento del número de HBCs en superhelicenos que emiten CPL con los compuestos **18** y **19** (Figura 5), los cuales presentan tres unidades de HBC. Además, se incorpora curvatura adicional derivada de anillos de siete miembros presentes en la periferia.[3,21] Estos NGs quirales helicoidales mostraron valores de $|g_{lum}|$ de 2×10^{-3} y 3×10^{-3}, para **18** y **19** respectivamente. En particular, el compuesto **19** mostró una emisión desplazada al rojo, debido a la estructura helicoidal junto a la curvatura negativa de tipo silla de montar generada por la presencia de los anillos heptagonales.

Finalmente, el dopaje con heteroátomos también está presente en estos análogos de mayor tamaño. Concretamente, el NG

© 2025 Real Sociedad Española de Química

helicoidal **11b** (Figura 4), que presenta una unidad de carbazol sustituida con un HBC presenta una emisión desplazada al rojo (595 nm), al igual que el análogo **11**, y valores de respuesta de CPL dependientes del disolvente. ($|g_{lum}| = 1.3\times10^{-3}$ en MeCN).[22]

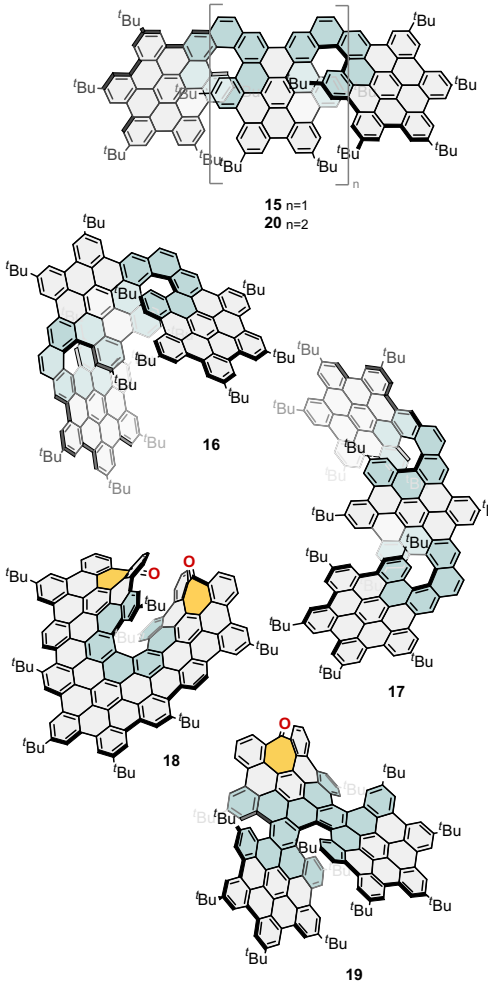


Figura 5. Nanografenos emisores de CPL conteniendo tres unidades de HBC.

Superhelicenos con cuatro o más unidades de HBC

También se han presentado sistemas de mayor tamaño y mayor complejidad, como los compuestos **20**, **21**, **22** y **23** (Figura 6), al contener múltiples unidades de HBC (cuatro o más) en conjunción con uno o varios helicenos simples o extendidos. El compuesto **20**, a pesar de su alta π-extensión y Φ_F, presenta un valor bajo de $|g_{lum}| = 1.5\times10^{-3}$, lo que pone de manifiesto que un mayor número de helicenos o una mayor complejidad estructural no siempre deriva en una mejora de la respuesta de CPL.[23,24]

En los compuestos **21** y **22** se explora en profundidad la influencia de la extensión lateral del sistema π. Para el compuesto **21**, la extensión del heliceno central con cuatro unidades de HBC resultó en un desplazamiento de la emisión al infrarrojo cercano (600-900 nm), con valores de ($|g_{lum}| = 4.5\times10^{-2}$ y $B_{CPL} = 304\ M^{-1}\ cm^{-1}$. En contraposición, el compuesto **22**, incorpora una unidad de HBC adicional, dando lugar a un NG helicoidal en forma de W, que presenta valores de g_{lum} menores (4.0×10^{-3}) poniendo de manifiesto de nuevo la baja correlación entre el número de unidades helicénicas y la respuesta quiróptica. Otro ejemplo de NG quiral de alta complejidad estructural lo podemos encontrar en el compuesto **23**, reportado por nuestro grupo.[25] Este NG distorsionado presenta cuatro unidades de HBC, múltiples anillos heptagonales y tres helicenos extendidos. Esta estructura altamente compleja dio lugar a una mezcla de diastereoisómeros con valores de g_{lum} modestos ($0.2–0.3\times10^{-3}$). En resumen, el comportamiento de estos NG complejos confirma que la intensa respuesta de CPL reside en un diseño geométrico racional donde la alineación de los momentos dipolares eléctricos y magnéticos sea óptima, en lugar de aumentar el número de unidades de HBC o la complejidad molecular sin un diseño previo.

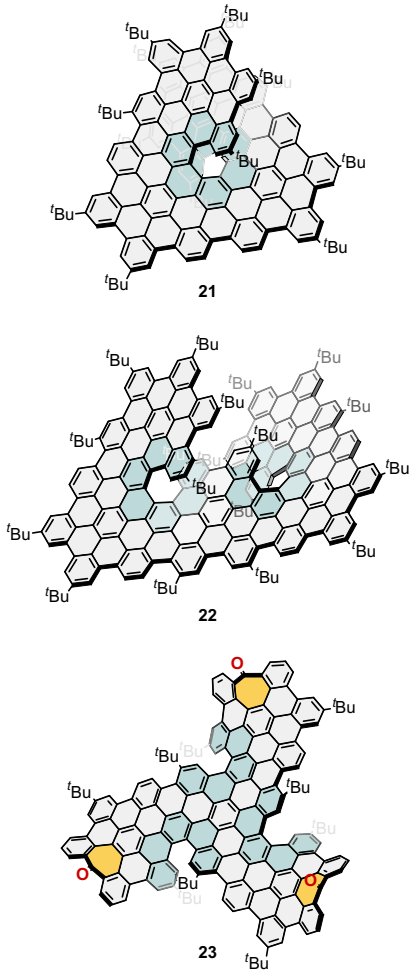


Figura 6. Nanografenos emisores de CPL conteniendo cuatro o más unidades de HBC.

Conclusiones

En este punto, las perspectivas de futuro en el campo de los NGs quirales se centran en superar obstáculos tales como el desarrollo de síntesis enantioselectivas eficaces, la optimización de las propiedades quirópticas y la integración eficaz en materiales funcionales. Por un lado, la mayor parte de las metodologías actuales requieren de la separación de mezclas racémicas, limitando en gran medida la escalabilidad y rendimiento de las rutas de síntesis. Por tanto, el desarrollo de metodologías catalíticas y/o enantioselectivas es crucial para el mejor control de la quiralidad y eficiencia de la ruta sintéticas. Trabajos recientes están demostrando el gran potencial de este tipo de aproximaciones.[7,15,18]

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2097

Por otro lado, la optimización y mejora de las propiedades quirópticas requiere de una comprensión profunda entre la estructura molecular, las transiciones electrónicas y el factor de disimetría g_{lum}. En diversos trabajos se ha demostrado que un ajuste racional de los momentos dipolares eléctrico y magnético, así como de la orientación entre ellos, es fundamental para incrementar notablemente la respuesta quiral.[26–28] En esta tesitura, las herramientas de aprendizaje automático y los métodos computacionales surgen como recursos valiosos para predecir y optimizar estos parámetros mediante la correlación de diferentes motivos estructurales con dichos momentos dipolares.

En conclusión, alcanzar un compromiso eficiente entre altos valores de rendimiento de fluorescencia y factores de disimetría requiere de un diseño molecular inteligente. Los enfoques interdisciplinares que aúnen la síntesis química, la modelización teórica y la ciencia de materiales serán fundamentales para el desarrollo de la siguiente generación de materiales quirales basados en NGs con aplicaciones en electrónica y fotónica.

No obstante, no podemos olvidar que la creación y el control de la quiralidad en materiales basados en el carbono resulta apasionante simplemente desde el punto de vista estructural. Celebrar el 200 aniversario del descubrimiento del benceno o el 20 aniversario del aislamiento del grafeno, nos sirve de recordatorio del potencial único de la curiosidad científica y la investigación básica, pudiendo llegar a grandes revoluciones tecnológicas.

Bibliografía

[1] V. S. Iyer, M. Wehmeier, J. D. Brand, M. A. Keegstra, K. Müllen, *Angew. Chem., Int. Ed.* **1997**, *36*, 1604-1607, https://doi.org/10.1002/anie.199716041.

[2] D. Reger, P. Haines, K. Y. Amsharov, J. A. Schmidt, T. Ullrich, S. Bönisch, F. Hampel, A. Görling, J. Nelson, K. E. Jelfs, D. M. Guldi, N. Jux, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2021**, *60*, 18073-18081, https://doi.org/10.1002/anie.202103253.

[3] C. M. Cruz, S. Castro-Fernández, E. Maçôas, J. M. Cuerva, A. G. Campaña, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2018**, *57*, 14782-14786, https://doi.org/10.1002/anie.201808178.

[4] D. Reger, P. Haines, F. W. Heinemann, D. M. Guldi, N. Jux, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2018**, *57*, 5938-5942, https://doi.org/10.1002/anie.201800585.

[5] J. Lión-Villar, J. M. Fernández-García, S. Medina Rivero, J. Perles, S. Wu, D. Aranda, J. Wu, S. Seki, J. Casado, N. Martín, *Nat. Chem.* **2025**, *17*, 1099-1106, https://doi.org/10.1038/s41557-025-01810-2.

[6] M. M. Martin, F. Hampel, N. Jux, *Chem. - Eur. J.* **2020**, *26*, 10210-10212, https://doi.org/10.1002/chem.202001471.

[7] F. Morita, Y. Kishida, Y. Sato, H. Sugiyama, M. Abekura, J. Nogami, N. Toriumi, Y. Nagashima, T. Kinoshita, G. Fukuhara, M. Uchiyama, H. Uekusa, K. Tanaka, *Nat. Synth.* **2024**, *3*, 774-786, https://doi.org/10.1038/s44160-024-00527-3.

[8] Z. Qiu, C. W. Ju, L. Frédéric, Y. Hu, D. Schollmeyer, G. Pieters, K. Müllen, A. Narita, *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 4661-4667, https://doi.org/10.1021/jacs.0c13197.

[9] Y. Ma, L. Zhou, J. Tan, W. Sun, Y. Zou, Y. Hu, *Adv. Optical Mater* **2025**, *13*, 2402446, https://doi.org/10.1002/adom.202402446.

[10] R. Yamano, Y. Shibata, K. Tanaka, *Chem. – Eur. J.* **2018**, *24*, 6364-6370, https://doi.org/10.1002/chem.201706008.

[11] G. Huo, W. Xu, J. Hu, Y. Han, W. Fan, W. Wang, Z. Sun, H. Yang, J. Wu, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2025**, *64*, e202416707, https://doi.org/10.1002/anie.202416707.

[12] W. Niu, Y. Fu, Z.-L. Qiu, C. J. Schürmann, S. Obermann, F. Liu, A. A. Popov, H. Komber, J. Ma, X. Feng, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 26824-26832, https://doi.org/10.1021/jacs.3c01088.

[13] P. Izquierdo-García, J. M. Fernández-García, S. Medina Rivero, M. Šámal, J. Rybáček, L. Bednárová, S. Ramírez-Barroso, F. J. Ramírez, R. Rodríguez, J. Perles, D. García-Fresnadillo, J. Crassous, J. Casado, I. G. Stará, N. Martín, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 11599-11610, https://doi.org/10.1021/jacs.3c01088.

[14] Y. Wada, K. Shinohara, T. Ikai, *Chem. Commun.* **2019**, *55*, 11386-11389, https://doi.org/10.1039/C9CC06025A.

[15] M. Buendía, J. M. Fernández-García, J. Perles, S. Filippone, N. Martín, *Nat. Synth.* **2024**, *3*, 545-553, https://doi.org/10.1038/s44160-024-00484-x.

[16] C. M. Cruz, I. R. Márquez, I. F. A. Mariz, V. Blanco, C. Sánchez-Sánchez, J. M. Sobrado, J. A. Martín-Gago, J. M. Cuerva, E. Maçôas, A. G. Campaña, *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 3917-3924, https://doi.org/10.1039/C8SC00427G.

[17] V. Kumar, G. Venugopal, A. B. Jadhav, S. D. Dongre, R. Gonnade, J. Kumar, P. C. Ruer, B. Hupp, A. Steffen, S. S. Babu, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2025**, *64*, https://doi.org/10.1002/anie.202422125.

[18] P. Izquierdo-García, J. M. Fernández-García, J. Perles, N. Martín, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 34943-34949, https://doi.org/10.1021/jacs.4c14544.

[19] S. Li, R. Li, Y. K. Zhang, S. Wang, B. Ma, B. Zhang, P. An, *Chem. Sci.* **2023**, *14*, 3286-3292, https://doi.org/10.1039/D2SC06244E.

[20] W. Niu, Y. Fu, Q. Deng, Z. L. Qiu, F. Liu, A. A. Popov, H. Komber, J. Ma, X. Feng, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2024**, *63*, e202319874, https://doi.org/10.1002/anie.202319874.

[21] S. Míguez-Lago, I. F. A. Mariz, M. A. Medel, J. M. Cuerva, E. Maçôas, C. M. Cruz, A. G. Campaña, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 10267-10272, https://doi.org/10.1039/D2SC03452B.

[22] X. Y. Wang, J. Bai, Y. J. Shen, Z. A. Li, H. Y. Gong, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2025**, *64*, e202417745, https://doi.org/10.1002/anie.202417745.

[23] K.-L. Zhu, Z.-A. Li, J. Liang, K.-L. Zou, Y.-J. Shen, H.-Y. Gong, K. Zhu, Z. Li, J. Liang, K. Zou, Y. Shen, H. Gong, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2024**, e202409713, https://doi.org/10.1002/anie.202409713.

[24] Y.-J. Shen, L.-J. Peng, L.-N. Diao, N.-T. Yao, W.-K. Chen, Y. Yang, M. Qiu, W.-X. Zhu, X. Li, X.-Y. Wang, H.-Y. Gong, *Org. Lett.* **2024**, *26*, 7279-7284, https://doi.org/10.1021/acs.orglett.4c02093.

[25] C. M. Cruz, I. R. Márquez, S. Castro-Fernández, J. M. Cuerva, E. Maçôas, A. G. Campaña, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2019**, *58*, 8068-8072, https://doi.org/10.1002/anie.201902529.

[26] R. G. Uceda, C. M. Cruz, S. Míguez-Lago, L. Á. de Cienfuegos, G. Longhi, D. A. Pelta, P. Novoa, A. J. Mota, J. M. Cuerva, D. Miguel, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2024**, *63*, e202316696, https://doi.org/10.1002/anie.202316696.

[27] R. G. Uceda, A. Gijón, S. Míguez-Lago, C. M. Cruz, L. Álvarez de Cienfuegos, A. J. Mota, D. Miguel, J. M. Cuerva, *ChemPhotoChem* **2025**, *9*, e202500079, https://doi.org/10.1002/cptc.202500079.

[28] R. G. Uceda, A. Gijón, S. Míguez-Lago, C. M. Cruz, V. Blanco, F. Fernández-Álvarez, L. Álvarez de Cienfuegos, M. Molina-Solana, J. Gómez-Romero, D. Miguel, A. J. Mota, J. M. Cuerva, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2024**, *63*, e202409998, https://doi.org/10.1002/ange.202409998.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

José Luis Páez Castañeda

Departamento de Química Orgánica, Unidad de Excelencia de Química (UEQ), Facultad de Ciencias, Universidad de Granada. Avda. Fuente Nueva s/n, 18071 Granada, España

C-e: joseluispc@ugr.es

ORCID: 0009-0005-8904-5479

Investigador Predoctoral en el Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Granada. Obtuvo su Grado (2021) y su máster (2023) en Química en la Universidad de Granada bajo la supervisión del Prof. Juan M. Cuerva y el Dr. Carlos M. Cruz. Se incorporó al grupo MOReFUN en 2023 como estudiante de doctorado bajo la supervisión del Dr. Carlos M. Cruz y la Prof. Araceli G. Campaña financiado por una beca predoctoral FPI del MICIU/AEI/ESF+.

Lidia Hortigüela Vázquez

Departamento de Química Orgánica, Unidad de Excelencia de Química (UEQ), Facultad de Ciencias, Universidad de Granada. Avda. Fuente Nueva s/n, 18071 Granada, España

C-e: lidiahv@ugr.es

ORCID: 0000-0001-5057-5599

Investigadora predoctoral en el Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Granada. Obtuvo el Grado en Química en la Universidad de Burgos (2019) y el Máster en Química en la Universidad de Granada (2021). Se incorporó al grupo MOReFUN en 2022 como estudiante de doctorado bajo la supervisión de la Prof. Araceli G. Campaña y la Prof. Sara P. Morcillo Martínez financiada por una beca predoctoral de la Junta de Andalucía

Carlos Moreno Cruz

Departamento de Química Orgánica, Unidad de Excelencia de Química (UEQ), Facultad de Ciencias, Universidad de Granada. Avda. Fuente Nueva s/n, 18071 Granada, España

C-e: cmorenoc@ugr.es

ORCID: 0000-0002-0676-5210

Investigador Ramón y Cajal en el Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Granada y líder del equipo SPIRANT dentro del Grupo MOReFUN. Obtuvo su doctorado en 2020 bajo la supervisión de la Prof. Araceli G. Campaña y el Prof. Juan M. Cuerva. Se incorporó al grupo del Prof. Michal Juríček en la Universidad de Zúrich como investigador postdoctoral antes de ser nombrado investigador postdoctoral de la Junta de Andalucía en 2022 en la Universidad de Granada y posteriormente investigador RyC desde 2025.

Araceli González Campaña

Departamento de Química Orgánica, Unidad de Excelencia de Química (UEQ), Facultad de Ciencias, Universidad de Granada. Avda. Fuente Nueva s/n, 18071 Granada, España

C-e: araceligc@ugr.es

ORCID: 0000-0001-5483-5642

Profesora Titular del Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Granada, donde dirige el equipo NanographOUT dentro del Grupo MOReFUN. Obtuvo su doctorado en Química por la UGR en 2008 bajo la supervisión del Prof. Juan M. Cuerva y el Prof. J. Enrique Oltra. Tras realizar investigaciones posdoctorales en la Universidad Autónoma de Madrid (grupo del Prof. Diego J. Cárdenas) y en la Universidad de Edimburgo (grupo del Prof. David A. Leigh), ocupó el puesto de investigadora Ramón y Cajal en la UGR antes de asumir su actual cargo académico en 2020.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2097

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 308-313
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2098

La revista de la Real Sociedad Española de Química

INVESTIGACIÓN QUÍMICA

Fusionando bencenos a demanda: integrando química orgánica y síntesis sobre superficie

Fusing benzenes on demand: integrating organic chemistry and on-surface synthesis

Iago Pozo, Dolores Pérez y Diego Peña*

Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) y Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela.

PALABRAS CLAVE:

Ciencia sobre superficie
Microscopías avanzadas
Nanografenos
Manipulación atómica
Reactividad sobre superficies

RESUMEN:

La integración de la química orgánica con la ciencia de superficies ha permitido avanzar en la síntesis de nanografenos mediante la fusión controlada de anillos bencénicos. Además, las mejoras en las microscopías por sonda de barrido han permitido caracterizar estas nanoestructuras con resolución submolecular. Aunque el desarrollo de la síntesis sobre superficie es relativamente reciente, se han identificado algunas transformaciones que permiten acceder a estructuras fascinantes. La mayoría de las metodologías actuales emplean reacciones inducidas térmicamente y promovidas por superficies metálicas. Sin embargo, también se han introducido estrategias que permiten llevar a cabo reacciones sobre superficies aislantes, por ejemplo, mediante la aplicación de pulsos de voltaje desde la punta del microscopio. Este artículo recoge algunos ejemplos destacados en este campo científico emergente en la interfase entre disciplinas.

KEYWORDS:

On-surface science
Advanced microscopies
Nanographenes
Atomic manipulation
Reactivity on surfaces

ABSTRACT:

The integration of organic chemistry with surface science has enabled advances in the synthesis of nanographenes through the controlled fusion of benzenoid rings. Moreover, improvements in scanning probe microscopies have allowed the characterization of these nanostructures with submolecular resolution. Although on surface synthesis is still relatively recent, several transformations have been identified that provide access to fascinating structures. Most current methodologies employ thermally induced reactions promoted by metallic surfaces. However, existing strategies enable reactions on insulating surfaces, for example, through the application of voltage pulses from the microscope tip. This article highlights selected examples in this emerging scientific field at the interface between disciplines.

En 2009, el grupo de Leo Gross en IBM Zurich logró por primera vez visualizar moléculas individuales de pentaceno con resolución submolecular.[1] Este hito fue posible gracias al desarrollo de técnicas avanzadas como la microscopía de fuerza atómica (AFM) y la microscopía de efecto túnel (STM), operando en condiciones de ultra alto vacío, temperaturas criogénicas (< 10 K) y puntas funcionalizadas con una única molécula de monóxido de carbono (CO). En estas condiciones es posible discriminar los órdenes de enlace en moléculas individuales[2] o los cambios estructurales en función del estado de oxidación de la molécula depositada sobre NaCl.[3] Además, estos microscopios de sonda de barrido no solo posibilitan la visualización de moléculas individuales, sino que también permiten estudiar sus propiedades electrónicas, por ejemplo, mediante espectroscopía de efecto túnel (STS).[4]

Paralelamente a la evolución de estas microscopías de sonda de barrido, el avance en las transformaciones químicas sobre superficie ha permitido acceder a un gran número de nanoestructuras de carbono con propiedades relevantes. Mientras que algunas de estas transformaciones se han conseguido mediante la aplicación de pulsos eléctricos desde la punta del microscopio,[5,6] lo que permite realizar reacciones unimoleculares, en otros procesos se aprovecha la reactividad de la superficie metálica como catalizador,[7,8] abriendo el camino para la síntesis de materiales poliméricos.[9,10]

Los nanografenos, nanoestructuras de carbono resultado de fusionar anillos bencénicos de forma definida, son una de las familias moleculares más investigadas en el campo de la ciencia sobre superficie. La mayoría de los nanografenos presentan una estructura plana, por lo que su solubilidad es muy baja, obstaculizando en muchos casos su caracterización y el estudio de sus propiedades. Sin embargo, esta geometría plana es una ventaja para su estudio sobre superficie, ya que permite obtener imágenes de gran calidad mediante AFM y STM. Un ejemplo significativo es el del kekuleno, un nanografeno icónico cuya síntesis, originalmente descrita por Diederich y Staab,[11] fue optimizada en 2019 mediante química de arinos.[12] Esta nueva aproximación sintética utiliza una doble reacción de Diels-Alder entre dos moléculas de estireno y el 1,4-benzodiino (Figura 1a). La caracterización del kekuleno sobre una

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: I. Pozo, D. Pérez, D. Peña. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 308-313, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2098

* C-e: diego.pena@usc.es

Manuscrito recibido: 04/12/2025 · aceptado: 09/12/2025

superficie de cobre mediante AFM proporcionó imágenes de moléculas individuales con una calidad suficiente como para poder determinar su estructura electrónica, caracterizada por la presencia de seis sextetes aromáticos conectados por dobles enlaces localizados en los vértices de la estructura hexagonal (Figura 1b).[12] La combinación de AFM/STM se ha utilizado también para caracterizar otros nanografenos, como uno con forma de trébol formado por la fusión de 22 anillos bencénicos[13] u otro de estructura dendrítica formado por 19 anillos *cata*-fusionados.[14]

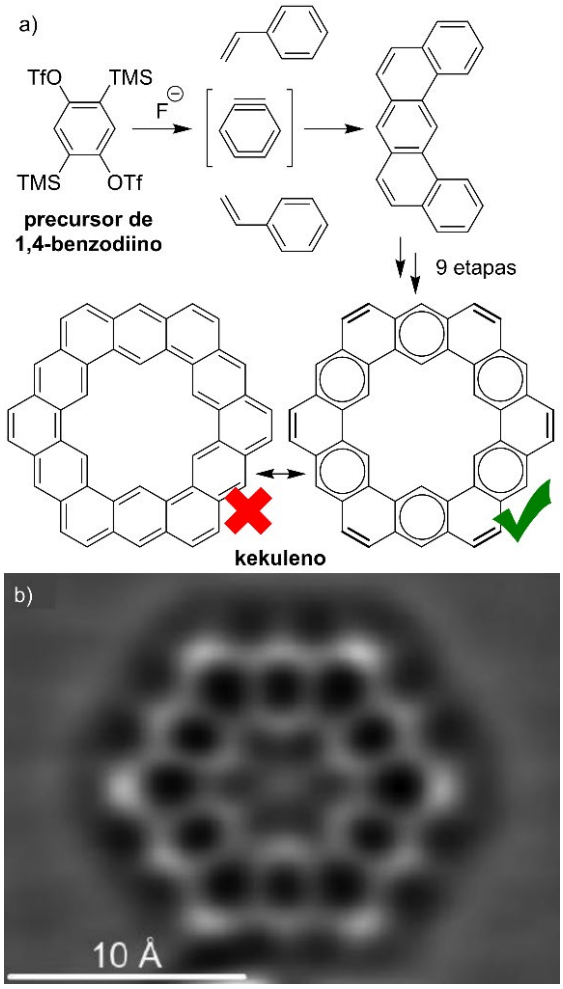


Figura 1. a) Síntesis y b) imagen de AFM del kekuleno. Reproducida de Ref. [12]. Copyright (2019, *ACS AuthorChoice*) con permiso de la ACS.

La síntesis de los nanografenos mencionados anteriormente se llevó a cabo en disolución, y únicamente su caracterización estructural tuvo lugar sobre superficie. Sin embargo, debido a su insolubilidad, los nanografenos preparados de esta forma suelen encontrarse mezclados con subproductos, también insolubles, que dificultan su estudio. Una alternativa consiste en el diseño de precursores de nanografeno solubles, fácilmente purificables mediante técnicas cromatográficas, lo que garantiza una elevada pureza y una manipulación sencilla. A continuación, estos precursores pueden transformarse sobre superficie para dar lugar a los nanografenos objetivo. El descubrimiento de nuevas transformaciones químicas sobre superficie ha abierto un amplio abanico de posibilidades sintéticas.[15] A continuación, se recogen algunas de las reacciones químicas más empleadas para la síntesis de hidrocarburos policíclicos aromáticos (HPAs) y nanografenos sobre superficie.

Síntesis de nanografenos sobre superficie

La química sintética sobre superficie ha experimentado un notable crecimiento en los últimos años. Posiblemente, las reacciones de ciclodeshidrogenación y los acoplamientos tipo Ullmann son las reacciones más empleadas para la obtención de estructuras grafénicas. Los avances en el campo son continuos y el arsenal de métodos sintéticos ha aumentado especialmente en los últimos años.

Ciclodeshidrogenación

Tradicionalmente, la reacción de Scholl ha sido ampliamente empleada para la síntesis de nanografenos en disolución, ya que facilita el acoplamiento intramolecular entre carbonos bencénicos.[16] La versión de esta reacción sobre superficie resulta sorprendentemente sencilla: el tratamiento térmico bajo condiciones de UHV de un precursor de nanografeno depositado sobre una superficie metálica es suficiente para inducir una cascada de ciclodeshidrogenaciones, especialmente si el producto final es plano.

Uno de los primeros trabajos en esta dirección fue la síntesis de hexabenzocoroneno a partir de hexafenilbenceno.[17] Para ello, el compuesto de partida se calentó sobre Cu(111) a 710 K. Desde la publicación de este trabajo en 1999, la colaboración entre grupos de investigación especializados en química orgánica y en ciencia de superficies ha empleado esta aproximación para la preparación de nanografenos estructuralmente complejos, cuya síntesis y estudio en disolución habrían sido extremadamente complicadas.[18]

La ciclodeshidrogenación sobre superficie no solo permite realizar transformaciones similares a la reacción de Scholl, sino que además permite formar enlaces C–C anteriormente inalcanzables. En 2019, una colaboración entre nuestro grupo de investigación y el de Szymon Godlewski, describió la síntesis del nanografeno poroso **1** (Figura 2a).[19] El precursor del nanografeno, el poliareno **2**, se sintetizó mediante una reacción de ciclotrimerización catalizada por paladio del arino generado a partir del triflato **3**. El compuesto **2** se sublimó sobre una superficie de oro, que se calentó para inducir dos tipos de ciclodeshidrogenaciones secuenciales. Primero, a 300 °C, se indujo la formación de enlaces C–C entre fenilos de cada una de las tres aspas de la molécula (señalados en azul, **4**). Posteriormente, el calentamiento a 370 °C condujo a la formación del producto **1** a través de la formación de enlaces C–C entre aspas (enlaces señalados en rojo, Figura 2a).[19] En la imagen de AFM se puede observar que este nanografeno no es plano, debido al impedimento estérico entre los hidrógenos de los poros. De hecho, es posible observar cómo el trifenileno central se encuentra más próximo a la superficie que el resto de la molécula (Figura 2b). La formación de anillos de tipo [14]anuleno mediante ciclodeshidrogenación no se ha observado en disolución, pero sí en otros sustratos similares sobre superficies.[20]

Acoplamientos tipo Ullmann y Glaser

La reacción de Ullmann es un acoplamiento entre átomos de carbono arílicos a partir de los correspondientes haluros de arilo.[21] Esta reacción puede realizarse sobre superficie de dos maneras distintas; i) térmicamente, sobre sustratos metálicos[22,23] o ii) eléctricamente, mediante pulsos de voltaje aplicados con la punta de un microscopio STM.[5,24] Se trata de un acoplamiento muy empleado en síntesis sobre superficie, en especial, en combinación con la re-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

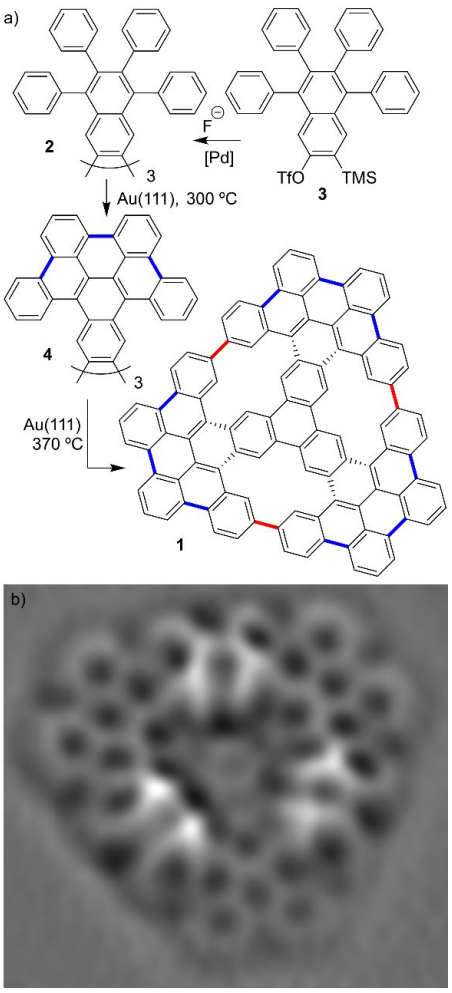


Figura 2. a) Síntesis y b) imagen de AFM del nanografeno **1**. Reproducido de Ref. [18]. CC BY 3.0 license con permiso de la RSC.

acción de ciclodeshidrogenación para dar lugar a diferentes nanografenos[25] o incluso cintas de grafeno.[26] Otro acoplamiento que se ha demostrado sobre superficie es la reacción de Glaser. En este proceso dos alquinos terminales sufren un acoplamiento deshidrogenativo. Sin embargo, la eficiencia de esta reacción es moderada, ya que los alquinos terminales adsorbidos sobre superficies metálicas pueden participar en otras reacciones.[27]

El acoplamiento Ullmann sobre superficies permite la formación de anillos de ciclobutadieno[28,29] y de anillos de ocho miembros.[30,31] Además, destaca por su utilidad en la síntesis de sistemas macrocíclicos, cuya preparación en disolución es complicada. Por ejemplo, el tratamiento térmico del dibromo-*meta*-terfenilo sobre una superficie de cobre conduce a la formación de un macrociclo hexagonal compuesto por 18 anillos bencénicos.[32] Otra variante de esta reacción son los acoplamientos de dibromuros geminales. Concretamente, la introducción de unidades $=CBr_2$ en derivados de aceno permite generar carbenos que acoplan sobre superficie obteniéndose polímeros donde los núcleos aromáticos se unen mediante puentes de etinileno.[33] Por otro lado, un caso representativo del acoplamiento tipo Glaser se representa en la Figura 3. El compuesto **5** oligomeriza sobre una superficie de oro dando lugar, entre otras nanoestructuras, al macrociclo **6**.[34]

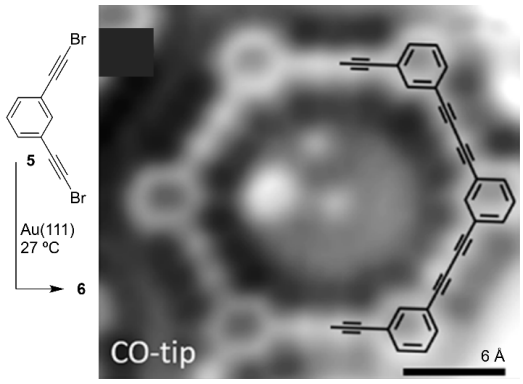


Figura 3. Síntesis e imagen de AFM del macrociclo **6**. Reproducido de Ref. [29]. Copyright (2018) con permiso de la ACS.

Deshidrogenación y desoxigenación

Una ventaja clave del estudio de moléculas sobre superficie en condiciones de UHV y a temperatura criogénica es la posibilidad de acceder a compuestos altamente reactivos, como los nanografenos de capa abierta (e.g. triangulenos). De hecho, la primera generación del [3]trianguleno se logró sobre superficie, mediante ruptura de enlaces C–H inducida por pulsos de voltaje desde la punta del STM, a partir de un precursor hidrogenado.[35] De forma similar se generó el azatrianguleno **7** a partir del precursor hidrogenado **8** (depositado sobre oro Figura 4).[36] Otros derivados de trianguleno se han obtenido combinando reacciones de acoplamiento C–C y deshidrogenaciones.[37-40]

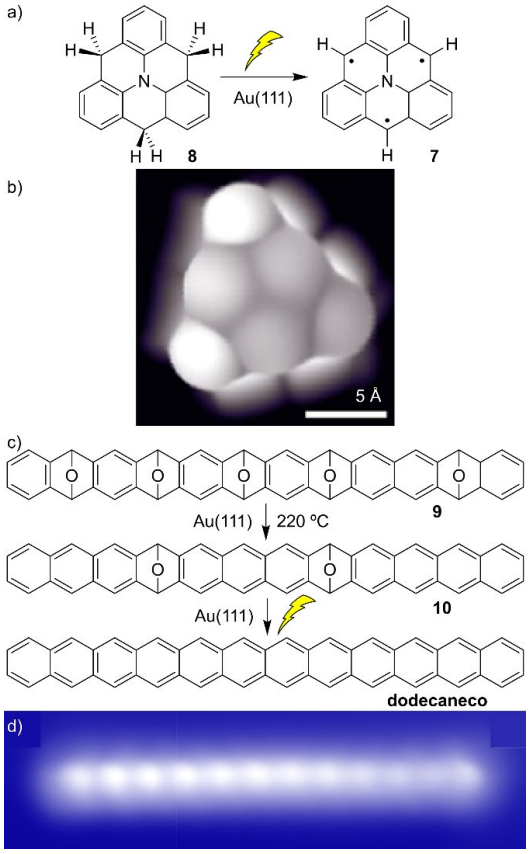


Figura 4. a) Síntesis y b) imagen de AFM del azatrianguleno **7**. c) Síntesis y d) imagen de STM del dodecaceno. Reproducidas de Refs. [32] y 35. CC-BY 4.0 license y Copyright (2019) con permiso de la ACS.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

La desoxigenación sobre superficie también se ha empleado para generar y estudiar especies moleculares que son demasiado reactivas para ser estudiadas bajo condiciones ambientales. Un caso especialmente interesante es la generación de acenos de gran tamaño, compuestos nanométricos resultado de la fusión lineal de anillos bencénicos que presentan propiedades electrónicas relevantes.[41,42] Por ejemplo, para la generación del dodecaceno se depositó por sublimación el precursor **9** sobre una superficie de oro, que se sometió a calentamiento para producir la desoxigenación parcial, originando epoxiacenos como el compuesto **10**. Seguidamente, la aplicación de pulsos de voltaje promovió la extrusión de los oxígenos restantes dando lugar al dodecaceno.[42] Debido a la estabilidad conferida por la superficie y las condiciones de ultra alto vacío ha sido posible estudiar las propiedades electrónicas de esta molécula. Más recientemente, se ha conseguido generar acenos superiores como el tridecaceno[43] y el pentadecaceno[44] mediante técnicas de síntesis sobre superficie. Por otro lado, la desoxigenación sobre superficie se empleó para generar el [19]estarfeno, un poliareno en forma de estrella formado por la fusión *cata* de 19 anillos bencénicos.[45]

Otras reacciones conocidas en disolución han sido utilizadas en la síntesis sobre superficie de HPAs y nanografenos, como por ejemplo, las reacciones de extrusión de monóxido de carbono[46,47] y la reacción hexadehidro-Diels-Alder transanular.[48] Además, el uso combinado de varias de estas reacciones proporciona rutas sintéticas eficientes para la preparación de diversos nanografenos porosos.[49-52] Por ejemplo, la polimerización mediante reacciones de tipo Ullmann del compuesto **11** a 200 °C y posterior ciclodeshidrogenación del macrociclo **12** a 380 °C da lugar al nanografeno macrocíclico **13**,[50] cuya síntesis en disolución habría sido un desafío formidable.

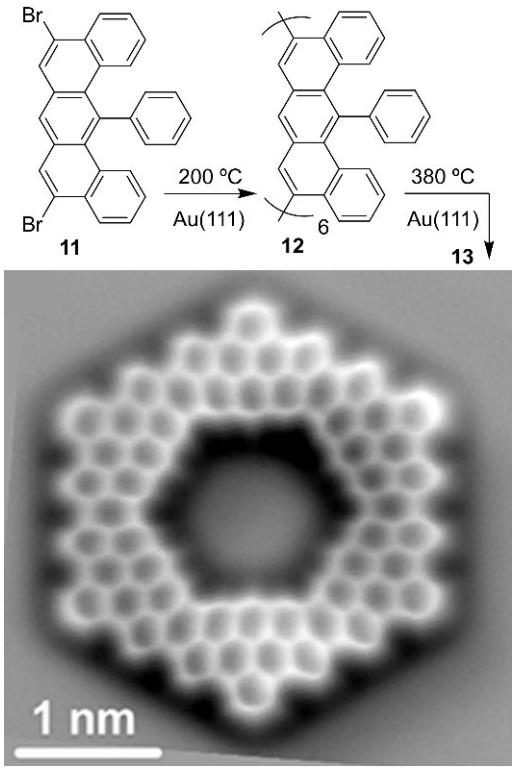


Figura 5. Síntesis e imagen de AFM del nanografeno **13**. Reproducido de Ref. [40]. CC-BY license con permiso de la ACS.

Estos y otros avances evidencian el potencial de este campo. Por ejemplo, en 2022 se consiguió controlar la selectividad de una reacción en una molécula individual con un estímulo externo; es decir, se obtuvo uno u otro producto en función de la intensidad y la polaridad del pulso eléctrico aplicado.[6] Por otro lado, recientemente se ha desarrollado un protocolo que permite realizar ciclodeshidrogenaciones sobre un amplia variedad de superficies no metálicas, gracias a la utilización de hidrógeno atómico como catalizador.[53] Además, se están describiendo nuevos tipos de reactividad, no conocidas antes en disolución, que contribuyen a ampliar las herramientas sintéticas sobre superficie, como es el caso del acoplamiento indeníli-co.[54] El estudio del alcance de estos descubrimientos, así como la exploración de nuevas posibilidades, conforman un fructífero campo de investigación para los próximos años.

Conclusiones

En los últimos años, las microscopías de sonda de barrido han dejado de ser meras técnicas de caracterización de superficies y nanoestructuras planas para mostrar signos claros de su potencial en diversas disciplinas científicas. De hecho, la integración de la ciencia de superficies con la química orgánica ha supuesto el inicio de un nuevo campo de investigación con capacidad para resolver problemas científicos relevantes en las ciencias moleculares. Inicialmente, las reacciones descritas sobre superficie eran versiones conocidas de las desarrolladas en disolución. Más recientemente se están incorporando reacciones completamente nuevas e inesperadas al arsenal de la síntesis sobre superficie. Globalmente, transformaciones químicas como la ciclodeshidrogenación, y los acoplamientos tipo Ullmann se han consolidado como procesos robustos sobre superficie, hasta el punto de permitir su combinación secuencial para la obtención de nanografenos con arquitecturas estructurales fascinantes. No cabe duda de que los avances recientes evidencian el enorme potencial de crecimiento de este campo de investigación en los próximos años.

Bibliografía

[1] L. Gross, F. Mohn, N. Moll, P. Liljeroth, G. Meyer, *Science* **2009**, *325*, 1110-1114, https://doi.org/10.1126/science.1176210.

[2] L. Gross, F. Mohn, N. Moll, B. Schuler, A. Criado, E. Guitián, D. Peña, A. Gourdon, G. Meyer, *Science* **2012**, *337*, 1326-1329, https://doi.org/10.1126/science.1225621.

[3] S. Fatayer, F. Albrecht, Y. Zhang, D. Urbonas, D. Peña, N. Moll, L. Gross, *Science* **2019**, *365*. 142-145, https://doi.org/10.1126/science.aax5895.

[4] L. Gross, B. Schuler, N. Pavliček, S. Fatayer, Z. Majzik, N. Moll, D. Peña, G. Meyer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 3888-3908, https://doi.org/10.1002/anie.201703509.

[5] S.-W. Hla, L. Bartels, G. Meyer, K.-H. Rieder, *Phys. Rev. Lett.* **2000**, *85*, 2777-2780, https://doi.org/10.1002/anie.201703509.

[6] F. Albrecht, S. Fatayer, I. Pozo, I. Tavernelli, J. Repp, D. Peña, L. Gross, *Science* **2022**, *377*, 298-301, https://doi.org/10.1126/science.abo6471.

[7] L. Grill, M. Dyer, L. Lafferentz, M. Persson, M. V. Peters, S. Hecht ,*Nat. Nanotechnol.* **2007**, *2*, 687-691, https://www.nature.com/articles/nnano.2007.346.

[8] S. Clair, D. G. de Oteyza, *Chem. Rev.* **2019**, 119, 4717-4776, https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00601.

[9] C. Moreno, M. Vilas-Varela, B. Kretz, A. García-Leuke, M. V. Costache, M. Paradinas, M. Panighel, G. Ceballos, S. O. Valenzuela, D. Peña, A. Mugarza, *Science* **2018**, *360*, 199-203, https://

© 2025 Real Sociedad Española de Química

www.science.org/doi/10.1126/science.aar2009.
[10] Q. Fan, L. Yan, M. W. Tripp, O. Krejčí, S. Dimosthenous, S. R. Kachel, M. Chen, A. S. Foster, U. Koert, P. Liljeroth, J. M. Gottfried, *Science* **2021**, *372*, 852-856, https://doi.org/10.1126/science.abg4509.
[11] H. A. Staab, F. Diederich, *Chem. Ber.* **1983**, *116*, 3487-3503, https://doi.org/10.1002/cber.19831161021.
[12] I. Pozo, Z. Majzik, N. Pavliček, M. Melle-Franco, E. Guitián, D. Peña, L. Gross, D. Pérez, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 15488-15493, https://doi.org/10.1021/jacs.9b07926.
[13] B. Schuler, S. Collazos, L. Gross, G. Meyer, D. Pérez, E. Guitián, D. Peña, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 9004-9006, https://doi.org/10.1002/anie.201403707.
[14] M. Vilas-Varela, S. Fatayer, Z. Majzik, D. Pérez, E. Guitián, L. Gross, D. Peña, *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 17697-17700, https://doi.org/10.1002/chem.201805140.
[15] I. Pozo, D. Pérez, D. Pérez en *Molecular Nanographenes: Synthesis, Properties, and Applications,* (Eds.: N. Martín, C. P. Nuckolls), Wiley, Germany, **2025**, pp. 363-380.
[16] R. S. Jassas, E. U. Mughal, A. Sadiq, R. I. Alsantali, M. M. Al-Rooqi, N. Naeem, Z. Moussa, S. A. Ahmed, *RSC Adv.* **2021**, *11*, 32158-32202, https://doi.org/10.1039/D1RA05910F.
[17] K. Weiss, G. Beernink, F. Dötz, A. Birkner, K. Müllen C. H. Wöll, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1999**, *38*, 3748-3752, https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3773(19991216)38:24%3C3748::AID-ANIE3748%3E3.0.CO;2-0.
[18] M. Treier, C. A. Pignedoli, T. Laino, R. Rieger, K. Müllen, D. Passerone, R. Fasel, *Nat. Chem.* **2011**, 3, 61-67, https://doi.org/10.1038/nchem.891.
[19] R. Zuzak, I. Pozo, M. Engelund, A. Garcia-Lekue, M. Vilas-Varela, J. M. Alonso, M. Szymonski, E. Guitián, D. Pérez, S. Godlewski, D. Peña, *Chem. Sci.* **2019**, *10*, 10143-10148, https://doi.org/10.1039/C9SC03404H.
[20] K. Xu, J. Urgel, K. Eimre, M. Di Giovannantonio, A. Keerthi, H. Komber S. Wang, A. Narita, R. Berger, P. Ruffieux, C. A. Pignedoli, J. Liu, K. Müllen, R. Fasel, X. Feng, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 7726-7730, https://doi.org/10.1021/jacs.9b03554.
[21] F. Ullmann, *Justus Liebigs Ann. Chem.* **1904**, *332*, 38-81, https://doi.org/10.1002/jlac.19043320104.
[22] E. Charles, H. Sykes, Patrick Han, S. Alex Kandel, Kevin F. Kelly, Gregory S. McCarty, P. S. Weiss, *Acc. Chem. Res.* **2003**, *36*, 945-953, https://doi.org/10.1021/ar970286l.
[23] S. Zint, D. Ebeling, T. Schlöder, S. Ahles, D. Mollenhauer, H. A. Wegner, A. Schirmeisen, *ACS Nano* **2017**, *11*, 4183-4190, https://doi.org/10.1021/acsnano.7b01109.
[24] Q. Zhong, A. Ihle, S. Ahles, H. A. Wegner, A. Schirmeisen, D. Ebeling, *Nat. Chem.* **2021**, 13, 1133-1139, https://www.nature.com/articles/s41557-021-00773-4.
[25] J. Hieulle, E. Carbonell-Sanromà, M. Vilas-Varela, A. Garcia-Lekue, E. Guitián, D. Peña, J. I. Pascual, *Nano Lett.* **2018**, *18*, 418-423, https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b04309.
[26] J. Cai, P. Ruffieux, R. Jaafar, M. Bieri, T. Braun, S. Blankenburg, M. Muoth, A. P. Seitsonen, M. Saleh, X. Feng, K. Müllen, R. Fasel, *Nature* **2010**, *466*, 470-47, https://doi.org/10.1038/nature09211.
[27] J. Lawrence, M. S. G. Mohammed, D. Rey, F. Aguilar-Galindo, A. Berdonces-Layunta, D. Peña, D. G. de Oteyza, *ACS Nano* **2021**, *15*, 4937-4946, https://doi.org/10.1021/acsnano.0c09756.
[28] S. Kawai, K. Takahashi, S. Ito, R. Pawlak, T. Meier, P. Spijker, F. F. Canova, J. Tracey, K. Nozaki, A. S. Foster, E. Meyer, *ACS Nano* **2017**, *11*, 8122-8130, https://doi.org/10.1021/acsnano.7b02973.
[29] C. Sánchez-Sánchez, A. Nicolaï, F. Rossel, J. Cai, J. Liu, X. Feng, K. Müllen, P. Ruffieux, R. Fasel, V. Meunier, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139, 17617-17623, https://doi.org/10.1021/jacs.7b10026.
[30] Z. Zeng, D. Guo, T. Wang, Q. Chen, A. Matěj, J. Huang, D. Han, Q. Xu, A. Zhao, P. Jelínek, D. G. de Oteyza, J.-S. McEwen, J. Zhu, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 723-732, https://doi.org/10.1021/jacs.1c08284.
[31] J. P. Calupitan, T. Wang, A. P. Paz, B. Álvarez, A. Berdonces-Layunta, P. Angulo-Portugal, R. Castrillo-Bodero, F. Schiller, D. Peña, M. Corso, D. Pérez, D. G. de Oteyza, *J. Phys. Chem. Lett.* **2023**, *14*, 947-953, https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.2c03346.
[32] Q. Fan, C. Wang, Y. Han, J. Zhu, W. Hieringer, J. Kuttner, G. Hilt, J. M. Gottfried, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 4668-4672, https://doi.org/10.1002/anie.201300610.
[33] A. Sánchez-Grande, B. de la Torre, J. Santos, B. Cirera, K. Lauwaet, T. Chutora, S. Edalatmanesh, P. Mutombo, J. Rosen, R. Zbořil, R. Miranda, J. Björk, P. Jelínek, N. Martín, D. Écija, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 6559-6563, https://doi.org/10.1002/anie.201814154.
[34] M. Liu, S. Li, J. Zhou, Z. Zha, J. Pan, X. Li, J. Zhang, Z. Liu, Y. Li, X. Qiu, *ACS Nano* **2018**, *12*, 12612-12618, https://doi.org/10.1021/acsnano.8b07349.
[35] N. Pavliček, A. Mistry, Z. Majzik, N. Moll, G. Meyer, D. J. Fox, L. Gross, *Nat. Nanotechnol.* **2017**, *12*, 308-311, https://doi.org/10.1038/nnano.2016.305.
[36] T. Wang, A. Berdonces-Layunta, N. Friedrich, M. Vilas-Varela, J. P. Calupitan, J. I. Pascual, D. Peña, D. Casanova, M. Corso, D. G. de Oteyza, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 4522-4529, https://doi.org/10.1021/jacs.1c12618.
[37] S. Mishra, D. Beyer, K. Eimre, J. Liu, R. Berger, O. Gröning, C. A. Pignedoli, K. Müllen, R. Fasel, X. Feng, P. Ruffieux, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 10621-10625, https://doi.org/10.1021/jacs.9b05319.
[38] J. Su, M. Telychko, P. Hu, G. Macam, P. Mutombo, H. Zhang, Y. Bao, F. Cheng, Z.-Q. Huang, Z. Qiu, S. J. R. Tan, H. Lin, P. Jelínek, F.-C. Chuang, J. Wu, J. Lu, *Sci. Adv.* **2019**, 5, eaav7717, https://doi.org/10.1126/sciadv.aav7717.
[39] S. Mishra, K. Xu, K. Eimre, H. Komber, J. Ma, C. A. Pignedoli, R. Fasel, X. Feng, P. Ruffieux, *Nanoscale* **2021**, *13*, 1624-1628, https://doi.org/10.1039/D0NR08181G.
[40] J. Hieulle, S. Castro, N. Friedrich, A. Vegliante, F. R. Lara, S. Sanz, D. Rey, M. Corso, T. Frederiksen, J. I Pascual, D. Peña, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 25224-25229, https://doi.org/10.1002/anie.202108301.
[41] J. Krüger, F. García, F. Eisenhut, D. Skidin, J. M. Alonso, E. Guitián, D. Pérez, G. Cuniberti, F. Moresco, D. Peña, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 11945-11948, https://doi.org/10.1002/anie.201706156.
[42] F. Eisenhut, T. Kühne, F. García, S. Fernández, E. Guitián, D. Pérez, G. Trinquier, G. Cuniberti, C. Joachim, D. Peña, F. Moresco, *ACS Nano* **2020**, *14*, 1011-1017, https://doi.org/10.1021/acsnano.9b08456.
[43] R. Zuzak, M. Kumar, O. Stoica, D. Soler-Polo, J. Brabec, K. Pernal, L. Veis, R. Blieck, A. M. Echavarren, P. Jelinek, S. Godlewski, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, *63*, e202317091, https://doi-org.ezbusc.usc.gal/10.1002/anie.202317091.
[44] Z. Ruan, J. Schramm, J. B. Bauer, T. Naumann, L. V. Müller, F. Sättele, H. F. Bettinger, R. Tonner-Zech, J. M. Gottfried, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 4862-4870, https://doi.org/10.1021/jacs.4c13296.
[45] J. Besteiro-Sáez, L. M. Mateo, S. Salaverría, T. Wang, P. Angulo-Portugal, J. P. Calupitan, J. Rodríguez-Fernández, A. García-Fuente, J. Ferrer, D. Pérez, M. Corso, D. G. de Oteyza, D. Peña, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, *63*, e202411861.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.1002/anie.202411861.
[46] M. Zugermeier, M. Gruber, M. Schmid, B. P. Klein, L. Ruppenthal, P. Müller, R. Einholz, W. Hieringer, R. Berndt, H. F. Bettinger, J. Michael Gottfried, *Nanoscale* **2017**, *9*, 12461-12469, https://doi.org/10.1039/C7NR04157H.
[47] J. I. Urgel, S. Mishra, H. Hayashi, J. Wilhelm, C. A. Pignedoli, M. Di Giovannantonio, R. Widmer, M. Yamashita, N. Hieda, P. Ruffieux, H. Yamada, R. Fasel, *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 861, https://doi.org/10.1038/s41467-019-08650-y.
[48] J. Castro-Esteban, F. Albrecht, S. Fatayer, D. Pérez, L. Gross, D. Peña, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 26346-26350, https://doi.org/10.1002/anie.202110311.
[49] Q. Fan, D. Martin-Jimenez, S. Werner, D. Ebeling, T. Koehler, T. Vollgraff, J. Sundermeyer, W. Hieringer, A. Schirmeisen, J. M. Gottfried, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 894-899, https://doi.org/10.1021/jacs.9b10151.
[50] M. Di Giovannantonio, X. Yao, K. Eimre, J. I. Urgel, P. Ruffieux, C. A. Pignedoli, K. Müllen, R. Fasel, A. Narita, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 12046-12050, https://doi.org/10.1021/jacs.0c05268.
[51] I. C.-Y. Hou, Q. Sun, K. Eimre, M. Di Giovannantonio, J. I. Urgel, P. Ruffieux, A. Narita, R. Fasel, K. Müllen, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 10291-10296, https://doi.org/10.1021/jacs.0c03635.
[52] F. Xiang, S. Maisel, S. Beniwal, V. Akhmetov, C. Ruppenstein, M. Devarajulu, A. Dörr, O. Papaianina, A. Görling, K. Y. Amsharov, S. Maier, *Nat. Chem.* **2022**, *14*, 871-876, https://doi.org/10.1038/s41557-022-00968-3.
[53] R. Zuzak, P. Dabczynski, J. Castro-Esteban, J. I. Martínez, M. Engelund, D. Pérez, D. Peña, S. Godlewski, *Nat. Commun.* **2025**, *16*, 691, https://doi.org/10.1038/s41467-024-54774-1.
[54] K. Biswas, J. Janeiro, A. Gallardo, M. Lozano, A. Barragán, B. Álvarez, D. Soler-Polo, O. Stetsovych, A. P. Solé, K. Lauwaet, J. M. Gallego, D. Pérez, R. Miranda, J. I. Urgel, P. Jelínek, D. Peña, D. Écija, *Nat. Synth.* **2025**, *4*, 233-242, https://doi.org/10.1038/s44160-024-00665-8.

Iago Pozo

Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) y Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela

C-e: iago.pozo.miguez@usc.es
ORCID: 0000-0003-3113-6368

Iago obtuvo su máster y doctorado en la USC (ambos con Premio Extraordinario, 2015 y 2020), trabajando en el CiQUS bajo la supervisión de los profesores Dolores Pérez y Diego Peña. Realizó estancias predoctorales en los grupos de los profesores Alois Fürstner y Miquel A. Pericàs. Completó sus estudios postdoctorales en la Universidad de Oxford, entre los grupos de Lapo Bogani y Harry L. Anderson. En 2022 recibió el Premio de Investigación Ernesto Viéitez Cortizo (Real Academia Gallega de Ciencias). En 2024 regresó al CiQUS como investigador Margarita Salas y, poco después, consiguió una Beca Postdoctoral Marie Curie.

Dolores Pérez

Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) y Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela

C-e: dolores.perez@usc.es
ORCID: 0000-0001-5057-5599

Dolores realizó su doctorado en la USC bajo la dirección de Enrique Guitián y Luis Castedo. Fue becaria posdoctoral MEC-Fulbright en UC Berkeley en el grupo de Peter Vollhardt (1992-1993), y científica visitante en el MIT con Stephen Buchwald (1996). Se incorporó a la USC en 1995 como Ayudante de Universidad, siendo nombrada Profesora Titular en 2000 y Catedrática en 2019. Fue pionera en el descubrimiento de la participación de arinos en catálisis metálica y actualmente desarrolla nueva metodología sintética para el acceso a sistemas policíclicos conjugados no convencionales. Ha sido directora Comisaria (2010-2014) y Directora Adjunta (2014-2025) del CiQUS.

Diego Peña

Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) y Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela

C-e: diego.pena@usc.es
ORCID: 0000-0003-3814-589X

Diego obtuvo el doctorado en la USC en 2001 bajo la dirección de Enrique Guitián y Dolores Pérez. Realizó una estancia postdoctoral en el grupo de Ben L. Feringa (Universidad de Groningen, 2002-2003). Regresó a la USC en 2004 como investigador Ramón y Cajal. Fue nombrado Profesor Titular en 2008 y Catedrático en 2020. También en 2020 obtuvo una ERC Synergy Grant (MolDAM) y en 2024 obtuvo una plaza Oportunius en el CiQUS, donde es Director Científico. Ha recibido la medalla Ignacio Ribas (2018) y el Premio a la Excelencia Investigadora de la RSEQ (2023). Investiga en síntesis de nanografenos, química sobre superficies y reacciones de moléculas individuales.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 314-323
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2090

La revista de la Real Sociedad Española de Química

INVESTIGACIÓN QUÍMICA

El sueño de ver moléculas y sus reacciones químicas

The dream of seeing molecules and their chemical reactions

Ana Barragán[1,*], Nazario Martín[2,*], David Écija[3,*]

[1] *IMDEA Nanociencia.*

[2] *Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense.*

[3] *Unidad de Nanomateriales Avanzados, IMDEA Nanociencia. Unidad asociada al CSIC por el ICMM.*

PALABRAS CLAVE:

Ciencia molecular
Microscopía de sonda de barrido
Física de superficies
Síntesis química en superficie

RESUMEN:

El desarrollo de microscopios de sonda de barrido ha permitido observar átomos y moléculas individuales, llegando incluso a visualizar enlaces químicos. Esto ha dado origen a la síntesis covalente en superficies, disciplina que combina química y física para construir nanoestructuras con precisión atómica, bajo condiciones de ultra-alto vacío (UHV) y confinamiento bidimensional. En este artículo se introduce esta estrategia química, las técnicas de microscopía de sonda local que permiten una resolución espacial sin precedentes, y se resumen sus conceptos generales, como el diseño inicial de precursores moleculares y su posterior activación química por temperatura en la superficie. Además, se cubre un catálogo de reacciones representativas y se discute la posibilidad de ir desde estos nuevos nanomateriales hasta dispositivos, junto con los principales retos de integración y estabilidad, planteándose las perspectivas de futuro.

KEYWORDS:

Molecular science
Scanning probe microscopies
Surface science
On-surface synthesis

ABSTRACT:

The development of scanning probe microscopes has made possible to observe individual atoms and molecules, even allowing the visualization of chemical bonds. This has given rise to the emergence of on-surface covalent synthesis, a discipline that combines chemistry and physics to construct nanostructures with atomic precision, under very special conditions of ultra-high vacuum (UHV) and two-dimensional confinement. This review introduces this chemical strategy, the local probe microscopy techniques that enable unprecedented spatial resolution, and summarizes its general concepts, such as the design of initial molecular precursors and their subsequent temperature-induced chemical activation on surfaces. In addition, a catalog of representative reactions is presented, and the possibility of moving from these new nanomaterials to functional devices is discussed, together with the main challenges of integration and stability, and future perspectives.

Introducción

Desde la Antigüedad, el ser humano se ha preguntado constantemente por la naturaleza de la materia. La revolución cultural en la antigua Grecia introdujo la idea de que todo está compuesto por partículas diminutas e indivisibles: los *átomos* (etimológicamente, en griego, "*lo que no se puede cortar o dividir*").[1] Esta noción permaneció durante siglos en el ámbito de la especulación, hasta que la alquimia fue transformándose, poco a poco, de antigua disciplina filosófica a la ciencia moderna que, finalmente, denominamos *química*. Bacon, Boyle, Bergman, Cavendish, Priestley, y Lavoisier, entre otros, sentaron las bases que culminaron en la teoría atómica de Dalton en 1808. En "*A new system of chemical philosophy*",[2] Dalton postuló que los átomos de un mismo elemento son idénticos, que se combinan en proporciones fijas para originar compuestos, y que las reacciones químicas consisten en reorganizaciones de dichos átomos. Tan sólo tres años después, Avogadro dio un paso más e introdujo el concepto de *molécula* (del latín, *"pequeña masa"*) para designar las agrupaciones de átomos que constituyen los compuestos químicos y pueden reaccionar entre sí.[3] Su hipótesis fue ignorada durante décadas, hasta que Cannizzaro la rescató en el Congreso de Karlsruhe de 1860, dando lugar además, entre otras muchas decisiones, a la creación de una notación química racional.

Quedaba aún por demostrar la propia existencia de las moléculas, lo cual ocurrió de manera indirecta gracias a la explicación del movimiento browniano.[4] En 1827, el botánico Robert Brown describió el incesante y caótico baile de granos de polen suspendidos en agua, fenómeno que Einstein, en 1905, en su *annus mirabilis*, explicó matemáticamente como el resultado de las colisiones moleculares.[5] Esta interpretación fue confirmada experimentalmente por Jean Perrin mediante sus estudios sobre la sedimentación de partículas ultrafinas en líquidos, determinando numéricamente el número de Avogrado, y confirmando cuantitativamente las predicciones de Einstein.[6] La evidencia empírica era irrefutable: sólo un modelo basado en moléculas con masa definida podía explicar el movimiento browniano.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: A. Barragán, N. Martín, D. Écija. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 314-323, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2090

* C-e: ana.barragan@imdea.org; nazmar@ucm.es; david.ecija@imdea.org

Manuscrito recibido: 24/10/2025 · aceptado: 05/12/2025

Pero entonces, si existían las moléculas, ¿sería posible visualizarlas? Habría que esperar a la gran revolución de la física de la materia condensada y su instrumentación que llegó durante la segunda mitad del siglo XX. La invención del microscopio de efecto túnel (STM) por Binning y Röhrer permitió ver, por primera vez en 1983, los átomos de una superficie de silicio en condiciones de ultra-alto vacío (UHV).[7] Muy pronto, el objetivo pasó a ser no sólo visualizar átomos sino, también, moléculas individuales y caracterizar sus propiedades fisicoquímicas a la escala atómica. Este logro fue alcanzado para el benceno sobre una superficie de rodio con resolución espacial en 1988.[8] A partir de ese momento, era cuestión de mejorar la resolución, intentando llegar a distinguir incluso los enlaces individuales dentro de un compuesto molecular, desafío conseguido gracias al microscopio de fuerzas atómicas (AFM) por el equipo liderado por Leo Gross en 2009.[9]

Inicialmente, la necesidad de ultra-alto vacío (UHV) parecía limitar los estudios moleculares a sistemas individuales o autoensamblados. Sin embargo, en las últimas décadas ha surgido una nueva disciplina que ha transformado el campo de la ciencia química: la llamada síntesis covalente en superficies, o de forma coloquial, "síntesis en superficies" ("*on-surface synthesis*").[10-13] Esta estrategia permite sacar todo el partido a técnicas microscópicas de sonda de barrido para distinguir a nivel submolecular los precursores, intermedios y productos finales de una reacción química covalente en una superficie. Este progreso experimental se complementa con las más modernas simulaciones y cálculos teóricos avanzados, tanto para la determinación de geometrías de adsorción, y de las propiedades optoelectrónicas y magnéticas de las moléculas, como para la determinación de los mecanismos de reacción asociados.

De este modo, el histórico objetivo de observar directamente las moléculas y sus transformaciones químicas ha sido finalmente conseguido. El presente artículo repasa los descubrimientos más relevantes de la química covalente en superficies bajo condiciones de UHV, con especial atención en la reciente capacidad de visualizar a escala submolecular los nuevos materiales creados mediante técnicas microscópicas de sonda local.

Visualizando moléculas

El desarrollo de las técnicas de microscopía de sonda de barrido ha convertido en realidad el anhelo de observar y manipular la materia a escala atómica y molecular.

El microscopio de efecto túnel (STM),[14] inventado en 1981 por Gerd Binnig y Heinrich Rohrer (Premios Nobel de Física en 1986), permite visualizar moléculas y átomos individuales. Este microscopio se basa en un fenómeno puramente cuántico: el efecto túnel. Una punta metálica, controlada con precisión piezoeléctrica, se acerca a una superficie conductora a unos pocos angstroms de distancia. Al aplicar una diferencia de potencial entre la punta y la muestra (o viceversa), los electrones, debido a que se pueden comportar como ondas, tienen una probabilidad no muy grande, pero distinta de cero, de atravesar el vacío entre ambos electrodos, generando así una corriente eléctrica: la corriente túnel. Según las leyes de la mecánica cuántica, dicha corriente túnel es exponencialmente sensible a la distancia entre la punta y la muestra, y aunque es típicamente del orden de centenares de picoamperios, resulta medible y controlable con la instrumentación adecuada. En el modo de medida más habitual, al barrer la punta sobre la superficie, se mantiene la corriente túnel constante mediante un sistema de retroalimentación que regula la distancia punta-muestra con una precisión de picómetros, obligando a la punta a alejarse o acercarse, obteniéndose así un mapa topográfico de la superficie con resolución atómica. Además, como la propia corriente túnel es sensible a los estados electrónicos de la muestra (ocupados o vacíos, en función del sentido de la corriente), también se puede hacer un estudio de las propiedades electrónicas y magnéticas de las especies moleculares estudiadas.

En cambio, el microscopio de fuerzas atómicas (AFM), inventado en 1986 por Gerd Binnig, Calvin Quate y Christoph Berger, mide las fuerzas de interacción entre una punta afilada, montada en un cantiléver flexible, y la superficie de la muestra, que en este caso no necesita ser conductora. En el modo de no contacto (nc-AFM), la clave para lograr una resolución vertical extrema, comparable y en algunos casos incluso superior a la del STM, reside en la detección de las variaciones en la frecuencia de resonancia del cantiléver en el régimen de fuerzas repulsivo de Pauli. El cantiléver se hace oscilar en su frecuencia de resonancia y, al acercarse y barrer la superficie, las interacciones punta-muestra, cuyo gradiente varía drásticamente con la distancia, modifican dicha frecuencia, obteniéndose finalmente un mapa espacial de dicho cambio con resolución espacial extraordinaria. Actualmente, mediante los sensores de diapasón de cuarzo ("*tuning-fork*"), es posible medir simultáneamente STM y nc-AFM. Para ello, el cantiléver se reemplaza por un diapasón, que se convierte en el corazón del microscopio, y a uno de los brazos del diapasón se le pega una punta metálica de STM, que es la que interactuará con la muestra.

La resolución alcanzada mediante STM o nc-AFM mejora drásticamente si el ápice de la punta se funcionaliza con una molécula, típicamente de monóxido de carbono, CO, que actúa como una sonda extraordinariamente sensible en resolución lateral debido a la repulsión de Pauli entre la punta y la muestra. En el modo STM a altura constante, es decir, sin retroalimentación de la corriente túnel,[13,15,16] una punta funcionalizada con CO mejora la resolución intramolecular frente a puntas convencionalmente metálicas, aunque sin llegar a distinguir nítidamente los enlaces (Figura 1a). Sin embargo, el modo nc-AFM permite identificar claramente diversos tipos de enlaces, obteniéndose así imágenes comparables a los esquemas

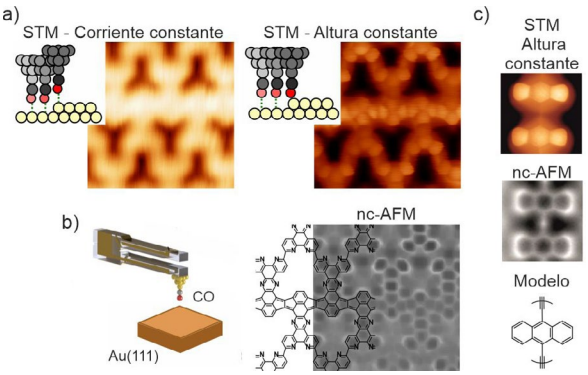


Figura 1. Visualización molecular de alta resolución empleando la funcionalización de puntas de STM y nc-AFM con moléculas de CO. a) Dibujo esquemático de una punta STM, con funcionalización de CO, en modo corriente constante (izquierda) y altura constante (derecha), junto con dos ejemplos de imágenes STM en cada modo. b) Dibujo esquemático de un cantiléver con funcionalización de CO (izquierda). Imagen nc-AFM (derecha) y modelo químico correspondiente de la estructura estudiada (superpuesto). c) Imágenes STM en modo altura constante (panel superior) y su respectiva nc-AFM (panel intermedio), junto con el modelo químico del polímero estudiado (panel inferior), donde se puede resolver el triple enlace entre unidades de antraceno como un punto brillante debido al aumento en el cambio de la frecuencia de resonancia del cantiléver por mayor densidad electrónica en el enlace.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2090

químicos de los manuales académicos (Figura 1b). Más allá de la imagen de alta resolución, en un refinamiento posterior de la técnica, es posible discriminar entre distintos órdenes de enlace: los enlaces con mayor densidad electrónica, como los dobles o triples enlaces, generan una mayor repulsión de Pauli, lo que provoca mayores cambios en la frecuencia de oscilación del cantiléver, perceptibles como un mayor brillo al representar los mapas de cambio de frecuencia (Figura 1c).

Observando reacciones químicas

Conceptos generales de síntesis en superficie

Los microscopios de sonda de barrido (STM y nc-AFM), aunque incomparables en resolución, presentan la peculiaridad de requerir condiciones de UHV para su funcionamiento. Estas condiciones, propias del área de la ciencia de superficies, permiten algo que es únicamente posible en dicho entorno: un control estricto sobre los distintos parámetros de crecimiento de los materiales evitando cualquier tipo de contaminación.

En este contexto, el desarrollo de la ciencia molecular mediante estos microscopios ha seguido históricamente un curso progresivo, basado en aumentar la complejidad de la química involucrada. Inicialmente, se depositaron y observaron moléculas individuales o autoensambladas.[17-19] A continuación, se abordó un estudio exhaustivo de las interacciones metal-orgánicas.[20-25] Para finalizar, se ha culminado con el nacimiento de una nueva rama de la química orgánica: la síntesis en superficies, que es el objeto del presente trabajo.[10-13,26]

La síntesis en superficie, ilustrada en la Figura 2, es un nuevo campo interdisciplinar emergente que integra elementos de la química orgánica, la física de superficies y la ciencia de materiales. Su objetivo es dirigir reacciones químicas para fabricar nuevas nanoestructuras covalentes directamente sobre sustratos sólidos con precisión atómica.[10-13] Se diferencia de la química tradicional en disolución en que las reacciones ocurren típicamente en condiciones de UHV sobre superficies limpias, aprovechando el confinamiento bidimensional que reduce los grados de libertad y modifica los mecanismos de reacción, todo ello en ausencia de disolventes. Esto permite obtener materiales únicos con propiedades electrónicas, ópticas y/o magnéticas ajustables, que abarcan desde nanografenos y porfirinoides, hasta polímeros unidimensionales y redes bidimensionales, explotando mecanismos de reacción frecuentemente no accesibles en fase líquida.

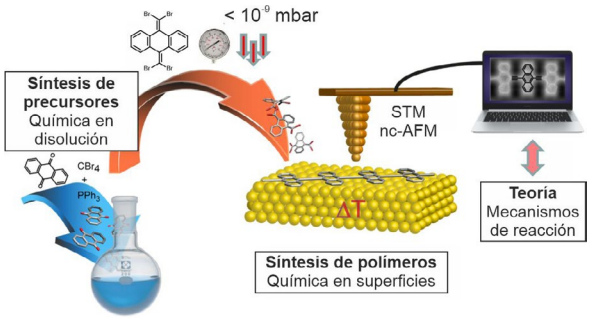


Figura 2. Ilustración esquemática de la síntesis en superficies. Se muestra el diseño y la síntesis de los precursores moleculares iniciales mediante química en disolución, que son depositados en UHV sobre una superficie limpia y, mediante calentamiento, se sintetiza el polímero deseado según la estrategia de química covalente en superficies. En paralelo y de forma sinérgica, los cálculos teóricos ratifican la estructura y las propiedades electrónicas de los productos obtenidos, e introducen los nuevos mecanismos de reacción.

El diseño y la síntesis en disolución de los precursores moleculares iniciales es un aspecto clave, particularmente la localización de los grupos funcionales que van a ser responsables de las reacciones químicas posteriores, así como la elección de la superficie donde se depositarán, ya que la movilidad de las moléculas dependerá de las interacciones precursor-sustrato. Tras depositarse las moléculas en UHV, las superficies actúan como catalizadores heterogéneos, estabilizando intermedios altamente reactivos. Los sustratos más comúnmente usados son el Au(111), la Ag(111) y el Cu(111), aunque también existen diversos trabajos donde se utilizan capas aislantes, como el cloruro de sodio, NaCl, que permite el desacoplamiento electrónico de las moléculas con el metal y, por lo tanto, el estudio de sus propiedades fisicoquímicas intrínsecas, disminuyendo la interacción molécula-sustrato.

Los precursores moleculares se depositan generalmente por sublimación térmica desde un crucible, aunque, en ocasiones, si resultan demasiado lábiles térmicamente o de gran tamaño, se recurre a técnicas modernas de electrospray.

Una vez que los precursores son depositados y adsorbidos en la superficie, es necesario un estímulo que active la reacción covalente subsiguiente. Dicho estímulo puede ser simplemente la propia temperatura del sustrato, requiriéndose frecuentemente calentar la muestra; o pulsos eléctricos aplicados con la punta del microscopio; o el uso de irradiación con luz visible o ultravioleta cercano (fotoquímica).

El desarrollo de la síntesis en superficie ha permitido obtener compuestos moleculares y nanomateriales con nuevas propiedades, así como caracterizarlos a nivel atómico.[26,27] Se trata del inicio de una nueva disciplina llamada a revolucionar los fundamentos tanto de la física de la materia condensada como de la propia química, al permitir no solo diseñar materiales "a la carta" con control atómico, sino también inspeccionar sus propiedades con una resolución espacial, energética y, en un futuro próximo, temporal, sin precedentes.

Mecanismos de reacción

La química orgánica, en su esencia, es el arte de diseñar y construir moléculas. Durante más de un siglo, el laboratorio químico tradicional, con sus matraces, disolventes y reactivos, ha sido el escenario indiscutible de esta obra. Esta disciplina constituye un universo de una riqueza y diversidad abrumadoras. El número de reacciones covalentes conocidas y documentadas es enorme. Desde las sustituciones nucleófilas y las eliminaciones, hasta las complejas reacciones de acoplamiento cruzado catalizadas por metales de transición (Suzuki, Heck, Negishi, Sonogashira, entre otras), pasando por las reacciones de condensación, adición, pericíclicas, y muchas más, el arsenal a disposición del químico sintético es colosal.[28]

Frente a este enorme potencial sintético, surge la química en superficies como una nueva disciplina,[10-12,29-31] cuyo objetivo principal es entender la reactividad química en su versión más minimalista: una superficie, unos reactivos y un estímulo, por medio del empleo de técnicas físicas muy sofisticadas de visualización, caracterización y simulación, donde el matraz se sustituye por una complejísima instrumentación de física de superficies. Si la química orgánica en disolución puede considerarse una disciplina poderosa y consolidada, la química en superficies está en su más tierna infancia. Por ello, el número de reacciones químicas descritas en superficies se cuenta solamente por decenas y, las más utilizadas, incluso en unidades.

En la Figura 3 se muestran las reacciones químicas en superficies más consolidadas: desde los acoplamientos deshalogenantes,[30,32-39] los basados en alquinos,[40] las reacciones de con-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

densación,[41,42] las activaciones directas de enlaces C-H,[43-47] y las deshidrogenaciones intramoleculares.[30,48-50] No obstante, el campo avanza rápidamente y, prueba de ello, son los acoplamientos recientemente descubiertos basados en grupos terminales de isopropilo, así como las reacciones de indenilo. A continuación, se presentan algunos de los ejemplos más relevantes.

Entre todas las reacciones químicas, el acoplamiento de tipo Ullmann (acoplamiento deshalogenante de reactivos),[33] es, sin duda, la reacción estrella en la química de superficies, y ha sido la base de muchos de los avances más destacados del área. En superficies, se conoce con este nombre a la activación de halógenos en especies orgánicas depositadas, que culmina en la formación de nuevos enlaces C-C (Figura 4). La reacción de Ullmann en superficies destaca por su robustez y eficiencia, habiéndose demostrado con éxito no solo para haluros de arilo sino, también, para haluros de alquilo, alquenilo o alquinilo. En este proceso, la ruptura superficial de enlaces C-X (X = I, Br, Cl) genera centros radicalarios que se homoacoplan formando nuevos enlaces C-C, en ocasiones a través de intermedios organometálicos M-C (M = metal).

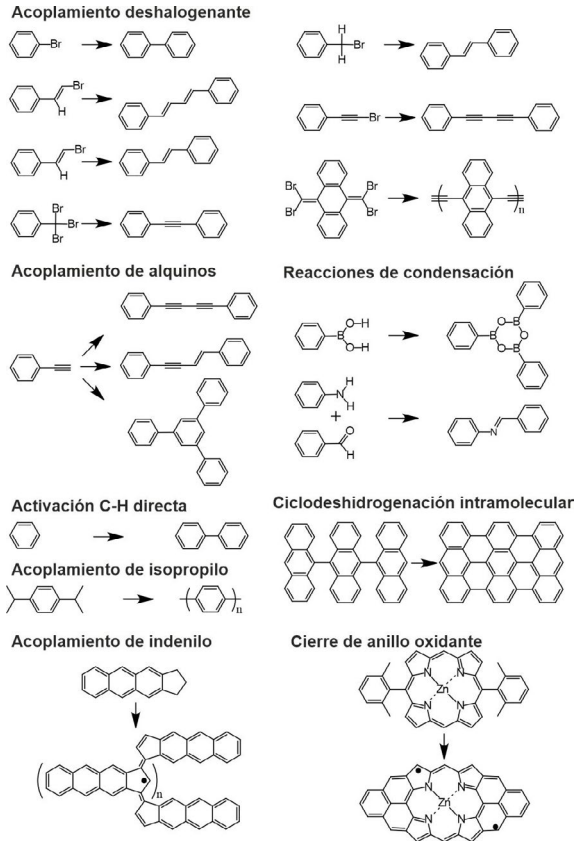


Figura 3. Reacciones químicas más habituales en el área de la química de superficies, mostrando precursores iniciales y productos finales: acoplamiento deshalogenante, acoplamiento de alquinos, reacciones de condensación, activación C-H directa, ciclodeshidrogenación intramolecular, acoplamiento de isopropilo, acoplamiento de indenilo y cierre de anillo oxidante.

Controlando la simetría y funcionalización de los precursores iniciales, se obtienen productos de reacción de distinta dimensionalidad, entre ellos, dímeros, polímeros unidimensionales (1D) o redes bidimensionales (2D) porosas, como se ilustra en una la Figura 4a, cuyas imágenes STM muestran el acoplamiento de porfirinas en uno de los artículos fundacionales del área de la química de superficies.[32] La fortaleza térmica de los enlaces C-I < C-Br < C-Cl permite diseños jerárquicos con activación secuencial, fenómeno que se ilustra en la Figura 4b, donde inicialmente se deshalogenan los enlaces C-I formando cadenas unidimensionales y, en una segunda etapa, a mayor temperatura del sustrato, los enlaces C-Br, que dan lugar a redes extendidas.[51]

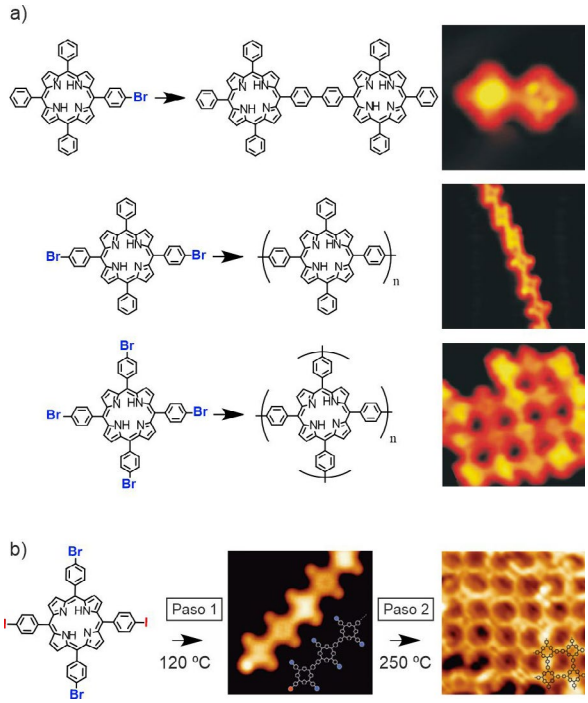


Figura 4. La reacción más exitosa de la química de superficies: el acoplamiento Ullmann. a) Imágenes STM (paneles a la derecha) que muestran la síntesis en superficie de dímeros, polímeros unidimensionales, y redes porosas bidimensionales mediante el control de la simetría y la funcionalización de los precursores iniciales (paneles a la izquierda). Ref [32]. b) Activación secuencial de diferentes funcionalizaciones dando lugar, tras calentar a una temperatura inicial, a polímeros unidimensionales y, a continuación, tras calentar a mayor temperatura, a redes bidimensionales. Ref [51].

Inspirados en la reacción de Ullmann, nuestro grupo, entre otros, ha demostrado que el empleo de carbonos dihalogenados o trihalogenados permite reacciones de homoacoplamiento con formación de dobles o triples enlaces, respectivamente.[37-39,52-55] En los productos de reacción se ilustra todo el potencial de la ciencia de superficies en cuanto a caracterización, ya que se puede llegar incluso a caracterizar fases cuánticas del nuevo material creado. En la figura 5a y 5b se muestran dos ejemplos con precursores de antraceno y de pentaceno, respectivamente, funcionalizados en posiciones centrales por dos grupos $=CBr_2$.[56] Tras depositar estos precursores sobre la superficie de Au(111), y calentar la muestra, se rompen los enlaces C-Br por estímulo térmico, y las especies difunden como carbenos, formando cables perfectamente definidos.

Gracias a la técnica de nc-AFM, el esqueleto del polímero (antraceno o pentaceno) puede ser resuelto, así como los propios enlaces entre monómeros, siendo posible caracterizar el orden de enlace y, por tanto, asignar una forma resonante aromática-etinilénica al cable de antraceno, frente a la manifestación quinoide-cumulénica del polímero de pentaceno. El análisis simultáneo con STM permite explorar las propiedades electrónicas de los polímeros obtenidos, revelando que el cable de antraceno se comporta simplemente como un semiconductor

© 2025 Real Sociedad Española de Química

tradicional, mientras que el polímero unidimensional de pentaceno presenta estados en los bordes, que son la marca distintiva de la fase topológica no trivial.[57] De este modo, este trabajo, junto a otros seminales, ilustra que con la química de superficies se pueden crear no solo materiales semiconductores, sino diseñar y caracterizar a la escala atómica fases cuánticas exóticas de la materia orgánica, un área virgen a explorar y llamada a revolucionar la optoelectrónica, el magnetismo y la información cuántica, empleando materiales orgánicos.

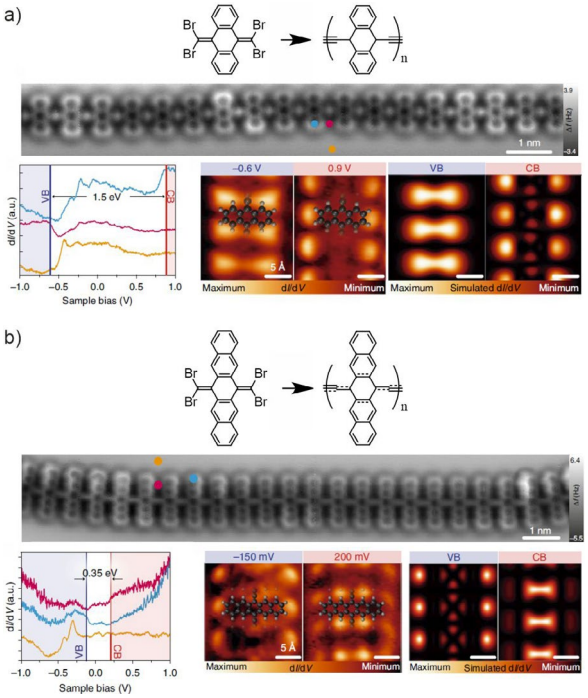


Figura 5. Formación de cables de antraceno y de pentaceno, de distinta fase cuántica, mediante la reactividad del grupo $=CBr_2$. a) y b) Esquema simple de reacción (panel superior) e imágenes nc-AFM (panel intermedio) que muestran la síntesis en superficie de polímeros de antraceno y pentaceno, respectivamente, junto con la espectroscopia local STS en diferentes puntos y los mapas dI/dV experimentales (paneles inferiores). Ref [56].

Otra de las reacciones en superficie más estudiada es el **acoplamiento de alquinos** (comúnmente agrupadas bajo la denominación de reacciones tipo Glaser).[40] En estas reacciones, dos grupos terminales –C≡C-H pueden perder átomos de H y formar nuevos enlaces C≡C, dando lugar a estructuras lineales o redes extendidas (Figura 6a). Además del homocoplamiento, los alquinos pueden experimentar ciclotrimerización (Figura 6b), un proceso en el que tres unidades alquínicas se combinan para dar lugar a anillos aromáticos de seis miembros. Hoy en día, es una de las reacciones más importantes en química covalente en superficies, ya que permite diseñar materiales π-conjugados con aplicaciones en nanoelectrónica, optoelectrónica molecular, y materiales fotónicos y cuánticos.

Las reacciones de auto-condensación de ácidos borónicos para formar anillos hexagonales de boroxina fuertemente enlazados han sido también muy utilizadas recientemente. Estas reacciones conducen a la formación de enlaces B-O estables y han sido utilizadas en la construcción de redes 2D (Figura 7a).[41] Por otro lado, la reacción de condensación de Schiff,[42] que consiste en la formación de iminas a partir de la condensación de aldehídos con aminas (Figura 7b), también ha sido recientemente estudiada en superficies.

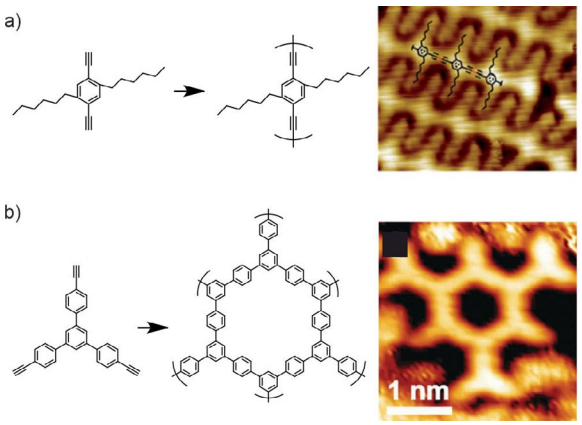


Figura 6. Acoplamiento de alquinos en superficies. Esquema (izquierda) e imágenes STM de: a) Acoplamiento Glaser en superficies. Ref [58]. b) Ciclotrimerización. Ref [59].

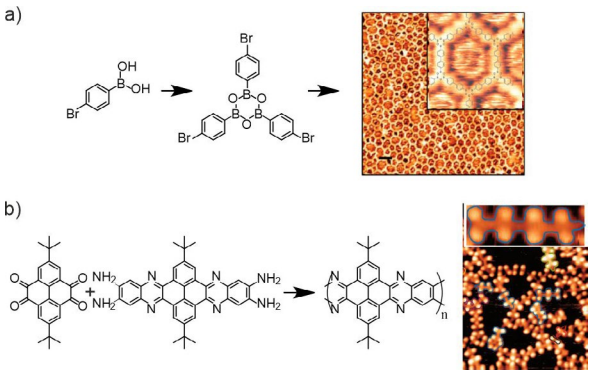


Figura 7. Reacciones de condensación en superficies. Esquema (izquierda) e imágenes STM (derecha) de: a) Condensación de ácidos borónicos. Ref [41] b). Reacción de Schiff. Ref [62].

Por último, dentro de las reacciones de acoplamiento cabe destacar la **activación directa de enlaces C-H** que permite crear polímeros lineales,[43,44] como se ilustra en la Figura 8a,[43] así como fusionar, entre otros, porfirinoides.[45-47] De manera relevante, también se han estudiado dos reacciones intramoleculares que involucran la activación de enlaces C-H: la deshidrogenación intramolecular y el acoplamiento oxidante,[29] que permiten ciclar precursores hacia arquitecturas aromáticas más planas, como nanografenos y nanocintas de carbono.[29,30,60,61] En la Figura 8b se ilustra el crecimiento seminal de nanocintas de grafeno a partir de una reacción de Ullmann a 200 °C, que da lugar a la formación de cables unidimensionales, seguida de una deshidrogenación entre monómeros de antraceno a mayor temperatura, que permite la ciclación interna y la formación del producto deseado.[30,60] Por otra parte, como se muestra en la Figura 8c, un precursor equipado con cuatro grupos metilo es capaz de reaccionar a 300 °C sobre el Au(111) generando cuatro acoplamientos oxidantes para conducir a la simétrica y elegante molécula denominada "cáliz" o copa de Clar,[63] un sistema que presenta dos radicales que, sorprendentemente, sobreviven en el sustrato de oro sin ser pasivados y que interactúan magnéticamente entre ellos. De hecho, la química de superficies, y en especial las reacciones intramoleculares, han permitido desarrollar y estudiar a escala atómica el fascinante mundo del magnetismo π en compuestos de carbono, [64] siendo una de las áreas más prometedoras tanto del campo, como de la física de la materia condensada.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

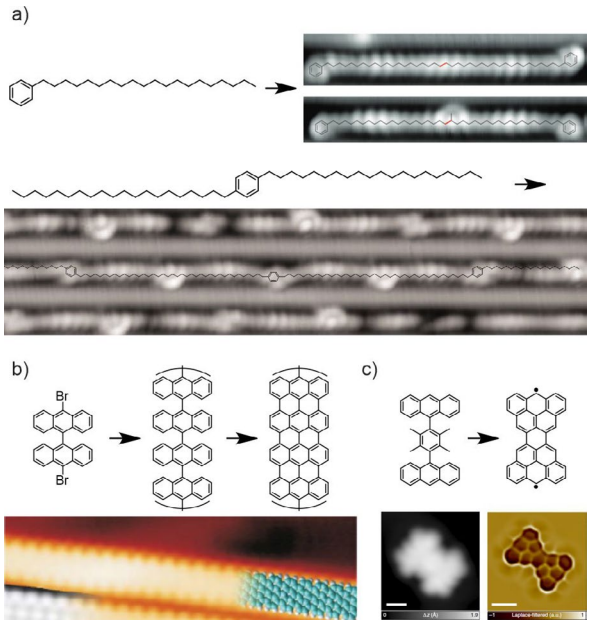


Figura 8. Activaciones de grupos C-H en superficies. a) Esquema de los precursores e imágenes STM de los productos tras activación directa de C-H que da lugar a la formación de dímeros (paneles superiores) y polímeros (paneles inferiores). Ref [43]. b) Ciclodeshidrogenación tras un acoplamiento Ullmann, permitiendo la formación de nanocintas de carbono Ref [60]. c) Cierre oxidante de anillo a partir de metilos, originando el esquivo "cáliz" de Clar. Ref [63]. Se muestran en los paneles inferiores imágenes STM en modo corriente y altura constante.

Enlazando directamente con la activación de entidades -CH, nos gustaría hacer especial mención a dos reacciones descubiertas recientemente, donde nuestro grupo está contribuyendo activamente: **el acoplamiento de isopropilos y de indenilos.**[65-66] La idea de fondo es crear estructuras moleculares altamente selectivas y donde no haya productos indeseados de reacción, como ocurre a veces en las reacciones de deshalogenación de tipo Ullmann con la presencia inevitable de halógenos en la superficie.

En el caso de los isopropilos, recientemente se ha llevado a cabo la síntesis de poliarilenosenos mediante la oxidación intermolecular de los sustituyentes de isopropilo en arenos, observándose la formación de un nuevo anillo de fenileno entre los arenos mediante la reacción de dimerización [3+3],[67] que formalmente se puede considerar una cicloaromatización (Figure 9a). Una extensión de tal reacción química permite acoplar porfirinoides linealmente, como se ilustra en las Figuras 9b y 9c para porfirinas y hemiporfiracinas, respectivamente, adecuadamente sustituidas con grupos isopropilo.[65,68]

En relación al acoplamiento de indenilos,[66] en nuestro grupo hemos explorado recientemente el efecto que tienen las dobles hidrogenaciones de átomos de carbono en precursores moleculares al ser depositados en superficies y calentados. Con tal fin, se han investigado derivados de indaceno, donde las posiciones terminales de los anillos de cinco unidades están doblemente hidrogenadas. Al calentar, se observa una séxtuple deshidrogenación, es decir, todos los átomos de hidrógeno extra son eliminados, y una regioselectividad que permite formar polímeros en escalera como se ilustra en la Figura 9d. Estos polímeros presentan una estructura electrónica que depende de la paridad del esqueleto central de poliacetileno, exhibiendo cuasipartículas topológicas, los solitones, para esqueletos impares y, por tanto, ilustrando experimentalmente a escala atómica que la paridad de un polímero influye en sus propiedades electrónicas, confirmando las teorías de los descubridores de los polímeros conductores.

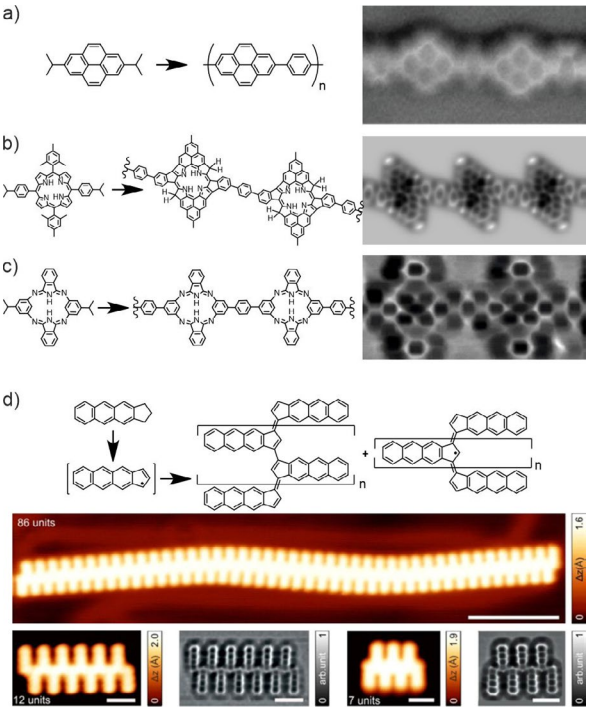


Figura 9. Reacciones emergentes en superficies: acoplamientos de indenilos y de isopropilos. a) Esquema (izquierda) e imagen nc-AFM (derecha) de la formación de poliarileno mediante cicloaromatización de isopropilos. Ref [67]. b) Esquema (izquierda) e imagen nc-AFM (derecha) de la conexión de porfirinas. Ref [65]. c) Esquema (izquierda) e imagen nc-AFM (derecha) del acoplamiento de hemiporfiracinas. Ref [68]. d) Esquema (panel superior) e imágenes STM y nc-AFM del acoplamiento de indenilo de polímeros de diferente longitud. Ref [66].

Por último, las reorganizaciones intramoleculares tienen un gran impacto tanto en sistemas cero-dimensionales como, en menor medida, en cables moleculares induciendo una geometría de escalera. Estas reorganizaciones se pueden inducir por dos procedimientos dispares que ilustran todo el potencial de la física de la materia condensada. Por un lado, mediante inyección de electrones con la punta del STM, se pueden transformar precursores funcionalizados, por ejemplo, con halógenos o grupos cetonas, tal y como se ilustra en la Figura 10a.[69] La estabilización del precursor en una superficie de NaCl permite no sólo ser cirujanos a nivel atómico, eliminando los halógenos uno por uno, [69] o los átomos de oxígeno en el caso del grupo cetona,[70] sino incluso transformar el propio precursor, dando lugar a fascinantes alótropos de carbono,[69-72] e ilustrando el potencial de la química rédox a escala atómica.[73] Por otro lado, extendiendo tal filosofía a sistemas equipados con grupos $=CBr_2$ se pueden inducir componentes antiaromáticos en sistemas policíclicos aromáticos, altamente esquivos en la química de disolución, si se depositan los precursores moleculares iniciales sobre la superficie caliente (Figura 10b). Estos resultados ilustran otro potencial de la química de superficies: la fabricación de sistemas y componentes orgánicos antiaromáticos.[74,75]

© 2025 Real Sociedad Española de Química

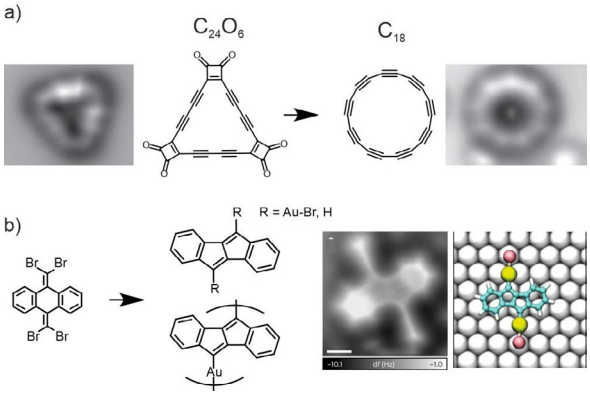


Figura 10. Reorganizaciones moleculares en superficies. a) Sistemas de ciclocarbonos. Ref [70]. Se muestran imágenes nc-AFM y el esquema químico del precursor inicial (izquierda) y del producto final (derecha). b) Inserción de componentes antiaromáticos. Ref [74]. Esquema de reacción, imagen nc-AFM experimental de una especie individual y su estructura calculada.

Conclusiones y desafíos de futuro: Desde nuevos nanomateriales hasta dispositivos

La síntesis sobre superficies es una rama nueva de la química orgánica, donde moléculas precursoras se depositan sobre un sustrato en condiciones ambientales de UHV y se inducen reacciones químicas para formar enlaces covalentes controlados. De este modo, es posible construir nanoestructuras orgánicas con precisión atómica, que se pueden caracterizar espacialmente con resolución submolecular gracias a los modernos microscopios de sonda de barrido, asistidos por técnicas de espectroscopia y de simulación propias de la física de la materia condensada. Por tanto, se trata de un área multidisciplinar e interdisciplinar emergente que engloba tanto a químicos como físicos, experimentales y teóricos.

Las reacciones químicas de superficie descubiertas hasta la fecha, a menudo sin análogos en la química orgánica en disolución, han permitido explorar compuestos moleculares nuevos, como nanografenos o porfirinoides, así como crear sistemas moleculares π-conjugados extendidos, incluyendo cables moleculares unidimensionales, nanocintas y redes bidimensionales covalentes. Queda pendiente su extensión a la tercera dimensión en el espacio, fuera del plano, ya que hasta ahora los resultados más fascinantes se limitan a sistemas confinados en la superficie. La comunidad de redes covalentes orgánicas (COFs) espera con gran entusiasmo futuros avances en esta dirección.

Un aspecto fundamental son las condiciones de crecimiento y caracterización, basadas en el UHV, lo que hace que un objetivo fundamental en el campo sea explorar el comportamiento de los materiales sintetizados en condiciones prácticas ("brecha de presión"), ya sean atmosféricas o catalíticas/electrocatalíticas, en función de la aplicación que se busque. Alternativamente, sería deseable que ciertos sistemas moleculares pudieran encapsularse con facilidad.

El sustrato de crecimiento juega un papel decisivo, y la mayoría de los éxitos se han limitado a monocristales metálicos, en particular de Au(111). Será necesario ampliar el estudio a otros tipos de sustratos, incluyendo sales, óxidos, o incluso materiales que exhiban fases cuánticas exóticas de la materia, para darle un mayor impacto al área.

En cuanto a la propia química de superficies en sí, es necesario un mayor control de la reactividad y la selectividad. En superficies, muchas reacciones se activan a temperaturas similares y, a diferencia de la química en disolución, la ausencia de disolvente dificulta la regulación de la cinética, lo que complica la realización de reacciones secuenciales controladas. Esta limitación obliga a desarrollar diseños moleculares ingeniosos, generalmente involucrando distintos grupos funcionales o estímulos de reacción.

Otra característica distintiva de la química de superficie es la irreversibilidad de los enlaces covalentes, que impide una reorganización que fomente el orden. En este sentido, se han conseguido grandes avances en sistemas unidimensionales y cuasi-unidimensionales con longitudes de centenares de nanómetros, pero el gran desafío persiste en las arquitecturas bidimensionales, donde las estructuras bien ordenadas y sin defectos rara vez superan unas centenas de nanómetros.

La escalabilidad y reproducibilidad constituyen otro reto, dado que la síntesis de superficies produce cantidades de material muy limitadas, en áreas de apenas unos pocos nanómetros cuadrados. Unido a la necesidad de UHV, esto dificulta su integración en procesos industriales. Será necesario reproducir los crecimientos de materiales moleculares a mayor escala, recubriendo superficies extensas o transfiriendo los materiales sintetizados. Este objetivo contará con la asistencia de la inteligencia artificial y de laboratorios automatizados, que desempeñarán un papel decisivo.

A partir de los materiales moleculares sintetizados mediante la química de superficies se abren grandes oportunidades en la electrónica molecular, donde se espera que los cables y las redes moleculares puedan servir como componentes básicos de circuitos, llegando al límite de transistores de una sola molécula o cable. Asimismo, se prevé explotar materiales que presenten radicales libres y magnetismo de electrones π para el desarrollo de componentes para espintrónica, como memorias magnéticas de alta densidad, o en tecnologías de información cuántica, mediante dispositivos basados en resonancias de espín, donde el control de la coherencia de espín y la interacción de qubits dentro del material molecular serán decisivos.

Mediante la integración de metales en las estructuras covalentes se espera acceder al mundo de sensores ultrasensibles y ultraselectivos, así como diseñar toda una nueva generación de catalizadores heterogéneos. También se espera usar estos materiales para mejorar numerosos procesos electroquímicos, entre ellos las pilas de combustible.

Finalmente, se vislumbra la posibilidad de explorar materiales moleculares que exhiban fases cuánticas de la materia peculiares, como aislantes topológicos o superconductores, y de construir estructuras híbridas combinando capas de materiales orgánicos e inorgánicos, explotando las sinergias entre las propiedades de cada capa.

En definitiva, la química de superficies no solo nos permite ver los anillos de benceno y su formación mediante diferentes aproximaciones sintéticas, sino que es una disciplina emergente en sus etapas primigenias, llamada a desempeñar un papel clave en la síntesis de materiales "a la carta" con precisión atómica.

Agradecimientos

A.B. y D.E. agradecen la financiación recibida del MICINN de España y de la Agencia Estatal de Investigación MICIN/AEI (PID2022-136961NB-I00) y de la Comunidad Autónoma de Madrid a través del "Programa de Investigación Tecnologías" 2024 (SYNMOLMAT-CM TEC-2024/TEC-459), cofinanciado por los Fondos Estructurales Europeos. N.M. agradece la financiación del Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (MICIU) (Ref.: PID2023-146373OB-I00.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Bibliografía

[1] J. Warren en *The Atomists: Leucippus and Democritus. Fragments*, University of Toronto Press, Toronto, **1999**. pp. 175.

[2] J. Dalton, *A new system of chemical philosophy*, Manchester, **1808.**

[3] A. Avogadro, *Journal de Physique, de Chimie et d'Histoire Naturelle* **1811**, *73*, 58-76.

[4] R. Brown, *The Philosophical Magazine and Annals of Philosophy* **1828**, *4*, 161-173, https://doi.org/10.1080/14786442808674769.

[5] A. Einstein, *Ann. Phys. (Berlin, Ger.)* **1905**, *17*, 549-560.

[6] J. Perrin, *Ann. Chim. Phys.* **1909**, *18*, 5-114.

[7] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber, E. Weibel, *Phys. Rev. Lett.* **1983**, *50*, 120-123, https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.120.

[8] H. Ohtani, R.J. Wilson, S. Chiang, & C.M. Mate, *Phys. Rev. Lett.* **1988**, *60*, 2398, https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.60.2398.

[9]. L. Gross, F. Mohn, N. Moll, P. Liljeroth, G. Meyer, *Science* **2009**, *325*, 1110-1114, https://doi.org/10.1126/science.1176210.

[10] Q. Shen, H.-Y. Gao, H. Fuchs, *Nano Today* **2017**, *13*, 77-96, https://doi.org/10.1016/j.nantod.2017.02.007.

[11] S. Clair, D.G. de Oteyza, *Chem. Rev.* **2019**, *119*, 4717-4776, https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00601.

[12] Q. Sun, R. Zhang, J. Qiu, R. Liu, W. Xu, *Adv. Mat.* **2018**, 30, 1705630, https://doi.org/10.1002/adma.201705630.

[13] L. Gross, B. Schuler, N. Pavliček, S. Fatayer, Z. Majzik, N. Moll, D. Peña, G. Meyer, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2018**, *57*, 3888-3908, https://doi.org/10.1002/anie.201703509.

[14] E. Meyer, H.J. Hug, R. Bennewitz, *Scanning probe microscopy: The lab on a tip*, Springer, **2004**.

[15] O. Krejčí, P. Hapala, M. Ondráček, P. Jelínek, *Phys. Rev. B* **2017**, *95*, 045407, https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.045407.

[16] P. Jelínek, *J. Phys. Condens. Matter* **2017**, *29*, 343002, https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa76c7.

[17] J.V. Barth, G. Costantini, K. Kern, *Nature* **2005**, *437*, 671-679, https://doi.org/10.1038/nature04166.

[18] R., Otero, F. Rosei, F. Besenbacher, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **2006**, *57*, 497-525, https://doi.org/10.1146/annurev.physchem.57.032905.104634.

[19] J.M. Gottfried, *Surf. Sci. Rep.* **2015**, *70*, 259-379, https://doi.org/10.1016/j.surfrep.2015.04.001.

[20] J.V. Barth, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **2007**, *58*, 375-407, https://doi.org/10.1146/annurev.physchem.56.092503.141259.

[21] D. Écija, J.I. Urgel, A.P. Seitsonen, W. Auwärter, J.V. Barth, *Acc. Chem. Res.* **2018**, *51*, 365-375, https://doi.org/10.1021/acs.accounts.7b00379.

[22] N. Lin, S. Stepanow, M. Ruben, J.V. Barth, en Templates in Chemistry III (Eds.: P. Broekmann, K.-H. Dötz, C.A. Schalley), Springer, Berlín. **2009**, pp. 1-44.

[23] J.V. Barth, *Surf. Sci.* **2009**, *603*, 1533-1541, https://doi.org/10.1016/j.susc.2008.09.049.

[24] S.O. Parreiras, J.M. Gallego, D. Écija, *Chem. Comm.* **2023**, *59*, 8878-8893, https://doi.org/10.1039/D3CC01496G.

[25] L., Dong, Z.A. Gao, & N. Lin, *Prog. Surf. Sci.* **2016**, *91*, 101-135, https://doi.org/10.1016/j.progsurf.2016.08.001.

[26] A. Sweetman, N.R. Champness, A. Saywell, *Chem. Soc. Rev.* **2020**, *49*, 4189-4202, https://doi.org/10.1039/D0CS00166J.

[27] D. Wang, T. Haposan, J. Fan, Arramel, A.T.S. Wee, *ACS Nano* **2024**, *18*, 30919-30942, https://doi.org/10.1021/acsnano.4c10522.

[28] J.M. McIntosh, *Organic Chemistry*, De Gruyter, **2022**.

[29] B. Yang, B. Dong, L. Chi, *ACS Nano* **2020**, *14*, 6376-6382, https://doi.org/10.1021/acsnano.0c03766.

[30] L. Talirz, P. Ruffieux, R. Fasel, *Adv. Mat.* **2016**, *28*, 6222-6231, https://doi.org/10.1002/adma.201505738.

[31] J.I. Urgel, A. Sánchez-Grande,D.J. Vicent, P. Jelínek, N. Martín, D. Écija, *Adv. Mat.* **2024**, *36*, 2402467, https://doi.org/10.1002/adma.202402467.

[32] L. Grill, M. Dyer, L. Lafferentz, M. Persson, M.V. Peters, S. Hecht *Nat. Nanotechnol.* **2007**, *2*, 687-691, https://doi.org/10.1038/nnano.2007.346.

[33] L. Dong, P.N. Liu, N. Lin, *Acc. Chem. Res.* **2015**, *48*, 2765-2774, https://doi.org/10.1021/acs.accounts.5b00160.

[34] Q. Sun, L. Cai, Y. Ding, H. Ma, C. Yuan, W. Xu, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, *18*, 2730-2735, https://doi.org/10.1039/C5CP06459G.

[35] Q. Sun, L. Cai, H. Ma, C. Yuan, W. Xu, *Chem. Commun.* **2016**, *52*, 6009-6012, https://doi.org/10.1039/C6CC01059H.

[36] Q. Sun, L. Cai, H. Ma, C. Yuan, W. Xu, *ACS Nano* **2016**, *10*, 7023-7030, https://doi.org/10.1021/acsnano.6b03048.

[37] Q. Sun, B.V. Tran, L. Cai, H. Ma, X. Yu, C. Yuan, M. Stöhr, W. Xu, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2017**, *56*, 12165-12169, https://doi.org/10.1002/anie.201706104.

[38] Q. Sun, X. Yu, M. Bao, M. Liu, J. Pan, Z. Zha, L. Cai, H. Ma, C. Yuan, X. Qiu, W. Xu, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2018**, *57*, 4035-4038, https://doi.org/10.1002/anie.201801056.

[39] A. Sánchez-Grande, B. de la Torre, J. Santos, B. Cirera, K. Lauwaet, T. Chutora, S. Edalatmanesh, P. Mutombo, J. Rosen, R. Zbořil, R. Miranda, J. Björk, P. Jelínek, N. Martín, D. Écija. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2019**, *58*, 6559-6563, https://doi.org/10.1002/anie.201814154.

[40] F. Klappenberger, Y.-Q. Zhang, J. Björk, S. Klyatskaya, M. Ruben, J.V. Barth, *Acc. Chem. Res.* **2015**, *48*, 2140-2150, https://doi.org/10.1021/acs.accounts.5b00174.

[41] S. Clair, M. Abel, L. Porte, *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 9627-9635, https://doi.org/10.1039/C4CC02678K.

[42] N.A.A. Zwaneveld, R. Pawlak, M. Abel, D. Catalin, D. Gigmes, D. Bertin, L. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 6678-6679, https://doi.org/10.1021/ja800906f.

[43] D. Zhong, J.-H. Franke, S.K. Podiyanachari, T. Blömker, H. Zhang, G. Kehr, G. Erker, H. Fuchs, L. Chi, *Science* **2011**, *334*, 213-216, https://doi.org/10.1126/science.1211836.

[44] Q. Sun, C. Zhang, H. Kong, Q. Tan, W. Xu, *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 11825-11828, https://doi.org/10.1039/C4CC05482B.

[45] A. Wiengarten, K. Seufert, W. Auwärter, D. Ecija, K. Diller, F. Allegretti, F. Bischoff, S. Fischer, D.A. Duncan, A.C. Papageorgiou, F. Klappenberger, R.G. Acres, T.H. Ngo, J.V.Barth, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 9346-9354, https://doi.org/10.1021/ja501680n.

[46] Y. He, M. Garnica, F. Bischoff, J. Ducke, M.-L. Bocquet, M. Batzill, W. Auwärter, J.V. Barth, *Nat. Chem.* **2017**, *9*, 33-38, https://doi.org/10.1038/nchem.2600.

[47] Q. Sun, L.M. Mateo, R. Robles, N. Lorente, P. Ruffieux, G. Bottari, T. Torres, R. Fasel, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2021**, *60*, 16208-16214, https://doi.org/10.1002/anie.202105350.

[48] N. Pavliček, A. Mistry, Z. Majzik, N. Moll, G. Meyer, D.J. Fox, L. Gross, *Nature Nanotechnol.* **2017**, *12*, 308-311, https://doi.org/10.1038/nnano.2016.305.

[49] R. Zuzak, R. Dorel, M. Krawiec, B. Such, M. Kolmer, M. Szymonski, A.M. Echavarren, S. Godlewski, *ACS Nano* **2017**, *11*, 9321-9329, https://doi.org/10.1021/acsnano.7b04728.

[50] K. Biswas, J.I. Urgel, M.R. Ajayakumar, J. Ma, A. Sánchez-Grande, S. Edalatmanesh, K. Lauwaet, P. Mutombo, J.M. Gallego, R. Miranda, P. Jelínek, X. Feng, D. Écija. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2022**, *61*, e202114983, https://doi.org/10.1002/anie.202114983.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

[51] L. Lafferentz, V. Eberhardt, C. Dri, C. Africh, G. Comelli, F. Esch, S. Hecht, L. Grill, *Nat. Chem.* **2012**, *4*, 215-220, https://doi.org/10.1038/nchem.1242.
[52] L. Cai, X. Yu, M. Liu, Q. Sun, M. Bao, Z. Zha, J. Pan, H. Ma, H. Ju, S. Hu, L. Xu, J. Zou, C. Yuan, T. Jacob, J. Björk, J. Zhu, X. Qiu, W. Xu, *ACS Nano* **2018**, *12*, 7959-7966, https://doi.org/10.1021/acsnano.8b02459.
[53] F. Kang, W. Gao, L. Cai, C. Li, C. Yuan, W. Xu, *J. Phys. Chem. C* **2021**, *125*, 23840-23847, https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c08003.
[54] C.-H. Shu, M.-X. Liu, Z.-Q. Zha, J.-L. Pan, S.-Z. Zhang, Y.-L. Xie, J.-L. Chen, D.-W. Yuan, X.-H. Qiu, P.-N. Liu, *Nat. Commun.* **2018**, *9*, 2322, https://doi.org/10.1038/s41467-018-04681-z.
[55] S. Kawai, A. Ishikawa, S-I. Ishida, T. Yamakado, Y. Ma, K. Sun, Y. Tateyama, R. Pawlak, E. Meyer, S. Saito, A. Osuka. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2022**, *61*, e202114697, https://doi.org/10.1002/anie.202114697.
[56] B. Cirera, A. Sánchez-Grande, B. de la Torre, J. Santos, S. Edalatmanesh, E. Rodríguez-Sánchez, K. Lauwaet, B. Mallada, R. Zbořil, R. Miranda, O. Gröning, P. Jelínek, N. Martín, D. Ecija, *Nat. Nanotechnol.* **2020**, *15*, 437-443, https://doi.org/10.1038/s41565-020-0668-7.
[57] D.J. Rizzo, G. Veber, T. Cao, C. Bronner, T. Chen, F. Zhao, H. Rodriguez, S.G. Louie, M.F. Crommie, F.R. Fischer. *Nature* **2018**, *560*, 204-208, https://doi.org/10.1038/s41586-018-0376-8.
[58] H.-Y. Gao, H. Wagner, D. Zhong, J.-H. Franke, A. Studer, H. Fuchs. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2013**, *52*, 4024-4028, https://doi.org/10.1002/anie.201208597.
[59] J. Liu, P. Ruffieux, X. Feng, K. Müllen, R. Fasel, *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 11200-11203, https://doi.org/10.1039/C4CC02859G.
[60] J. Cai, P. Ruffieux, R. Jaafar, M. Bieri, T. Braun, S. Blankenburg, M.Muoth, A.P. Seitsonen, M. Saleh, X. Feng, K. Müllen, R. Fasel, *Nature* **2010**, *466*, 470-473, https://doi.org/10.1038/nature09211.
[61] Z. Chen, A. Narita, K. Müllen, *Adv. Mat.* **2020**, *32*, 2001893, https://doi.org/10.1002/adma.202001893.
[62] L. Jiang, A.C. Papageorgiou, S.C. Oh, Ö. Sağlam, J. Reichert, D.A. Duncan, Y.-Q. Zhang, F. Klappenberger, Y. Guo, F. Allegretti, S. More, R. Bhosale, A. Mateo-Alonso, J.V. Barth, *ACS Nano* **2016**, *10*, 1033-1041, https://doi.org/10.1021/acsnano.5b06340.
[63] S. Mishra, D. Beyer, K. Eimre, S. Kezilebieke, R. Berger, O. Gröning, C.A. Pignedoli, K. Müllen, P. Liljeroth, P. Ruffieux, X. Feng, R. Fasel. *Nat. Nanotechnol.* **2020**, *15*, 22-28, https://doi.org/10.1038/s41565-019-0577-9.
[64] D.G. de Oteyza, T. Frederiksen, *J. Phys. Cond. Matter* **2022**, *34*, https://doi.org/10.1088/1361-648X/ac8a7f.
[65] K. Biswas, M. Urbani, A. Sánchez-Grande, D. Soler-Polo, K. Lauwaet, A. Matěj, P. Mutombo, L. Veis, J. Brabec, K. Pernal, J.M. Gallego, R. Miranda, D. Écija, P. Jelínek, T. Torres, J.I. Urgel, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 12725-12731, https://doi.org/10.1021/jacs.2c02700.
[66] K. Biswas, J. Janeiro, A. Gallardo, M. Lozano, A. Barragán, B. Álvarez, D. Soler-Polo, O. Stetsovych, A. Pinar Solé, K. Lauwaet, J.M. Gallego, D. Pérez, R. Miranda, J.I. Urgel, P. Jelínek, D. Peña, D. Écija. *Nat. Synth.* **2024**, *4*, 233-242, https://doi.org/10.1038/s44160-024-00665-8.
[67] A. Kinikar, M. Di Giovannantonio, J.I. Urgel, K. Eimre, Z. Qiu, Y. Gu, E. Jin, A. Narita, X.-Y. Wang, K. Müllen, P. Ruffieux, C.A. Pignedoli, R. Fasel. *Nat. Synth.* **2022**, *1*, 289-296, https://doi.org/10.1038/s44160-022-00032-5.
[68] A. Barragán, M. Urbani, A. Gallardo, E. Pérez-Elvira, Ó. Jover, K. Lauwaet, J.M. Gallego, R. Miranda, M. Di Giovannantonio, D. Écija, T. Torres, J.I. Urgel. *Small* **2025**, *21*, 2408085, https://doi.org/10.1002/smll.202408085.
[69] F. Albrecht, I. Rončević, Y. Gao, F. Paschke, A. Baiardi, I. Tavernelli, S. Mishra, H.L. Anderson, L. Gross, *Science* **2024**, *384*, 677-682, https://doi.org/10.1126/science.ado1399.
[70] K. Kaiser, L.M. Scriven, F. Schulz, P. Gawel, L. Gross, and H.L. Anderson. *Science* **2019**, *365*, 1299-1301, https://doi.org/10.1126/science.aay1914.
[71] Y. Gao, F. Albrecht, I. Rončević, I. Ettedgui, P. Kumar, L.M. Scriven, K.E. Christensen, S. Mishra, L. Righetti, M. Rossmannek, I. Tavernelli, H.L. Anderson, L. Gross. *Nature* **2023**, *623*, 977-981, https://doi.org/10.1038/s41586-023-06566-8.
[72] L. Sun, W. Zheng, W. Gao, F. Kang, M. Zhao, W. Xu. *Nature* **2023**, *623*, 972-976, https://doi.org/10.1038/s41586-023-06741-x.
[73] F. Albrecht, S. Fatayer, I. Pozo, I. Tavernelli, J. Repp, D. Peña, L. Gross, *Science* **2022**, *377*, 298-301, https://doi.org/10.1126/science.abo6471.
[74] E. Pérez-Elvira, A. Barragán, Q. Chen, D. Soler-Polo, A. Sánchez-Grande, D.J. Vicent, K. Lauwaet, J. Santos, P. Mutombo, J.I. Mendieta-Moreno, B. de la Torre, J.M. Gallego, R. Miranda, N. Martín, P. Jelínek, J.I. Urgel, D. Écija. *Nat. Synth.* **2023**, *2*, 1159-1170, https://doi.org/10.1038/s44160-023-00390-8.
[75] E. Pérez-Elvira, A. Barragán, A. Gallardo, J. Santos, C. Martín-Fuentes, K. Lauwaet, J.M. Gallego, R. Miranda, H. Sakurai, J.I. Urgel, J. Björk, N. Martín, D. Écija. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2025**, *64*, e202414583, https://doi.org/10.1002/anie.202414583.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Ana Barragán
Instituto Madrileño de Estudios Avanzados IMDEA Nanociencia
C-e: ana.barragan@imdea.org
ORCID: 0000-0003-2570-5018

Doctora en Física de Nanoestructuras y Materiales Avanzados por la Universidad del País Vasco UPV/EHU, su tesis abordó el ensamblaje molecular y las reacciones químicas en superficie de moléculas orgánicas mediante microscopia de efecto túnel a bajas temperaturas. También fue investigadora postdoctoral en el CFM y el DIPC (Donostia-San Sebastián). Actualmente, forma parte del grupo "*Quantum Organic Materials at Interfaces*" en IMDEA como Investigadora permanente, siendo responsable del laboratorio de microscopía nc-AFM/STM. Su línea de investigación se centra en el estudio de la estructura y las propiedades electrónicas de nuevos nanomateriales mediante técnicas de microscopia de sonda local.

Nazario Martín
Instituto Madrileño de Estudios Avanzados IMDEA Nanociencia
Dto. de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense Madrid
C-e: nazmar@quim.ucm.es
ORCID: 0000-0002-5355-1477

Catedrático de Química Orgánica en la Universidad Complutense de Madrid y director adjunto de IMDEA-Nanociencia. Su investigación se centra en la química molecular y supramolecular de nanoestructuras de carbono en el ámbito de sus propiedades quirópticas y fotofísicas, así como sus aplicaciones en energía fotovoltaica y biomédicas. Ha disfrutado de un proyecto *Advanced-Grant* (*Chirallcarbon* 2012-2018) y actualmente de un proyecto *Synergy-Grant* (Tomatto 2021-2027), ambos del European Research Council (ERC). Ha sido presidente de la RSEQ y de COSCE y premio nacional de química Enrique Moles 2020. Es académico de número de la Real Academia de Ciencias de España (RAC) y correspondiente de la Real Academia de Doctores de España (RADE). Actualmente se encuentra entre el 2% de los científicos más influyentes del mundo, según el ranking de científicos que ha elaborado la universidad de Stanford.

David Écija
Instituto Madrileño de Estudios Avanzados IMDEA Nanociencia
C-e: david.ecija@imdea.org
ORCID: 0000-0002-8661-8295

El Prof. David Écija es experto en física de la materia condensada, así como en nanociencia molecular y de superficies. Obtuvo el título de doctor en Física por la Universidad Autónoma de Madrid (UAM), con una tesis sobre el autoensamblaje de nanoestructuras en superficies dirigida por los doctores Rodolfo Miranda y José María Gallego. Fue galardonado con una beca *Marie Curie Intra-European Fellowship* y se incorporó al grupo del Prof. Barth en la Universidad Técnica de Múnich, donde investigó nanoarquitecturas moleculares funcionales sobre superficies. En enero de 2014 se unió al Instituto IMDEA Nanociencia como investigador y becario "Ramón y Cajal" para desarrollar nanomateriales sobre superficies, fundando el grupo "*Quantum Organic Materials at Interfaces*". Tras obtener la *ERC Consolidator Grant* en 2018 fue promocionado a Profesor de Investigación. En 2025 ha recibido la ERC Synergy Grant (Magnesis).

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2090

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 324-330
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2031
La revista de la Real Sociedad Española de Química

ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

Un método sencillo para analizar el porcentaje de bioetanol en la gasolina: el test de la probeta

A simple method to analyse the percentage of bioethanol in petrol: the graduated cylinder test

Fernando I. de Prada Pérez de Azpeitia

Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física y la Química (RSEF y RSEQ).

PALABRAS CLAVE:
Gasolina
Índice de octanos
Aditivos
Porcentaje de bioetanol
Test de la probeta

RESUMEN:
En el año 2018, entró en vigor en la Unión Europea un nuevo etiquetado para identificar los distintos tipos de gasolina, basado en el porcentaje de bioetanol en lugar del índice de octanos. Sin embargo, todavía sigue siendo muy desconocido, y después de varios años coexisten ambos sistemas de clasificación. La finalidad del artículo es, desde una perspectiva didáctica y divulgativa, dar a conocer el significado del nuevo sistema, identificar los principales aditivos que se añaden a la gasolina para mejorar sus propiedades y exponer un sencillo método (test de la probeta) para analizar, de forma rápida y aproximada, el porcentaje de etanol indicado en todos los surtidores de gasolina de las estaciones de servicio.

KEYWORDS:
Petrol
Octane number
Additives
Bioethanol percentage
Graduated cylinder test

ABSTRACT:
In 2018, new labelling was introduced in the European Union to identify the different types of petrol, based on the percentage of bioethanol instead of the octane number. However, it is still relatively unknown, and both classification systems continue to coexist. Stemming from a didactic and informative perspective, this article aims to illustrate the significance of the new system, identify the main additives that are included in petrol in order to improve its properties and present a simple method (the graduated cylinder test) of quickly and roughly analysing the percentage of ethanol indicated on all petrol pumps at service stations.

Introducción

La gasolina se puede considerar un fluido tan vital para la sociedad como el agua para los seres vivos. Sin ella, el mundo se detendría. En general, es bien conocido que la gasolina se obtiene del petróleo por destilación fraccionada, que está formada por una mezcla de cientos de hidrocarburos, que es un combustible fundamental en múltiples sectores (transporte, industrias, agricultura…) y que el octanaje es el índice utilizado para clasificarla. Pero lo que no es tan conocido es el sistema de etiquetado de la gasolina, que entró en vigor en la Unión Europea en 2018, basado en el porcentaje de bioetanol que contiene y que, a día de hoy, coexiste con el tradicional, basado en el índice de octanos.

Con el objetivo de dar a conocer el significado de este sistema de clasificación, a la vez que de formar a consumidores críticos y responsables con el medio ambiente, se exponen de forma divulgativa y didáctica contenidos relacionados con la química de las gasolinas, entre ellos: principales aditivos que se añaden para mejorar sus propiedades, diferencias entre los tipos de gasolina y un test rápido para analizar el porcentaje de bioetanol indicado en las etiquetas de los surtidores de gasolina de las estaciones de servicio.

Con todo ello, se pretende poner en relieve la importancia de la química en la elaboración de combustibles (esenciales para la red mundial de transporte y el progreso de la sociedad moderna) y el interés en producir combustibles cada vez más respetuosos con el medio ambiente. Tanto la química verde como la Unión Europea comparten los objetivos de aumentar la implantación de materias primas renovables y reducir el impacto de los productos químicos en el medio ambiente y la salud.

De los octanos al porcentaje de bioetanol

En 1927, para clasificar a las gasolinas, se estableció una escala arbitraria denominada índice de octano (octanaje), que toma como referencia dos hidrocarburos puros: el n-heptano y el isooctano (2,2,4-trimetilpentano). Al alcano n-heptano, que durante su combustión causa una alta detonación (combustión prematura y explosiva de la mezcla de aire-combustible que puede dañar el motor), se le asignó un octanaje de cero, mientras que al isooctano, un combustible de baja detonación (antidetonante), que retrasa la combustión para que se produzca de forma muy suave, se le asignó un octanaje de 100. La razón por la que se eligió el hidrocarburo ramificado en lugar del n-octano, se encuentra en que los isómeros ramificados generalmente presentan fuerzas intermoleculares más intensas que

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: F. Prada. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 324-330, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2031

* C-e: fernando.pradaperez@educa.madrid.org

Manuscrito recibido: 10/04/2025 · aceptado: 22/07/2025

los de cadena lineal. De hecho, las fuerzas de dispersión de London son mayores en el isooctano que en el n-octano. Esto hace que provoque menos detonación (combustión más suave) que su isómero lineal, el n-octano, responsable de combustiones mucho más explosivas, con un índice de octano incluso negativo (-20).

De esta forma, una gasolina de 95 octanos equivale a una mezcla que contiene 95 % de isooctano y 5 % de n-heptano. Y la de 98 octanos, equivale a una mezcla con el 98 % de isooctano y el 2 % de n-heptano. A mayor octanaje, mayor capacidad de resistencia a la detonación y mayor rendimiento en motores de alta compresión y altas prestaciones. Algunos automóviles deportivos y vehículos de competición (Formula 1, motoGP), utilizan gasolinas especiales que presentan propiedades antidetonantes superiores al índice 100 de octano, debido a que contienen mayor porcentaje de compuestos oxigenados (alcoholes, éteres…) que las gasolinas convencionales.

Para determinar el índice de octano de las gasolinas se emplean dos sistemas diferentes, que analizan el comportamiento de la gasolina en un motor de prueba, pero en condiciones ligeramente distintas:

- R.O.N. (*Research Octane Number*) o número de octano de investigación: en viajes urbanos, a bajas revoluciones, con muchas pausas y aceleraciones.
- M.O.N. (*Motor Octane Number*) o número de octano del motor: cuando se conduce por carretera, de forma regular, a altas revoluciones y sin muchas interrupciones

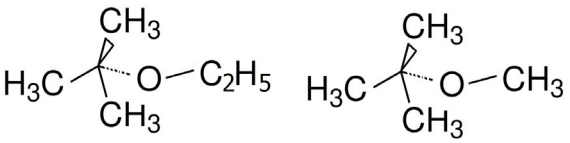
En Europa, los distribuidores de gasolina generalmente utilizan el RON. En otros países, como Estados Unidos y Canadá, utilizan un promedio de ambos valores o PON (*Pump Octane Number*), a veces denominado AKI (Índice de Antidetonación: *Anti Knock Index*).

Los principales hidrocarburos de la gasolina no tienen el octanaje suficiente para el óptimo funcionamiento de los motores de combustión; es necesario aumentarlo. Con esta finalidad, durante el siglo XX se añadieron a la gasolina aditivos que contenían plomo, como el tetraetilo de plomo, de fórmula $(CH_3CH_2)_4Pb$. Pero este compuesto, al ser expulsado junto a los gases de escape presentaba problemas de toxicidad: el plomo se acumula en los seres vivos, afectando gravemente al sistema nervioso. Además, dañaba los catalizadores, al recubrir (envenenar) sus centros activos, mermando la reducción de los gases contaminantes expulsados por el tubo de escape. A partir de 1975, los compuestos de plomo fueron eliminados gradualmente como aditivos de la gasolina. Hasta que en 2001, la UE aprobó una normativa para retirar del mercado las gasolinas con plomo y prohibir su venta.[1] Solo se autoriza su uso en coches antiguos certificados como clásicos o históricos.

Los aditivos con plomo fueron sustituidos por éteres, como el etil terc-butil éter (ETBE), con un octanaje de 120, y el metil terc-butil éter (MTBE), con un octanaje de 119 (Fig. 1). Estos compuestos oxigenados, además de aumentar el octanaje, mejoran la eficacia de la combustión, disminuyen la corrosión y reducen las emisiones de monóxido de carbono, ozono y óxidos de nitrógeno.[2]

El inconveniente de añadir MTBE a la gasolina es que si se filtra desde los tanques de almacenamiento subterráneos, dada su solubilidad y a la dificultad en biodegradarse, puede llegar a contaminar las aguas subterráneas. Por esta razón, en algunos países (EEUU, Canadá, Japón…) su uso está prohibido como aditivo y ha sido sustituido por el ETBE, de menor solubilidad y más fácil de retirar en caso de derrame.[3]

Otro compuesto oxigenado que se añade a las gasolinas es el bioetanol anhidro. El objetivo es, además de aumentar el



etil t-butil éter (ETBE) metil t-butil éter (MTBE)

Figura 1. Fórmulas de los aditivos oxigenados ETBE y MTBE.

octanaje (índice RON superior a 120) y mejorar la combustión, reducir la emisión de gases contaminantes y de efecto invernadero.[4] De esta forma se contribuye a alcanzar los objetivos marcados por la Unión Europea: disminuir la dependencia de combustibles fósiles, aumentar el de recursos renovables y conseguir combustibles cada vez más respetuosos con el medio ambiente. Por ende, según la Directiva de la Unión Europea 2014/94/UE, desde el año 2018 entró en vigor en Europa el nuevo etiquetado para las gasolinas, basado en el porcentaje de bioetanol añadido, en lugar del octanaje (Fig. 2). Para cumplir con esta normativa, todas las gasolinas deben etiquetarse con un círculo con la letra E en su interior, que hace referencia a su contenido en etanol, seguida de un número que corresponde al porcentaje máximo que puede contener: E5 (máximo 5% V), E10 (máximo 10% V) y E85 (máximo 85 % V).[5]

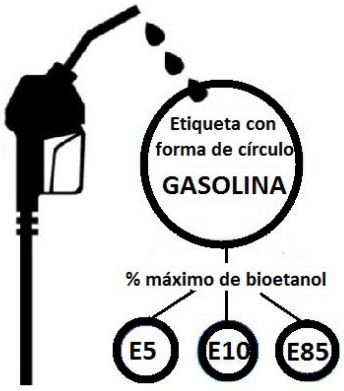


Figura 2. Etiquetado basado en el porcentaje de bioetanol.

Los motores de los vehículos de gasolina fabricados a partir del año 2000, pueden funcionar sin problemas con la gasolina E10. Para porcentajes superiores al 15 % de etanol, los motores tienen que ser adaptados. En Brasil, por ejemplo, actualmente el 90 % de las ventas de vehículos nuevos son de combustible flexible (FFV: Vehículos Flux Fuel) que pueden funcionar con gasolina o con cualquier mezcla de bioetanol y gasolina. En este mismo país, cuna del bioetanol como combustible, los empleados de las gasolineras (a petición del consumidor) están obligados a realizar el test de la probeta para determinar la cantidad de etanol anhidro de la gasolina que expenden. Se considera un fraude el exceso de etanol en la gasolina, debido a que se traduce en una pérdida de eficiencia energética, es decir, se recorren menos kilómetros por litro de combustible. En España, las estaciones de servicio de diversas autonomías, entre ellas la Comunidad de Madrid,[6] están obligadas a realizar un test también conocido como "prueba de la probeta", pero en este caso se realiza con un matraz de 10,0 L y con otro objetivo: comprobar que la cantidad servida de combustible es la misma que la indicada por el surtido y verificar que está calibrado correctamente.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2031

En la actualidad, el índice de octano sigue siendo la forma general de clasificar a las gasolinas, combinado con el porcentaje de bioetanol. Entre ambos sistemas no hay equivalencia: el octanaje es una propiedad físico-química relacionada con la resistencia de la gasolina a la detonación y el código E es una referencia al porcentaje de bioetanol. Así, las gasolinas de 95 y de 98 octanos pueden ser tanto E5 como E10.

Generalmente, las estaciones de servicio en España distribuyen gasolina E5, de 95 y de 98 octanos (Fig. 3), pero ni la E10 ni la E85, a diferencia de otros países europeos que sí lo hacen, como Francia, Suecia, Finlandia, Alemania... La razón principal es que, en estos países, el bioetanol paga menos impuestos que la gasolina.[7] Al contrario que en España, donde la fiscalidad con la que se grava al bioetanol es superior a la de la gasolina. Se da la paradoja de que cuanto más renovable sea la gasolina más alta es la fiscalidad, lo que desincentiva a las petroleras españolas a comercializar mezclas con mayor porcentaje de bioetanol. Según la Asociación Española de Bioetanol, el valor medio del porcentaje de bioetanol en las gasolinas E5 durante el año 2024 fue del 2,9 %, habiendo aumentado un 0,1 % respecto al 2023.[8]

Figura 3. Etiquetado basado en el porcentaje de bioetanol. Etiquetado de las gasolinas basado en el índice de octanos y en el porcentaje de bioeteanol.

El etanol procedente de la fermentación anaeróbica de materias primas que contienen glúcidos de origen vegetal (maíz, trigo, remolacha, caña de azúcar...) se denomina bioetanol de primera generación. Cuando resulta de la fermentación de biomasa lignocelulósica (residuos de la industria agroalimentaria y celulósica, maderas...) se denomina bioetanol de segunda generación. Durante la fermentación alcohólica no se obtiene etanol anhidro, sino hidratado, con un porcentaje de agua sobre el 5 %. Para utilizarlo como combustible es necesario reducir el agua al máximo, hasta una pureza próxima al 99,5 %. Para ello se emplean diferentes técnicas de deshidratación: destilación azeotrópica, adsorción por tamices moleculares, etc.

Pero no todo son ventajas. El etanol utilizado como combustible presenta ciertos inconvenientes. Por un lado, su poder calorífico (26,9 MJ/kg) es inferior al de la gasolina (43,5 MJ/kg). Por tanto, su adición al combustible aumenta el consumo. Por otro lado, si su porcentaje es elevado, durante la combustión se forman productos con efecto corrosivo sobre las partes metálicas del motor (carburador, válvulas), juntas de caucho y tanque de almacenamiento.

¿Son iguales todas las gasolinas?

Como España no cuenta con pozos petrolíferos propios, para abastecerse de combustible necesita importarlo desde países productores que cuentan con yacimientos y pozos petrolíferos (Estados Unidos, México, Brasil, Nigeria, Irak, etc.). Al llegar el petróleo a la península, generalmente por vía marítima, se reparte entre las instalaciones de las ocho refinerías situadas estratégicamente (Cádiz, Bilbao, Cartagena, Algeciras, Coruña, Huelva, Puertollano y Tarragona), que pertenecen a diferentes operadores con capacidad de refino, como Repsol, Moeve (antigua CEPSA) y BP. Una vez refinado; el producto se distribuye a través de oleoductos hasta los tanques de las compañías logísticas, principalmente a la multinacional Exolum (antigua CLH), encargada de almacenar, transportar y distribuir los combustibles por toda España. Desde los grandes depósitos de los centros logísticos, los mayoristas y operadores independientes, cargan el combustible en camiones cisterna para repartirlo entre la red de estaciones de servicio, donde se pone a la venta a los consumidores (Fig. 4). Todas las gasolineras de una misma región, independientemente de la marca, se abastecen de los mismos depósitos y ofrecen el mismo producto básico.

La compañía distribuidora Exolum tiene que garantizar por ley unos mínimos estandarizados de calidad, de forma que los combustibles que salen de sus instalaciones pueden ser utilizados directamente sin ningún añadido especial. En Madrid, la gasolina procede principalmente de dos de sus instalaciones (Torrejón de Ardoz y Villaverde), donde se inyecta el bioetanol en la propia línea de carga de las gasolinas para evitar que absorba humedad, dado su carácter higroscópico, lo cual perjudicaría a los motores. En cuanto al bioetanol, en España la mayoría procede de la productora Vertex Bioenergy, que cuenta con plantas localizadas en Salamanca, Murcia y Galicia.

A petición de los mayoristas, la distribuidora Exolum agrega a los combustibles aditivos básicos de fórmula no revelada, como HQ300 (para gas oil) y HQ400 (para gasolinas), en cantidades muy pequeñas, sobre 100-200 ppm (1-2 litros por cada 10.000 litros de combustible). Por otro lado, las propias marcas de gasolina desarrollan sus aditivos multifuncionales, con el fin de mejorar las propiedades de los carburantes y, con ello, el rendimiento, limpieza y durabilidad de los motores. Estos aditivos extra se añaden al cargar el combustible en el camión cisterna o bien al llenar los tanques de la gasolinera.

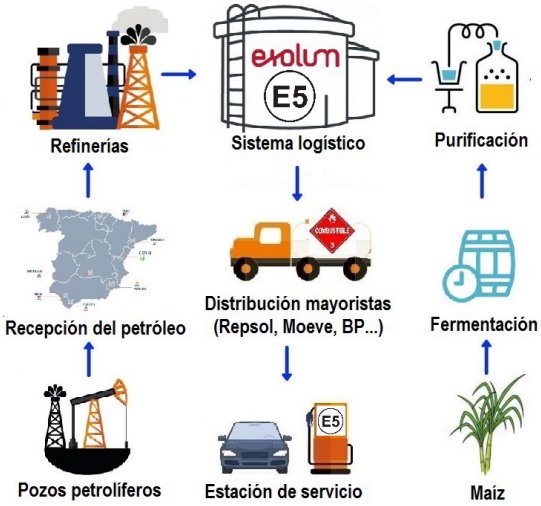


Figura 4. Etapas en la producción de gasolina con bioetanol. Infografía basada en la Ref. [9].

Los aditivos multifuncionales que añaden las petroleras, y los que se pueden encontrar en el mercado, contienen productos con diferentes propiedades, como las siguientes:

© 2025 Real Sociedad Española de Química

- Inhibidores de la corrosión: protegen los elementos metálicos de la oxidación y reducen la acumulación de residuos, por ejemplo, ácidos aril sulfónicos, ácidos alquil ortofosfóricos y sales de amina de ácidos alquenil succínicos.
- Antioxidantes: retardan la oxidación de los componentes, por ejemplo, fenilendiaminas y fenoles, diaminas aromáticas y alquilfenol.
- Antiemulsionantes: evitan la formación de emulsiones en el caso de que se introduzca agua accidentalmente.
- Detergentes: mantienen limpios los sistemas de inyección y la cámara de combustión, por ejemplo, polibutenamina, poliisobutilenamina y polieteramina.

Respecto a la calidad de las gasolinas, se pueden encontrar tres categorías diferentes:

- *Low cost*: gasolina que cumple con los mínimos estandarizados de calidad (como Ballenoil, Petroprix y Alcampo).
- Normal: fórmula que añade aditivos propios de cada marca para mejorar la calidad del carburante.
- *Premium*: versión de alta gama con aditivos específicos para motores de alto rendimiento.

Los tres tipos de gasolina contienen los mismos compuestos básicos y en las mismas proporciones. La única diferencia entre una gasolina *low cost* y otra de diferente categoría se encuentra en los aditivos que incorporan los mayoristas, como confirman análisis realizados por el Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Barcelona.[10]

Análisis del porcentaje de bioetanol en la gasolina: test de la probeta

En los laboratorios y en la industria química, para recuperar y separar compuestos orgánicos se utiliza una técnica de extracción líquido-líquido, basada en la diferente solubilidad de un soluto en dos fases inmiscibles, que se transfiere de una fase líquida a otra. Por otro lado, para determinar el porcentaje de etanol que contiene un combustible se emplean técnicas analíticas instrumentales, como cromatografía de gases o espectroscopia IR.[11,12] Los métodos de extracción y análisis, se pueden unificar y simplificar mediante el test de la probeta: método de campo que consiste en extraer el bioetanol de la gasolina, medir directamente su volumen y obtener, de forma rápida, el porcentaje en volumen.[13]

Nivel educativo y objetivos de aprendizaje

El test de la probeta está recomendado para estudiantes de bachillerato, que es el nivel donde se incluyen todos los contenidos necesarios para comprender el fundamento químico del proceso de la extracción y en el que ya deberían tener cierta práctica en el trabajo de laboratorio.

Los principales objetivos se indican a continuación:

- Identificar el carácter polar de las moléculas presentes en la gasolina y sus interacciones con las moléculas de agua.
- Aplicar adecuadamente un método de separación para extraer el bioetanol de la gasolina.
- Determinar el volumen de bioetanol en la gasolina utilizando correctamente material volumétrico.
- Calcular el porcentaje de bioetanol presente en la gasolina.
- Analizar los factores de error que influyen en el resultado.
- Aprender a gestionar los residuos generados.
- Valorar positivamente la contribución de la química en conseguir un desarrollo sostenible.

Fundamento teórico

La molécula de agua está formada por átomos con electronegatividades muy diferentes (2,2 el hidrógeno y 3,2 el oxígeno, en la escala de Pauling). Esta diferencia genera una carga negativa parcial en el oxígeno y cargas positivas parciales en los hidrógenos. Como la geometría de la molécula de agua no es lineal, los momentos dipolares no se anulan lo que le otorga a la molécula de agua su carácter polar. La presencia de átomos de oxígeno unidos a hidrógenos favorece la formación de 4 enlaces por puente de hidrógeno: dos como donador y dos como receptor.

Las moléculas de los hidrocarburos (alifáticos y aromáticos) que forman parte de la gasolina están formadas por átomos de carbono e hidrógeno. Como la diferencia de electronegatividad entre ellos es de 0,5, en la escala citada, se consideran moléculas apolares; solo existen débiles interacciones temporales debido a fuerzas de dispersión de London (dipolo instantáneo-dipolo inducido). Al no tener estas moléculas átomos de oxígeno unidos a carbonos, no hay enlaces de hidrógeno, son muy poco solubles e inmiscibles en agua.

En el caso de la molécula de etanol, por un lado, contiene un extremo polar (-OH) hidrofílico y soluble en agua y, por otro, un extremo apolar (C_2H_5-) soluble en disolventes apolares como la gasolina. Esta clase de moléculas que tienen una zona polar y otra apolar, se denominan anfipáticas o anfifílicas. (Fig. 5). Debido a la posibilidad de formar dos enlaces por puente de hidrógeno (uno como donador y otro como receptor), y a su corta cadena, el etanol es miscible y soluble en agua en todas proporciones. Además, al igual que entre las moléculas de agua, existen otras interacciones de menor intensidad, como las fuerzas dipolo-dipolo inducido y las de dispersión de London.

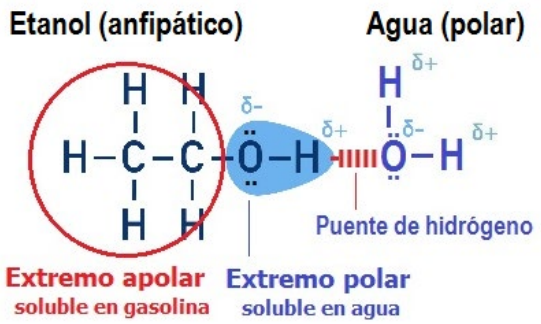


Figura 5. Representación del enlace por puente de hidrógeno entre la molécula de etanol y la molécula de agua (fórmulas desarrolladas).

La transferencia del etanol de la gasolina al agua se debe a que las fuerzas intermoleculares entre las moléculas de etanol y las de agua (fundamentalmente enlaces por puente de hidrógeno) son mayores que las fuerzas intermoleculares entre las moléculas de etanol y las de los hidrocarburos de la gasolina (fuerzas dipolo-dipolo inducido y dipolo instantáneo-dipolo inducido).

La adición de cloruro de sodio al agua para formar una disolución salina concentrada tiene como objetivo aumentar la polaridad de la fase acuosa y, por ende, favorecer la extracción del etanol. Además, la pequeña solubilidad de los hidrocarburos aromáticos en agua disminuye en la disolución salina, por lo que se considera insignificante su transferencia a la fase acuosa.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2031

Reactivos y materiales

Gasolinas E5 y E15, agua (no es necesario que sea destilada), cloruro de sodio, dos probetas de 100 mL (una de ellas con tapón esmerilado), vaso de precipitados de 250 mL, embudo de decantación, guantes de nitrilo o de gasolinera (polietileno) y gafas de seguridad.

La gasolina E15 analizada en el ejemplo aquí propuesto (marca Shell) procede de la estación de servicio situada en Las Tablas (Madrid), la única localizada que suministra una gasolina con mayor porcentaje de bioetanol que la E5. Si se desea realizar el test de la probeta en gasolinas con un porcentaje semejante a la E15 o superior, teniendo en cuenta su dificultad en encontrarlas, se pueden preparar en el laboratorio añadiendo alcohol sanitario de 96° (solución de etanol al 96 % V) a la gasolina E5.

Al adquirir la gasolina en una estación de servicio no se debe transportar en cualquier envase. Para garantizar la seguridad, desde el año 2017 (Real Decreto 706/2017) es obligatorio hacerlo en bidones homologados (Etiqueta UN1202-UN1203), que tienen que estar disponibles en las tiendas de todas las gasolineras.

Procedimiento experimental

A. Análisis de una gasolina E5 (Marca Repsol)

- Colocarse los guantes y las gafas de seguridad.
- Disolver dos cucharaditas de sal común (≈ 15 g) en un vaso de precipitados con 100 mL de agua para preparar una disolución salina concentrada (no es necesario un % específico).
- Introducir 50 mL de la disolución salina en una probeta de 100 mL.
- Introducir 50 mL de gasolina de clase E5 a una probeta con tapón, limpia y seca, de 100 mL.
- Verter la disolución salina en la probeta con gasolina. Al ser ambas disoluciones inmiscibles, se formarán dos fases.
- Tapar la probeta y voltearla sobre quince veces para que se mezclen bien las moléculas y así completar la extracción del etanol de la fase acuosa (Fig. 6). Se debe evitar agitar la mezcla con una varilla de vidrio y con la probeta abierta. Dada la alta volatilidad del combustible se evaporarían algunos mililitros, afectando al resultado final.

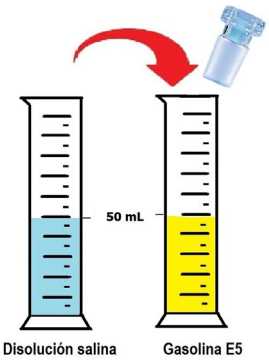


Figura 6. Volúmenes iniciales de la disolución salina y de la orgánica.

- Dejar reposar la mezcla unos 15 minutos hasta completar la separación de las dos fases: la orgánica, en la parte superior por su menor densidad, y la acuosa debajo.
- Anotar el volumen final de la fase acuosa, que vendrá definido por la línea marcada por la interfase.

En el caso de que se quiera evitar el contacto directo de los estudiantes con el combustible, el docente puede realizar la extracción del bioetanol y ser ellos los que tomen las medidas del volumen y calculen el porcentaje. O bien, se les puede proporcionar imágenes, como las de las figuras 7 y 8.

Discusión y resultados

El volumen de la fase acuosa aumenta de 50 mL (V_i) a 52 mL (V_f), como se observa en la figura 7, debido a la transferencia de 2 mL de bioetanol que se encontraba disuelto en la gasolina. Por tanto, se puede considerar que el incremento en el volumen (ΔV) de la fase acuosa es igual al volumen de bioetanol extraído de la gasolina:

$$\Delta V = V_{final} - V_{inicial} = 52\ mL - 50\ mL = 2\ mL = V_{bioetanol}$$

A partir del incremento de volumen se obtiene el porcentaje de etanol en la gasolina analizada:

$$\%\ bioetanol = \left(\frac{V_{bioetanol}}{V_{inicial\ gasolina}}\right)100 = \left(\frac{2\ mL}{50\ mL}\right)\cdot 100 = 4\ \%$$

Como resultado, esta gasolina contiene un 4 % en volumen de bioetanol. Porcentaje que estaría de acuerdo con el indicado en la etiqueta: 5 % máximo de bioetanol.

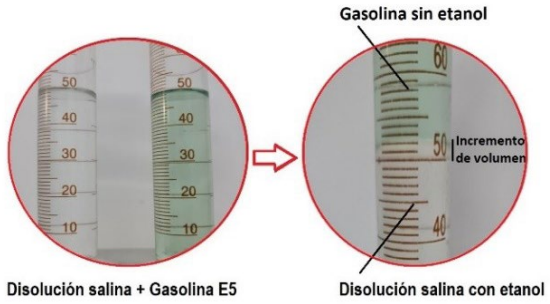


Figura 7. Volúmenes iniciales (disolución salina/ y gasolina E5) y volumen final de la fase acuosa.

B. Análisis de una gasolina E15 (Marca Shell)

Repetir el mismo procedimiento para la gasolina E15.

En este caso, se observa que el volumen de la fase acuosa aumenta de 50 mL hasta 60 mL después de realizar la mezcla con la gasolina. Resultando un incremento en el volumen de 10 mL, como se observa en la figura 8.

$$\Delta V = V_{final} - V_{inicial} = 60\ mL - 50\ mL = 10\ mL = V_{bioetanol}$$

$$\%\ bioetanol = \left(\frac{V_{bioetanol}}{V_{inicial\ gasolina}}\right)100 = \left(\frac{10\ mL}{50\ mL}\right)100 = 20\ \%$$

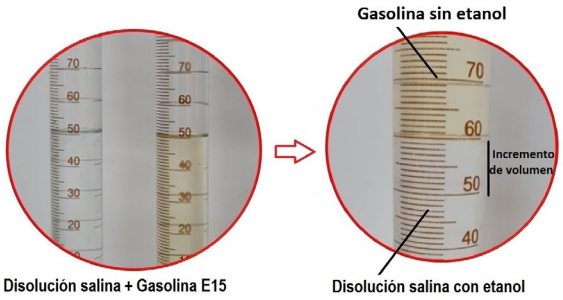


Figura 8. Volúmenes iniciales (disolución salina y gasolina E15) y volumen final de la fase acuosa.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Como conclusión, la gasolina E15 analizada contiene un 20 % de bioetanol, porcentaje superior al mínimo del 15 % indicado en la etiqueta del surtidor de la estación de servicio.

Factores que influyen en el resultado

La principal fuente de error del test de la probeta se encuentra en la sensibilidad del instrumento utilizado para medir el volumen, como ya se indicó anteriormente. El error de precisión (o tolerancia) que aparece indicado en la probeta utilizada coincide con el volumen que puede apreciar; ± 1 mL. Aunque se repita muchas veces la medida, no se podrá mejorar su precisión ni el resultado final. Por tanto, este método es útil para una estimación rápida del bioetanol en la gasolina, siempre y cuando el porcentaje no sea muy bajo, en dicho caso la fiabilidad del test se reduce. Otros factores que influyen en la precisión de la medida son: medir incorrectamente el volumen debido al error de paralaje y/o de lectura del menisco, no agitar la mezcla el tiempo suficiente para extraer todo el alcohol y no dejar reposar las fases el tiempo suficiente para que se separen.

Es importante tener en cuenta que los porcentajes de etanol etiquetados en las gasolinas no son valores exactos, solo son una base de referencia que indica no superar un valor determinado. Además, este porcentaje no siempre es el mismo, puede modificarse por la petrolera según la zona o la época del año. Por tanto, al no conocerse el valor real no es posible evaluar la exactitud del resultado obtenido.

Otras consideraciones

Si bien las masas son aditivas, no ocurre lo mismo con los volúmenes. Así, por ejemplo, al mezclar agua y etanol el volumen final no es igual a la suma de los volúmenes iniciales, sino que se reduce. Esto se debe a que los grupos OH del etanol forman puentes de hidrógeno con la molécula polar del agua. A esto se une que se produce un mayor empaquetamiento intermolecular, dado la diferencia entre el tamaño y la forma de ambas moléculas, lo que acorta la distancia entre las moléculas y deja menos espacio libre. A 25 °C, la contracción máxima de volumen ocurre cuando el porcentaje de etanol es del 50 % V (Fig. 9). En el caso de disoluciones muy diluidas, se puede considerar no significativa la disminución del volumen de la mezcla, teniendo en cuenta además la tolerancia de la probeta.

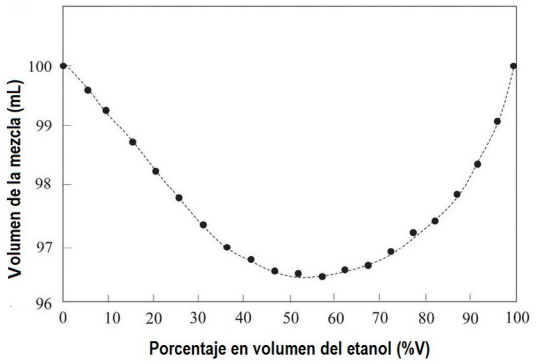


Figura 9. Disminución del volumen de la mezcla de agua-etanol en función del porcentaje de etanol, a 25°C. Reproducida de la Ref. [14].

Por otra parte, en las fichas técnicas de las gasolinas analizadas se indica que la cantidad máxima del antidetonante ETBE que contiene es inferior al 22 % V.[15] Teniendo en cuenta que su densidad es 0,743 g/mL y la solubilidad en agua 2,3 g/L, en los 50 mL de agua podrá haber como máximo 0,15 mL de ETBE. Este volumen se puede considerar despreciable frente al incremento del volumen de la fase acuosa debido a la extracción del etanol.

Normas de seguridad y gestión de residuos

La práctica puede ser realizada por el docente o, si lo considera adecuado, por estudiantes de bachillerato bajo supervisión directa y cumpliendo las normas de seguridad indicadas. Como la gasolina desprende vapores inflamables, la zona de trabajo debe estar bien ventilada y sin fuentes de ignición cerca, tener a mano un extintor y una bolsa de material absorbente, por ejemplo, sepiolita (material utilizado como arena de gatos), por si se produce algún derrame accidental. Este mineral se caracteriza por su estructura cristalina microporosa y gran capacidad de absorción. Por esta propiedad, es utilizada como absorbente industrial y para absorber derrames de combustible y aceite en gasolineras, carreteras y circuitos de carreras.

Finalizada la práctica, y para gestionar los residuos de forma respetuosa con el medio ambiente, conviene separar la mezcla inmiscible con un embudo de decantación. La fase acuosa recogida contiene un bajo contenido en etanol, no es peligrosa y puede ir al desagüe. Sin embargo, la fase con gasolina debe gestionarse como un residuo especial. Aunque los puntos limpios no recogen combustibles líquidos, sí lo hacen cuando van embebidos en un material absorbente, como la sepiolita. De esta forma, el residuo de gasolina se verterá en un vaso de precipitados lleno de sepiolita para que sea absorbida (Fig. 10) y, posteriormente, llevada a un punto limpio para su tratamiento.

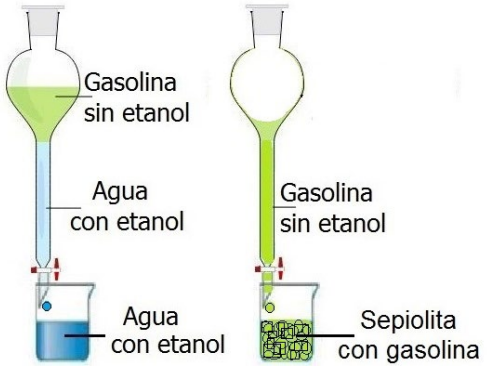


Figura 10. Separación de los residuos para su gestión ambiental (fuente: autor).

Conclusiones

El análisis de un producto como la gasolina, fundamental para el desarrollo y funcionamiento de la sociedad en todo el planeta, permite de forma práctica mejorar la comprensión de contenidos teóricos de química fundamental, entre otros los relacionados con la polaridad de las moléculas y las fuerzas intermoleculares. Además, es un buen ejemplo para reconocer las aplicaciones de la química al desarrollo de la sociedad y en el cuidado del medio ambiente, teniendo en cuenta que los combustibles que incluyen bioetanol contribuyen a reducir el consumo de combustibles fósiles y, por ende, a disminuir las emisiones de gases que incrementan el efecto invernadero.

Respecto al etiquetado de la gasolina basado en el porcentaje de bioetanol, realmente no proporciona al consumidor el valor real, solo una referencia. De hecho, en España el porcentaje medio en la gasolina E5 no supera el 3 % de bioetanol. Aún más, es casi imposible encontrar estaciones de servicio que suministren gasolina con mayor porcentaje de biocombustible

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2031

(E10 o E85), lo que no ayuda a cumplir los objetivos vinculantes previstos por la UE para el año 2030 respecto al aumento en la cuota de biocarburantes.[16]

Bibliografía

[1] Real Decreto 785/2001, de 6 de julio, por el que se adelanta la prohibición de comercialización de las gasolinas con plomo y se establecen las especificaciones de las gasolinas que sustituirán a aquéllas, *BOE* 7 jul. **2001**, (162), disponible en https://www.boe.es/eli/es/rd/2001/07/06/785 (consultado: 15/07/2025).

[2] G. Sobarsah, N. Nuryoto, J. Jayanudin, *Teknika: Jurnal Sains dan Teknologi* **2021**, *17*, 150-157, https://doi.org/10.36055/tjst.v17i2.11989.

[3] K.F. Yee, A.R. Mohamed, S.H. Tan, *Renew Sustain Energy Review* **2013**, *22*, 604-620, https://doi.org/10.1016/j.rser.2013.02.016.

[4] J. Torres, D. Molina, C. Pinto, F. Rueda, *Cienc., Tecnol. Futuro* **2002**, *2*(3), 71-82, https://doi.org/10.29047/01225383.539.

[5] *Combustibles. Identificación de la compatibilidad de los vehículos. Expresión gráfica para la información al consumidor*, UNE-EN 16942:2025, AENOR, Madrid, **2025**.

[6] Decreto 147/1998, de 27 de agosto, de proteccion de los derechos de los consumidores y usuarios en el servicio de suministro de gasolinas y gasoleos de automocion en instalaciones de venta al publico, *BOCM* 4 sep. **1998**, (210), 3-9.

[7] A. Barrero F., *Energías renovables* **2022**, *214*, 62-63, disponible en https://www.energias- renovables.com/fiche-roenergias/productos/pdf/Revista686.pdf (consultado: 15/07/2025).

[8] Asociación Española de Bioetanol, "Bioetanol", disponible en https://bio-e.es/bioetanol/, **2025** (consultado 10/04/2025).

[9] "¿De dónde procede el combustible de Plenoil?" disponible en https://plenergy.es/de-donde-procede-el-combustible-de-plenoil/, 19 abr. **2023**, (consultado: 15/07/2025).

[10] I. Haro, "Analizan una gasolina 'low cost' y otra normal y el resultado es sorprendente", disponible en https://periodismodelmotor.com/analizan-unagasolina-low-cost-y-otra-normal-y-el-resultado-es-sorprendente/337545/, 9 abr. **2022** (consultado: 15/07/2025).

[11] L.S. Moreira, L.A. Dávila, D.A. Acevedo, *Chromatographia* **2003**, *58*, 501-505, https://doi.org/10.1365/s10337-003-0065-z.

[12] G.E. Fodor, K.B. Kohl, R.L. Mason, *Anal. Chem.* **1996**, *68*(1), 23-30, https://doi.org/10.1021/ac9507294.

[13] "Cartilhado do Posto Revendedor de Combustíveis", disponible en https://www.gov.br/anp/pt-br/centrais-de-conteudo/publicacoes/cartilhas-eguias/cartilha-do-posto-revendedor-de-combustiveis, **2020** (consultado: 15/07/2025).

[14] I. N. Levine, *Fisicoquímica*, McGraw-Hill, España, **2004**, *1* (9), 304.

[15] "Repsol Efitec 95 Neotech", disponible en https://www.repsol.es/content/dam/imagesecommerce/particulares/vehiculos/gasolinaneotech/ficha_producto_Efitec_95Neotech_tcm19-51090.pdf (consultado 15/05/2025).

[16] Reglamento Delegado (UE) 2023/1640 de la Comisión de 5 de junio de 2023 relativo a la metodología para determinar la cuota de biocarburantes y biogás para el transporte producidos a partir de biomasa procesada junto a combustibles fósiles en un proceso común, *Diario Oficial de la Unión Europea* 18 ago. **2023**, (L205), 1-7.

Fernando I. de Prada Pérez de Azpeitia

Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física y la Química (RSEF y RSEQ)

C-e: fernando.pradaperez@educa.madrid.org

ORCID: 0000-0002-4897-2082

Profesor de Física y Química en la Comunidad de Madrid y miembro del GEDH (RSEQ/RSEF) y de la DEDF (RSEF). Participa de forma activa en eventos de divulgación científica: Feria Madrid es Ciencia, Ciencia en Acción, *El Pati de la Ciència* (Universidad de Alicante), ConCienciarte (Círculo de Bellas Artes de Madrid), Jornadas de Divulgadores de Ciencia (DDD), etc. Entre sus colaboraciones se encuentran instituciones y empresas como: Aula Mentor (MEFPD), Centro de Innovación y Formación del Profesorado de la Comunidad de Madrid (CTIF), RSEQ, RSEF, Grupo Editorial SM, Museo Nacional del Prado y Parque de Atracciones de Madrid.

1ST MEDITERRANEAN ELECTROCHEMISTRY SCHOOL

01/25/2026 19:00

Cristina García Rodero Museum

Organized by the Electrochemistry Divisions of the Società Chimica Italiana (SCI), the Société Chimique de France (SCF) and the Real Sociedad Española de Química (RSEQ)

1ST MEDITERRANEAN ELECTROCHEMISTRY SCHOOL

Puertollano (Spain)
25-29 January 2026

MEDIELES
MEDITERRANEAN ELECTROCHEMISTRY SCHOOL
Puertollano (Spain), 25-29 January 2026

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 331-336
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2093

La revista de la Real Sociedad Española de Química

HISTORIA DE LA QUÍMICA

Descubriendo al Faraday químico, el hombre que aisló el benceno

Discovering Faraday the chemist, the man who isolated benzene

Inés Pellón González

Universidad del País Vasco (UPV/EHU).

Presidenta del Grupo Especializado de Historia de la Ciencia de la RSEQ.

PALABRAS CLAVE:
Historia de la Química
Michael Faraday
Biografías científicas
Benceno

RESUMEN:
Michael Faraday es uno de los científicos más notables e influyentes de la historia, conocido sobre todo por sus magníficas contribuciones al desarrollo del electromagnetismo y la electroquímica. Sus principales descubrimientos incluyen la inducción electromagnética, el diamagnetismo y la electrólisis, y todos los estudiantes de ciencias saben lo que son la "Ley de Faraday", el "efecto Faraday" o la "Jaula de Faraday". Sin embargo, sus aportaciones a la química han quedado ligeramente desplazadas a un segundo plano, por lo que, en el 200 aniversario de uno de sus principales descubrimientos, el benceno, es de rigor dedicar este artículo a reflejar algunas de ellas, detallando el riguroso trabajo que realizó para obtener, reconocer, aislar y caracterizar una sustancia tan extraordinaria.

KEYWORDS:
History of Chemistry
Michael Faraday
Scientific Biographies
Benzene

ABSTRACT:
Michael Faraday is one of the most remarkable and influential scientists in history, best known for his magnificent contributions to the development of electromagnetism and electrochemistry. His major discoveries include electromagnetic induction, diamagnetism and electrolysis, and all science students are familiar with "Faraday's Law", the "Faraday effect", and the "Faraday cage". However, his contributions to chemistry have been somewhat overshadowed. Therefore, on the 200th anniversary of one of his major discoveries, benzene, it is fitting to dedicate this article to highlighting some of them, detailing the extraordinary work he carried out to obtain, identify, isolate, and characterize such a remarkable substance.

Primeros años: la *Royal Institution*

A finales del siglo XVIII o "Siglo de las Luces", el herrero James Faraday y su esposa Margaret Hastwell se trasladaron con sus dos hijos pequeños desde un pueblecito del nordeste de Inglaterra a otro denominado Newington (ahora integrado en Londres) buscando un futuro mejor. Allí nació el tercero de sus cuatro hijos, al que llamaron Michael, el 22 de septiembre de 1791. Pero las esperanzas de James no se cumplieron, porque al enfermar con frecuencia no cobraba, por lo que la familia pasó por serias dificultades económicas. Para aliviar un poco esta situación, el pequeño Michael comenzó a trabajar para el encuadernador y vendedor de libros George Riebau. El chico solamente había recibido una educación elemental en la escuela dominical de la iglesia, con la que la familia colaboraba activamente porque pertenecía a un grupo cristiano denominado *Sandemanianos* (p. 99-100).[1]

La despierta inteligencia del muchacho le llevó a interesarse por los libros que traían a la imprenta para encuadernar y reparar, al parecer, el artículo sobre electricidad que se publicó en la Enciclopedia Británica le generó una especial curiosidad. Con botellas viejas y madera replicó lo que había leído, construyendo un sencillo generador electrostático y una pila voltaica con los que repitió los experimentos que tanto le habían fascinado. Gracias a la ayuda de uno de sus hermanos mayores, en 1812 pudo asistir a las conferencias vespertinas sobre filosofía natural y química que impartía John Tatum (1772-1858), fundador de la *City Philosophical Society* y profesor en ella. Asimismo, tuvo acceso al libro *Conversations on Chemistry* de Jane Marcet,[2] que fue uno de los textos divulgativos de química más vendidos en la primera mitad del siglo XIX en Inglaterra.[3, 4]

Este texto era el que leía el numeroso público que asistía a las conferencias que impartía Humphry Davy (1778-1829) en la *Royal Institution*. Genial químico a la vez que guapo, elegante y estupendo comunicador, Davy cautivaba a todo su auditorio, incluidas las jóvenes damas de la alta sociedad inglesa que acudían en masa a sus clases.[5]

Esta entidad acababa de nacer en una reunión celebrada el 7 de marzo de 1799 en el domicilio del entonces presidente de la *Royal Society of London*, Joseph Banks. Su principal propósito era divulgar la ciencia, y el joven Michael tuvo la oportunidad de acceder a ellas cuando un cliente de la imprenta, Mr. Dance, le regaló en 1812 una entrada para el curso de conferencias de Davy. Faraday tomó notas y transcribió los contenidos sobre materia radiante, cloro, sustancias inflamables simples y metales. Envió el manuscrito encuadernado a Davy, solicitándole además un puesto de trabajo en la institu-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: I. Pellón. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 331-336, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2093

* C-e: ines.pellon@ehu.eus

Manuscrito recibido: 06/11/2025 · aceptado: 10/12/20

ción. Davy le respondió con una amable carta, y aunque esa vez no hubo suerte, cuando se produjo la vacante de uno de los auxiliares de laboratorio de la *Royal Institution* en 1812, le ofreció su puesto a Faraday. Gracias a esta oportunidad, a partir de marzo de 1813 comenzó a trabajar con uno de los mejores químicos de esa época, cuando aún no había cumplido 21 años. Durante 1814 acompañó a Davy en un viaje científico por el continente, ayudándole en sus investigaciones de forma tan satisfactoria que, cuando regresaron a Londres en 1815, obtuvo un puesto de categoría superior y su salario aumentó a 100 libras esterlinas anuales. Se le invitó a impartir un ciclo de conferencias en una sociedad filosófica privada, por lo que para mejorar su dicción realizó un curso de elocución en 1818. Gracias a su talento comenzó a publicar sus investigaciones alrededor de 1820, si bien le solicitaba a Davy que revisara todos sus artículos, al menos los anteriores a su nombramiento como miembro de la *Royal Society* en 1824 (p. 99-100).[1]

Bajo la tutela de Davy, Faraday adquirió un profundo conocimiento de la química y realizó numerosos análisis en el laboratorio, cuyas técnicas aprendió a dominar por completo. Pronto alcanzó mucha fama como experto analista, lo que le llevó a ser llamado como testigo experto en juicios y a labrarse una clientela cuyos honorarios ayudaron a financiar sus investigaciones en la *Royal Institution*.[6]

La química que estudió Faraday se estructuraba desde la perspectiva de la revolución protagonizada por Lavoisier, quien había demostrado la falsedad de la teoría del flogisto y el auténtico mecanismo de las calcinaciones y combustiones. Basándose en los resultados de sus experimentos, Lavoisier dedujo que el oxígeno era el elemento que facilitaba la combustión (suposición correcta), aunque también creyó que era el elemento fundamental de todos los ácidos (suposición incorrecta).[7]

Davy había aplicado una corriente eléctrica sobre los óxidos de sodio y de potasio y había obtenido los dos elementos puros. También aplicó la electricidad en una disolución del entonces denominado "ácido muriático" (hoy ácido clorhídrico), uno de los ácidos más fuertes conocidos. Los productos generados por su descomposición fueron hidrógeno y un gas verde que al combinarse con agua volvía a producir un ácido. Davy concluyó que este gas era un elemento, lo denominó cloro, y constató experimentalmente que no había oxígeno alguno en el ácido muriático. Por ello dedujo que la acidez no era el resultado de la presencia del oxígeno ("elemento acidificante") como proponía Lavoisier, sino que la generaba alguna otra causa, y sugirió que las propiedades químicas de las sustancias estaban determinadas no solo por los propios elementos, sino también por la forma en la que estos elementos se organizaban. Sin duda estuvo influenciado por la teoría atómica propuesta por Ruggero Giuseppe Boscovich (1711-1787), y estas ideas serían fundamentales para el desarrollo de los trabajos de Faraday sobre la electricidad.[6]

Aunque la obra más reconocida de Faraday está centrada en sus investigaciones de física y electroquímica, su trabajo puramente químico era muy preciso, interesante y riguroso. Realizó su primer análisis en 1816, cuando Davy le encargó estudiar una muestra de hidróxido de calcio que provenía de la Toscana. Con enorme tesón trabajó incansablemente en el laboratorio, de forma que en 1819 había publicado 36 artículos breves y notas en la revista *Quarterly Journal of Science*, que versaban sobre los cloruros de plata y amoníaco, y el cloruro y el yoduro de etileno. Los años siguientes investigó sobre las técnicas de licuefacción de diferentes gases como el dióxido de azufre, sulfuro de hidrógeno, dióxido de cloro, óxido nitroso, cianógeno, amoníaco y cloruro de hidrógeno entre otros, de manera que en 1824 ya había publicado importantes artículos firmados solo con su nombre, y no junto a Davy. Por ello, el farmacéutico y profesor de química Richard Phillips (1778-1851), a quien había conocido en las conferencias de Tatum y con quien colaboraba en trabajos técnicos y de consultoría, propuso en 1824 que fuera elegido miembro de la *Royal Society* de Londres (p. 104-108).[1]

En esta época investigó sobre distintas aleaciones de acero, y mientras cumplía una misión de la *Royal Society* en la que buscaba la manera de mejorar la calidad del vidrio óptico de los telescopios, fabricó un cristal que tenía un índice de refracción muy elevado, y que le conduciría al descubrimiento del diamagnetismo (en 1845).

Para facilitar la divulgación y la enseñanza de la química, a mediados de la década de 1820 Faraday inauguró en la *Royal Institution* dos iniciativas: las sesiones denominadas "Discursos de los Viernes por la Noche", y las "Conferencias de Navidad". En ambas impartió numerosas lecciones y adquirió fama de ser un magnífico orador, por lo que la sala se abarrotaba cuando él intervenía (Figura 1). Las primeras conferencias se titularon "Historia química de una vela", y enseguida se consolidó el formato habitual de una conferencia con abundantes demostraciones prácticas. Fueron publicadas en formato libro en 1861.[8]

Las "Conferencias de Navidad" se emitieron por primera vez en la BBC en 1936, convirtiéndose así en la serie de televisión científica más antigua del mundo.

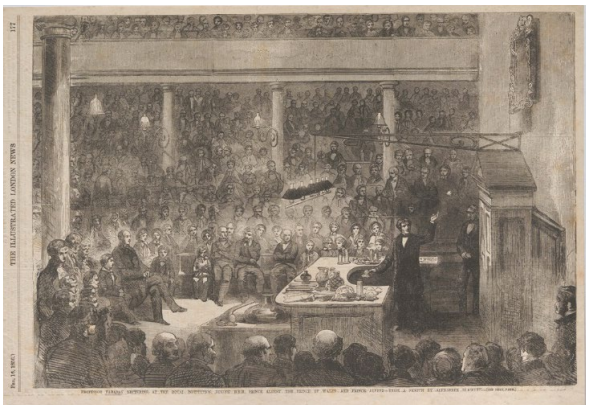


Figura 1. Los miembros de la familia real británica, el Príncipe de Gales, el Príncipe Alfredo y el Príncipe Alberto asisten a una de las "Conferencias de Navidad" en la *Royal Institution* impartida por Faraday. Reproducida de Ref. [9]. Imagen de dominio público.

En 1820, Hans Christian Ørsted anunció el descubrimiento de que el flujo de corriente eléctrica a través de un cable producía un campo magnético alrededor de este. André-Marie Ampère demostró que la fuerza magnética era aparentemente circular, produciendo un cilindro de magnetismo alrededor del cable. Nunca se había observado una fuerza circular semejante, y Faraday fue el primero en comprender su implicación. Si un polo magnético pudiera aislarse, debería moverse constantemente en círculo alrededor de un cable por el que circulaba la corriente. El ingenio y la pericia de Faraday en el laboratorio le permitieron construir un aparato que confirmó esta conclusión en 1821. Se considera que este dispositivo capaz de transformar la energía eléctrica en mecánica fue el primer motor eléctrico fabricado, y con él se iniciaron una serie de investigaciones que transformarían la comprensión de la electricidad y el magnetismo.

También en 1820 Faraday produjo los primeros compuestos conocidos de carbono y cloro sustituyendo el hidrógeno por cloro en el "gas olefítico" (actual etileno), induciendo así las primeras reacciones de sustitución.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Hombre profundamente religioso, se casó el 12 de junio de 1821 con Sarah Barnard (1800-1879), y gracias a la recomendación de Davy, se permitió que el matrimonio viviera en las dependencias de la *Royal Institution*. En 1825 y de nuevo por recomendación de Davy, fue nombrado director vitalicio del laboratorio de la institución, siendo William Thomas Brande (1788-1866) el profesor de Química (p. 99-100).[1] Qué lejos quedaban sus humildes orígenes; gracias a su esfuerzo y al incondicional apoyo de Davy había podido acceder a un elevado estatus en la sociedad británica de entonces (Figura 2).

Figura 2. Retrato de Michael Faraday realizado por el pintor Henry W. Pickersgill (1782-1875) en 1830. Especialista en retratar a la alta sociedad británica, en 1831 lo donó a la *Royal Institution*. Reproducida de Ref. [10]. Imagen de dominio público.

El aislamiento del benceno

Una vez perfectamente establecido en la comunidad científica, su actividad investigadora no decayó. Estaba muy interesado en los vapores que emanaban los aceites al calentarse, y en 1825 tuvo la oportunidad de disponer de una muestra abundante de dichos vapores, que analizó en profundidad. El fruto de su trabajo fue el aislamiento y descubrimiento de dos compuestos de carbono desconocidos hasta entonces: los que hoy denominamos benceno e isobutileno. Presentó sus resultados ante la *Royal Institution* el 16 de junio de 1825 y los publicó en el artículo titulado "On New Compounds of Carbon and Hydrogen, and on Certain Other Products Obtained during the Decomposition of Oil by Heat".[11,12]

En el inicio de su trabajo expresa que el objetivo del artículo que "tengo el honor de presentar en esta ocasión a la atención de la *Royal Society* es describir, en particular, dos nuevos compuestos de carbono e hidrógeno, y, en general, otros productos obtenidos durante la descomposición del aceite por calor" (p. 440).[11]

Faraday indica que había intentado estudiar en profundidad estos vapores desde el año 1820, pero que no había conseguido una muestra lo suficientemente abundante que le permitiera realizar todos los análisis requeridos. Gracias a la amabilidad de "Mr. Gordon", pudo disponer de "cantidades considerables de un fluido obtenido durante la compresión del gas del aceite" (p. 440).[11]

En su detallada publicación describe cómo se comprimen y extraen dichos vapores, cómo se condensan y cuál es el mejor modo de extraer el líquido resultante, que "se puede conservar fácilmente en frascos comunes con tapón, o incluso con corcho" (p. 441).[11]

Faraday realizó diferentes pruebas con dicho líquido, y comprobó que el "ácido muriático" (actual ácido clorhídrico) no reaccionaba con él, mientras que el ácido nítrico actuaba de forma gradual produciendo "ácido nitroso, óxido nítrico, ácido carbónico y, a veces, ácido cianhídrico", y que la reacción no era violenta. Y afirma: "Este fluido es una mezcla de varias sustancias que, aunque se asemejan entre sí por ser altamente combustibles y desprender mucho humo al arder en una llama grande, pueden separarse parcialmente debido a su diferencia de volatilidad" (p. 442).[11]

Se propuso entonces separar de la mejor manera posible dicha mezcla de sustancias, por lo que realizó repetidas destilaciones y cristalizaciones fraccionadas del líquido. Gracias a ellas consiguió obtener, entre otros productos, "un nuevo compuesto de carbono e hidrógeno, que puedo identificar de antemano como *bi-carburet of hydrogen*" (p. 443).[11]

Como ya había indicado anteriormente con respecto a la mezcla de vapores, conservó esta nueva sustancia en un frasco de vidrio tapado con corcho, como se puede apreciar en la Figura 3.

Figura 3. Izquierda: muestra de benceno aislada en 1825 por Faraday, y en la ampliación de la derecha, el nombre que le asignó: *Bi carburet of hydrogen*. Museo Faraday, *Royal Institution*. Reproducida de Ref. [13]. Imagen de dominio público.

En las páginas siguientes de su memoria detalla con precisión la metodología experimental que había utilizado para separar dicha sustancia del resto de compuestos de la mezcla. Explica sus características físicas y químicas: "se presenta normalmente como un líquido transparente e incoloro, con un olor similar al del gas de petróleo y con cierto aroma a almendras… no conduce la electricidad… es muy poco soluble en agua; muy soluble en aceites fijos y volátiles, en éter, alcohol, etc., precipitándose la solución alcohólica con agua. Arde con una llama brillante y mucho humo".

Realiza numerosos ensayos con ella y la mezcla con varios reactivos como cloro, iodo, potasio, disoluciones alcalinas, carbonatos, ácido nítrico y ácido sulfúrico, describiendo detalladamente lo que observa en todos los casos (p. 445-447).[11]

Para finalizar, relata las diferentes pruebas que le han llevado a descubrir cuál es su posible composición, indicando que no posee oxígeno, y que sus experimentos "tienden a demostrar que se trata de un compuesto binario de carbono e hidrógeno, donde dos proporciones del primero se unen a una del segundo" (p. 448).[11]

Es decir, supone que su fórmula empírica es, según nuestra nomenclatura actual, $\mathbf{C_2H}$, porque se basa en la tabla de pe-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

sos relativos de los átomos enunciada por su compatriota John Dalton (1766-1844), artífice de la teoría atómica química entre 1803 y 1808. Dalton fue el primero en determinar una tabla de pesos relativos de los elementos, importantísima contribución para sentar las bases de la química moderna. Según ella, el peso atómico del carbono era 6 y no 12 como sabemos hoy en día, y por eso a Faraday le salía la proporción 2:1. [14]

Faraday acaba de aislar e identificar por primera vez una sustancia única, cuyo nombre "benceno" fue acuñado posteriormente y es el que ha permanecido hasta nuestros días.

Su memoria continúa describiendo el resto de los análisis que realiza con los demás componentes del vapor condensado, y finaliza apuntando los posibles usos de dichas sustancias como gases de alumbrado y como perfectos disolventes de sustancias, como el caucho. También indica que será necesario realizar más pruebas con ellos para determinar posibles utilidades.

El espacio de trabajo de Faraday

Gracias a la acuarelista británica Harriet J. Moore (1801-1884), conocemos cómo eran la residencia y los laboratorios de Faraday. Ella provenía de una familia de la alta sociedad, siendo la mayor de los cinco hijos del matrimonio formado por Harriet Henderson (1779-1866) y el médico escocés James C. Moore (1762-1840). En la serie de ocho acuarelas que realizó a principios de la década de 1850, documentó algunas dependencias como el despacho, el comedor del segundo piso y seis de los espacios de los laboratorios del sótano, en los que dos de ellos muestran a Faraday trabajando (Figuras 4 y 5) (p. 214).[15]

Figura 4. Faraday en su laboratorio del sótano de la *Royal Institution*. Acuarela realizada en 1852 por Harriet J. Moore. Reproducida de Ref. [16]. Imagen de dominio público.

Figura 5. Otro laboratorio de Faraday en la *Royal Institution*. Acuarela realizada por Harriet J. Moore. Reproducida de Ref. [17]. Imagen de dominio público.

Harriet, el físico John Tyndall (1820-1893) y la familia Faraday tenían buenas relaciones, tal y como queda reflejado en la Figura 6.

Figura 6. De izquierda a derecha: John Tyndall, Sarah Faraday, Julia Moore (de pie), Michael Faraday y Harriet J. Moore. Reproducida de Ref. [17]. Imagen de dominio público.

El legado de Faraday

Por su reconocida valía fue nombrado asesor científico del Almirantazgo en 1829, profesor de Química en la Real Academia Militar de Woolwich en 1830 y asesor científico de la corporación denominada *Trinity House* en 1836. Creada en 1514 por una Carta Real de Enrique VIII de Inglaterra, se encarga de la construcción y mantenimiento de las ayudas imprescindibles para la navegación como faros, boyas, etc. Faraday fue quien electrificó los faros, mejorando ostensiblemente la calidad de las señales, de vital importancia para la navegación.

Faraday había abandonado su trabajo de consultor privado para dedicarse por completo a la investigación en 1831. En 1833, la *Royal Institution* creó para él la Cátedra Fulleriana de Química, otorgada de por vida. Su salario anual subió a 200 libras esterlinas, y en 1835 recibió una pensión civil de 300 libras esterlinas anuales. Continuó trabajando en los temas de electricidad y electroquímica que le han hecho universalmente conocido, así como con Charles Wheatstone en la teoría del sonido, otro fenómeno vibracional. Pero la presión que sufrió tras tantos años de agotador trabajo experimental y teórico constante fue excesiva, y en 1839 su salud se deterioró, teniendo que disminuir su dedicación. En 1845 pudo retomar el hilo de sus investigaciones, y en 1852 fue nombrado superintendente de la residencia de la *Royal Institution*. En 1857 le propusieron ser presidente de la *Royal Society*, pero declinó. Ese mismo año publicó su último artículo experimental sobre química, que tituló "The Bakerian Lecture: Experimental Relations of Gold (and Other Metals) to Light".[18] En 1858 se retiró definitivamente del trabajo científico, y vivió hasta el final de sus días en una casa en Hampton Court que le había donado la reina Victoria como reconocimiento a su extraordinaria labor.

Por lo que respecta a su obra escrita, Faraday publicó numerosos artículos y únicamente un libro, que dedicó a la enseñanza de los jóvenes estudiantes.[19] Sus artículos y apuntes de clase han sido recopilados y publicados, algunos póstumamente.[20-26]

Faraday también generó otra gran cantidad de documentación que afortunadamente se encuentra en buen estado de conservación, como sus cuadernos de laboratorio, los documentos administrativos de la *Royal Institution*, la correspondencia relativa a su trabajo para el Almirantazgo y para *Trinity House*, así como comunicaciones con diferentes personas y organizacio-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

nes. También ha sobrevivido su biblioteca, varios álbumes de recortes, un portafolio de retratos y algunos aparatos de laboratorio. Gracias a todo ello es posible realizar un acercamiento riguroso a su vida y a su obra. En particular, se puede acceder a las aproximadamente 5.000 cartas que se han conservado de él gracias a que han sido publicadas en seis volúmenes.[27-32] Se inician en el año 1811 y son valiosísimos testigos de su trayectoria vital desde los años de su juventud hasta el final de su vida en 1867. Ellas muestran cómo Faraday mantenía correspondencia tanto con sus amigos de su juventud, como con los hombres y mujeres de ciencia más importantes de la época, con anticuarios, militares, marinos, artistas y políticos del más alto nivel, como el primer ministro británico.

Los temas que trata en ellas son extraordinariamente variados y reflejan numerosos aspectos de su vida: el final de su aprendizaje como encuadernador en 1812, las vicisitudes de su nombramiento como asistente químico en la *Royal Institution*, su viaje con Davy por el continente, que le marcó profundamente, su pertenencia a la *City Philosophical Society*, su formación científica, su nombramiento como miembro de la *Royal Society*, y su ascenso dentro de la *Royal Institution* hasta llegar a convertirse en superintendente de la residencia y director del laboratorio.

Conclusiones

La figura y la obra de Michael Faraday han sido profundamente estudiadas por numerosos autores, y es fuente de inspiración de docentes de Física y Química y de instituciones científicas. Un ejemplo cercano de ello es el Boletín informativo del Grupo Especializado en Didáctica e Historia de la Física y la Química común a las Reales Sociedades Españolas de Física y de Química (GEDH / RSEF + RSEQ), que se denomina *Faraday* en honor a este genial investigador.[33]

En este artículo se conmemora el 200 aniversario de uno de sus trabajos más relevantes en el área de la química: el descubrimiento del benceno. En él se reflejan aspectos poco conocidos de su trabajo como químico, así como detalles de su vida personal que complementan su extraordinaria labor como científico. Nos sumamos así a los homenajes dedicados al bicentenario del descubrimiento del benceno por Faraday, entre los que podemos citar las interesantes reseñas publicadas por el Profesor Nazario Martín.[34, 35]

Agradecimientos

La autora de este artículo quiere agradecer sinceramente todo el apoyo y la valiosa ayuda del Profesor Nazario Martín y del Profesor Joaquín Pérez-Pariente, sin cuyos acertados comentarios este artículo nunca hubiera visto la luz.

Bibliografía

[1] J. R. Partington, *A History of Chemistry*, MacMillan & Co., London, **1964**.
[2] J. Marcet, *Conversations on Chemistry* Longman, Brown, Green & Longmans, London, **1806**.
[3] D. Knight, *Ambix*, **1986**, *33*(2/3), 94-98, https://doi.org/10.1179/amb.1986.33.2-3.94.
[4] H. Rossotti, "The woman that inspired Faraday", disponible en https://www.chemistryworld.com/features/the-woman-that-inspired-faraday/3004860.article, **2007** (consultado: 04/11/2025).
[5] G. Jeffery Leigh, A. J. Rocke, *Ambix*, **2016**, *63*(1), 28-45, https://doi.org/10.1080/00026980.2016.1186584.
[6] L. Pearce Williams, *Encyclopedia Britannica*, **2025**, disponible en https://www.britannica.com/biography/Michael-Faraday (consultado: 30/10/2025).
[7] I. Pellón, *Un químico ilustrado: Lavoisier*, Nívola, Madrid, **2002**.
[8] M. Faraday, W. Crookes (ed.), *A Course of Six Lectures on the Chemical History of a Candle*. Griffin, Bohn & Co, London, **1861**.
[9] "Professor Faraday Lecturing at the Royal Institution, before H.R.H. Prince Albert the Prince of Wales and Prince Alfred", disponible en https://sammlung.wienmuseum.at/objekt/336058-professor-faraday-lecturing-at-the-royal-institution-before-hrh-prince-albert-the-prince-of-wales-and-prince-alfred/, **1856** (consultado: 03/11/2025).
[10] The Royal Institution "Michael Faraday (1791–1867)", disponible en https://artuk.org/discover/artworks/michael-faraday-17911867-216070/search/venue:the-royal-institution-7415/page/3/view_as/grid (consultado: 29/10/2025).
[11] M. Faraday, *Phil. Trans.*, **1825**, *CXV*, 440.
[12] M. Faraday, *Annl. Chim.*, **1825**, *XXX*, 269; B, 154.
[13] Royal Institution of Great Britain, "First sample of benzene", disponible en https://www.sciencephoto.com/media/517113/view, **1825** (consultado: 29/10/2025).
[14] I. Pellón, *El hombre que pesó los átomos. Dalton*, Madrid, Nívola, **2003**.
[15] W. L. Pressly, *The Artist as Original Genius: Shakespeare's "fine Frenzy" in Late-eighteenth-century British Art,* Associated University Press, Newark, **2007**.
[16] "Michael Faraday en su laboratorio, por Harriet Moore", disponible en https://commons.wikimedia.org/wiki/File:M_Faraday_Lab_H_Moore.jpg, (consultado: 29/10/2025).
[17] Royal Institution of Great Britain, "Spotlight on Harriet Jane Moore", disponible en http://www.rigb.org/blog/2014/july/spotlight-on-harriet-jane-moore, **2014** (consultado: 29/10/2025).
[18] M. Faraday, *Phil. Trans.*, **1857**, *CXLVII*, 145-181.
[19] M. Faraday, *Chemical Manipulation, Being Instructions to Students in Chemistry*, W. Phillips, London, **1827.**
[20] M. Faraday, *Experimental Researches in Electricity, vol I,* Richard and John Edward Taylor, London, **1837**.
[21] M. Faraday, *Experimental Researches in Electricity, vol II,* Richard and John Edward Taylor, London, **1844**.
[22] M. Faraday, *Experimental Researches in Electricity, vol III*, Richard and John Edward Taylor, London, **1855**.
[23] M. Faraday, *Experimental Researches in Chemistry and Physics*, Richard Taylor and Edward Francis, London, **1859**.
[24] M. Faraday, *A Course of six lectures on the Various Forces of Matter*, (Ed.: W. Crookes), R. Griffin, London & Glasgow, **1860**.
[25] M. Faraday, *On the Various Forces in Nature*, (Ed.: W. Crookes), Chatto and Windus, London, **1873**.
[26] M. Faraday, *The liquefaction of gases*, William F. Clay, Edinburgh; Simpink, Marshall, Hamilton, Kent, London, **1896**.
[27] F. A. J. L. James (ed.), *The Correspondence of Michael Faraday, vol. 1: 1811-1831*, The Institution of Electrical Engineers, London, **1991**.
[28] F. A. J. L. James (ed.), *The Correspondence of Michael Faraday, vol. 2: 1832-1840*, The Institution of Electrical Engineers, London, **1993**.
[29] F. A. J. L. James (ed.), *The Correspondence of Michael Faraday, vol. 3: 1841-1848*, The Institution of Electrical Engineers, London, **1996**.
[30] F. A. J. L. James (ed.), *The Correspondence of Michael Faraday, vol. 4: 1849-1855*, The Institution of Electrical Engineers, London, **1999**.
[31] F. A. J. L. James (ed.), *The Correspondence of Michael Faraday, vol. 5: 1855-1860*, The Institution of Engineering and Tecnology, London, **2008**.
[32] F. A. J. L. James (ed.), *The Correspondence of Michael Faraday, vol. 6: 1860-1867*, The Institution of Engineering and Tecnology, London, **2011**.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

[33] *Faraday: Bol. Fís. Quím* **2007-** , disponible en https://gedh.rseq.org/boletin/, (consultado: 04/11/2025).
[34] N. Martin, "Benzene at 200", disponible en https://www.chemistryworld.com/opinion/benzene-at-200/4021504.article, 16 jun. **2025** (consultado: 04/10/2025).
[35] N. Martin, *El País* 22 jul. **2025**, disponible en https://elpais.com/ciencia/2025-07-22/benceno-200-anos-de-la-molecula-que-dio-forma-al-siglo-xxi.html, (consultado: 04/10/2025).
[36] "Michael Faraday in his Basement Laboratory, 1852. Harriet Jane Moore", disponible en https://www.meisterdrucke.ie/fine-art-prints/Harriet-Jane-Moore/234978/Michael-Faraday-in-his-Basement-Laboratory,-1852.html, **1852** (consultado: 30/11/2025).

Inés Pellón González
Universidad del País Vasco (UPV/EHU)
GEHCi - RSEQ
C-e: ines.pellon@ehu.eus
ORCID: 0000-0002-2560-6565

Inés Pellón González es licenciada y doctora en Ciencias Químicas por la Universidad del País Vasco (UPV/EHU), donde imparte docencia. Especialista en Historia de la Química, ha publicado numerosos libros, artículos y capítulos de libros, y ha participado en Congresos nacionales e internacionales. Actualmente es la presidenta del Grupo especializado en Historia de la Ciencia de la Real Sociedad Española de Química (GEHCi-RSEQ), y secretaria general de la Real Sociedad Bascongada de los Amigos del País (RSBAP).

Detalle de un anuncio publicitario de material didáctico de Física (1914) de Tallada Llofriu y C.ia, casa comercial fundada en 1860.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 337-341
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2033

La revista de la Real Sociedad Española de Química

HISTORIA DE LA QUÍMICA

Producción de carbón vegetal y de diamantes en Extremadura (España)

Wood charcoal and diamonds production in Extremadura (Spain)

José Pastor Villegas[1], Jesús F. Pastor Valle[2,*]

[1] *Universidad de Extremadura, Catedrático de Escuelas Universitarias, área de Química Inorgánica, jubilado.*

[2] *Ingeniero Industrial.*

PALABRAS CLAVE:
Madera de encina
Carbón vegetal
Metalurgia
Diamantes sintéticos
Deposición química de vapor

RESUMEN:
El carbón vegetal artesanal, primer material de carbono sintético, ha contribuido significativamente al progreso desde la Prehistoria. En esa época comenzó su uso como combustible y reductor metalúrgico; hoy es combustible habitual para barbacoas y parrillas en muchos países. A finales del siglo XVIII, florecida la Química, se reconocieron que el diamante y el grafito eran alótropos del carbono, pero hasta 1955 no se anunció la primera síntesis de diamantes. En Extremadura (España), se produce hoy carbón con tendencia industrial, principalmente a partir de madera de encina. Además, se construye en Trujillo la primera fábrica europea de diamantes de grado semiconductor por CVD asistida por plasma. Ambos materiales tienen origen solar remoto.

KEYWORDS:
Holm oak wood
Wood charcoal
Metallurgy
Synthetic diamonds
Chemical vapor deposition

ABSTRACT:
Artisanal charcoal, the first synthetic carbon material, has contributed significantly to progress since Prehistory. At that time its use as fuel and metallurgical reducer began; today it is common fuel for barbecues and grills in many countries. At the end of the 18th century when Chemistry flourished, it was recognized that diamond and graphite were allotropes of carbon, but the first synthesis of diamonds was not announced until 1955. In Extremadura (Spain), charcoal is produced today for industrial purposes, mainly from holm oak wood. In addition, the first European factory for semiconductor grade diamonds using plasma-assisted CVD is being built in Trujillo. Both materials have a remote solar origin.

Introducción

En la Prehistoria (Paleolítico), los primeros materiales del ser humano eran universales (piedras, maderas, huesos y pieles), de fácil tratamiento (afilar, cincelar, cortar y desmenuzar).[1] En África oriental, se usaron materiales de piedra hace cuatro millones de años.[2] Hace más de 10 000 años, todas las sociedades los usaban.[3] Hoy los materiales son numerosos, entre ellos los de carbono.

El elemento carbono (C) es el más próximo al ser humano;[4] "*el primer elemento químico* [carbón vegetal y negro de humo] conocido y utilizado".[5] Hoy es conocido que los materiales de C tienen estructuras más o menos ordenadas que determinan sus propiedades y aplicaciones.

El profesor Stach Mrozowski organizó la Primera conferencia sobre el Carbón, en la Universidad de Buffalo, noviembre de 1953. La revista *Carbon* se inició once años después, con él como primer editor-jefe, y surgieron la American Carbon Society de Estados Unidos de América en 1957 y otras sociedades científicas y tecnológicas.[6] El Grupo Español del Carbón (GEC) nació en Zaragoza el 9 de octubre de 1990.

Sintiendo la necesidad de mejorar la producción del carbón vegetal en Extremadura (España) y sus potencialidades, hemos investigado. Parte de nuestras investigaciones han sido aportadas al Grupo de Adsorción de la RSEQ y al GEC.

Aquí tratamos del carbón vegetal (Cv), producido y usado desde la conquista y socialización del fuego, hito prehistórico. Los incendios forestales anteriores al ser humano produjeron Cv fósil,[9] del que no tratamos. Tratamos también de los diamantes sintéticos, materiales de carbono muy actuales, que se comienzan a fabricar en Trujillo (Cáceres).

Carbonización de la biomasa lignocelulósica

La Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC, en inglés) define la carbonización. El sólido resultante de este proceso térmico se llama carbonizado;[7,8] el Cv es el carbonizado de la biomasa lignocelulósica (madera, huesos de fruta, etc.) y el coque resulta de la hulla bituminosa.

La carbonización de la biomasa lignocelulósica ha sido un arte durante mucho tiempo; es un proceso complejo que da tres productos, dos fluidos y uno sólido que no ha pasado por

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: J.P. Pastor Villegas, J.F. Pastor Valle. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 337-341, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2033

* C-e: josepastorvillegas@gmail.com

Manuscrito recibido: 28/04/2025 · aceptado: 10/10/2025

ningún estado fluido: Biomasa lignocelulósica → Productos incondensables(g) + Piroleñoso total(l) + Cv(s).

Gaius Plinius Secundus, el Viejo, naturalista romano del siglo I, ya aporta usos de estas fracciones; el carbón de encina, producido en fosa, en fraguas; la fase acuosa del piroleñoso total para embalsamar cadáveres humanos en Egipto y otros usos conservantes, y la fase alquitrán en el calafateo de navíos y otros usos de impregnación.[10]

Estas fracciones se pueden observar y medir en el laboratorio.[11] Si se carboniza madera de jara (*Cistus ladaniferus*, L.), el olor recordará a las tahonas.

Un hecho que demuestra la antigüedad del Cv tiene relación con la francesa Cueva Chauvet. En su suelo se encontró abundante carbón y en una pared magníficos dibujos al carboncillo de hace más de 38000 años. Sin embargo, hasta 1852-1932 no comenzó a comprenderse la ciencia subyacente al arte productivo durante los 38 milenios anteriores.[12]

El material de partida, condiciones del proceso (atmósfera, velocidad de calentamiento, temperatura final y tiempo de calentamiento a la temperatura final) y catálisis afectan profundamente a la secuencia y cinética de las reacciones y últimamente al rendimiento de los productos.[13]

El Cv se produce principalmente a partir de madera (composición elemental aproximada en base seca: 50% C, 6% H y 44% O).[14] Por encima de 100 °C ya se degrada; las hemicelulosas a 200-260 °C; la celulosa a 240-350 °C; y la lignina a 280-500 °C.[15] El comportamiento térmico depende de su naturaleza, humedad y condiciones experimentales.[16]

La madera carboniza a temperatura relativamente baja, lo que explica que el Cv sea universal y prehistórico. Posiblemente, la motivación de su producción prehistórica fue la observación de que en las cenizas del fuego de diferentes leñas quedaba un residuo negro que tiznaba, y que ardía después sin llama y daba más calor que la madera.[17]

Con el paso del tiempo, la composición y las estructuras (química y porosa) del Cv se han conocido mejor.[18]

En todo el mundo, la producción de Cv persiste, con uso principal doméstico (cocina y calefacción) en los países en desarrollo, y con uso industrial en otros; Brasil fue el primer productor en 2020, con más de $6 \cdot 10^9$ kg.[19]

En Extremadura, se ha carbonizado desde tiempo muy remoto. En el yacimiento arqueológico de Los Barruecos (Malpartida de Cáceres, Cáceres, España) se encontró Cv producido en una fosa en el tránsito del VI al V milenio a. C.[20]

Referente al Cv fabricado para uso doméstico, revisamos los sistemas productivos, que clasificamos en artesanales (discontinuos) e industriales (continuos). En los primeros (fosas, carboneras, hornos de albañilería y hornos metálicos) el calor lo aporta la combustión parcial de la materia prima. En los segundos es por calefacción externa o por contacto con los gases calientes del proceso. El carbono fijo del carbón de horno continuo (~90%) supera en un 20% al de carbonera y en menor porcentaje al de hornos discontinuos.[18,21]

Hoy, la biomasa forestal abunda en Extremadura (68% de la superficie total) y su carbonización está incentivada desde 2018.[22] En nuestra opinión, la producción de Cv tiende a un mejor rendimiento, bajas emisiones y mejor calidad para uso como combustible doméstico regional, nacional e internacional en barbacoas y parrillas. Y puede tener otros usos.

La Figura 1 muestra un horno de ladrillos-metálico (3 × 3 × 3 m). En sus paredes internas hay carbón secundario producido a partir del alquitrán. Tal carbón se deposita también en la estructura porosa del Cv, hecho no deseable, sobre todo con miras a una potencial producción de adsorbentes.[23]

Figura 1. Vistas exterior e interior de un horno artesanal en una dehesa de La Aldea del Obispo (Cáceres), con carbón de encina.

El carbón vegetal en la metalurgia de los primeros metales y en el florecimiento de la Química

El primer uso del Cv (combustible y reductor) fue en la metalurgia,[7,8] arte milenario. Hoy, la composición y estructuras química y porosa del Cv justifican su uso metalúrgico.[18,23]

Los no metales C (Cv y negro de humo) y S, y los metales Fe, Cu, Ag, Sn, Au, Hg y Pb se conocieron siglos a. C.[24] El estado natural de estos metales se resume en la Tabla 1.

Tabla 1. Estado natural de los primeros metales.

Metal	Estado natural
Fe	Óxidos y carbonatos: hematita, Fe_2O_3; magnetita, Fe_3O_4; limonita, FeO(OH); siderita, $FeCO_3$.
Cu	Nativo. Óxidos y carbonatos: cuprita, Cu_2O; tenorita, CuO; malaquita, $CuCO_3 \cdot Cu(OH)_2$; azurita, $2CuCO_3 \cdot Cu(OH)_2$. Sulfuros: calcopirita, $CuFeS_2$; bornita, Cu_5FeS_4; calcosina, Cu_2S; covelina, CuS; enargita, Cu_3AsS_4. Sulfatos: calcantita, $CuSO_4 \cdot 5H_2O$. Halogenuros: atacamita, $Cu_2Cl(OH)_3$. Silicatos: crisocola, $(Cu,Al)_4H_4(OH)_8Si_4O_{10} \cdot nH_2O$.
Ag	Nativa, mezclada con Au. Sulfuros: argentita, Ag_2S, con otros (Cu, Zn, Sb, Pb). Haluros: clorargirita, AgCl; otros (AgBr y AgI).
Sn	Óxidos: casiterita (depósitos de aluvión y vetas estanníferas), SnO_2.
Au	Nativo en arenas y filones auríferos. Telururos: silvanita, $(AgAu)Te_2$; calaverita, $AuTe_2$.
Hg	Nativo a veces en rocas. Sulfuros: cinabrio, HgS.
Pb	Sulfuros y sulfatos: galena, PbS, con otros sulfuros (Cu, As, Ag, Sn, Bi); anglesita, $PbSO_4$. Carbonatos: cerusita, $PbCO_3$.

Fuente: Elaboración propia, vistas las Refs. [5], [24], [25].

Consultada una amplia bibliografía,[1,5,10,24-30] intentamos responder primero dónde, cuándo, con quiénes, para qué y cómo evolucionó el arte metalúrgico en el Viejo Mundo.

Tal vez el inicio del arte metalúrgico fue en la región montañosa desde Anatolia a Afganistán, a través de Armenia, en el Neolítico. Se expandió al oeste; los primeros objetos de la Europa convencional son de cerca del 2000 a. C. Según las propiedades de los metales, se hicieron joyas, útiles y armas. Están establecidas tres etapas cronológicas.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

1. Primera etapa: metales nativos

Los metales nativos y el hierro meteórico (aleación de Fe y Ni) se conocieron pronto, tenidos por separación física. No se conocen objetos de Au anteriores al quinto milenio a. C.

2. Segunda etapa: producción de metales no férreos

La cronología de los procesos generales de producción fue:

- Conformado y recocido del Cu nativo (5000-4000 a. C.).
- Reducción de menas oxidadas (4000-3000 a. C.).
- Tostación de menas sulfuradas (3000-2000 a. C.).
- Copelación, carburación y temple (2000-1000 a. C.).
- Licuefacción y amalgamación (1000 a. C.- 0).

Así pues, estos procesos se descubrieron en la Prehistoria (Neolítico) y primeros tiempos históricos (Edad Antigua).

Iniciado el siglo XX, se aceptó una Edad del Cobre o Calcolítico, de transición (evolución sin ruptura) de la Edad de Piedra (Neolítico) a la Edad de Bronce; fue breve (500-2000 años), con cinco fases probables de producción:

- Conformado de Cu nativo sin calor.
- Recocido de Cu al fuego, accidental o intencionado.
- Fusión de menas de óxidos y carbonatos de Cu.
- Fusión y afino del Cu producido.
- Producción de Cu por fusión de menas sulfuradas.

Los primeros productos reducidos eran esponjosos, con escorias y cenizas. El Cu líquido total se lograba en crisoles, con el subsiguiente moldeo. Los cambios coloreados debieron impactar, por ejemplo, de la malaquita: $CuCO_3(s) \rightarrow CuO(s) + CO_2(g)$ y $2CuO(s) + C(Cv) \rightarrow 2Cu(s) + CO_2(g)$.

Más difícil fue producir Cu a partir de sus menas sulfuradas; la tostación volatilizaba impurezas (As, Sb y mucho S) como óxidos; la fusión de la mena tostada daba la mata (sulfuros de Fe y Cu); por fusión oxidante el Fe escorificaba; y la fusión reductora con Cv daba Cu impuro, purificable por oxidación.

La Edad del Bronce (aleación de Cu y Sn) se inició en Egipto y Asia Occidental hacia el 3500 a. C., y en el sureste de Europa hacia el 2000 a. C. Antes de la fusión de Cu y Sn, fue probable la de Cu crudo con casiterita y Cv. El Sn fue clave para lograr el producto (armas, estatuas, etc.) y salir de la Edad de Piedra. Su reducción se remonta al 3000 a. C.: $SnO_2(s) + 2C(Cv) \rightarrow Sn(s) + 2CO(g)$. Con la mena hubo comercio de las islas británicas y Galicia a Oriente Medio.

El Pb y la Ag se produjeron hacia el 3000 a. C en Asia Menor. La galena (conteniendo Ag), mezclada con Cv o en capas alternas, se tostaba parcialmente: $2PbS(s) + 3O_2(g) \rightarrow 2PbO(s) + 2SO_2(g)$, $PbS(s) + 2O_2(g) \rightarrow PbSO_4(s)$. Con más Cv, el óxido (litargirio) se reducía por el C, y el sulfuro residual reducía también dando Pb(l): $2PbO(s) + PbS(s) \rightarrow 3Pb(l) + SO_2(g)$, $PbSO_4(s) + PbS(s) \rightarrow 2Pb(l) + 2SO_2(g)$. Si el producto se fundía y oxidaba con aire, se volatilizaba PbO, dejando la Ag como residuo. La copelación se aplicó pronto en la metalurgia de la Ag y para separar Au y Ag.

Por tostación del cinabrio resultó mercurio líquido: $HgS(s) + O_2(g) \rightarrow Hg(l) + SO_2(g)$. En Almadén (España), se produjo pronto; los romanos amalgamaron Au, pero no Ag.

3. Tercera etapa: Edad del Hierro

En Mesopotamia, se conoció el Fe meteórico. Sin embargo, la Edad del Hierro se inició del 1200 al 550 a. C. Con ella comenzó la revolución más importante de la Humanidad, primero en Anatolia y Siria en el 1200 a. C., y en el 800 a. C extendida a Asia, Persia, India, Egipto, Creta, Grecia, Italia y Europa. En el 1000 a. C. se inició en la Península Ibérica.

La siderurgia fue más compleja; requirió más calor y un fundente adecuado para fijar las impurezas de la mena (ganga). En los hornos primitivos se alternaban capas de mineral con otras de Cv, insuflándose aire mediante tiro natural o fuelles accionados con las manos o los pies. Las ferrerías, de origen medieval, funcionaron en Occidente hasta finales del siglo XIX. Y con los altos hornos se llegó al Fe fundido (1538 °C), llamado arrabio o hierro colado: $Fe_2O_3(s) + CO(g) \rightarrow 2Fe(l) + 3CO_2(g)$. A finales del siglo XVIII, se supo que C del Cv podía pasar al producto: Fe dulce (no contiene C), aceros (0,25-1,25% C) y fundición (2,5-3,25% C). Los procesos carburación, temple y revenido fueron claves, en particular para lograr el acero, la aleación más universal aún vigente.

Pruebas satisfactorias realizadas por Abraham Darby en Coalbrookdale (Inglaterra) en 1709 iniciaron el tránsito al uso del coque, que fue clave para la Revolución Industrial (1750-1830), primero en Inglaterra, pronto en Francia y en Alemania, y en el siglo XIX en otros países.

En el Nuevo Mundo, el desarrollo del arte metalúrgico fue diferente.[31] En el mundo mexica, se moldearon metales por el método de la cera perdida, con moldes hechos mezclando arcilla y Cv muy molido; el Fe y el Hg no se producían, y la pólvora negra no se conocía cuando la Expedición de Hernán Cortés (1519 -1521).[32] Mediado el siglo XVI, el español Bartolomé de Medina descubrió el método de amalgamación en patio, en la Pachuca virreinal (actual estado de Hidalgo). Tal método y *El Arte de los Metales* (1640),[33] son legados de España e Hispanoamérica a la metalurgia universal.[34]

Añadimos que el Cv lo usó el funcionario y químico universal Antoine Laurent Lavoisier en sus investigaciones de 1772 y 1773-1789.[35] Al desmontar la teoría del flogisto, observó que la pérdida de masa al calentar la cal de mercurio (HgO) para dar aire fijo ($CO_2(g)$) era igual que al calentar la cal y Cv.[36] Su *Traité élémentaire de Chimie*,[37] fundamental para el florecimiento de la Química, se publicó en 1789, describiendo la producción de Cv mediante carbonera.

Fabricación de diamantes hoy en Extremadura

La IUPAC ha definido los alótropos del C, reticulares (minerales diamante y grafito) y moleculares (fullereno y otros).[8] Sus estructuras, propiedades y usos son bien conocidos.

En 1772, el mencionado Lavoisier quemó un diamante y demostró la formación de $CO_2(g)$.[24] Y en 1797, el químico inglés Smithson Tennant demostró que era todo "*charcoal*",[38] es decir, C.

Estos experimentos estimularon la investigación de la transformación del grafito en diamante. Considerando las condiciones geológicas de formación de diamantes, la General Electric Company de Estados Unidos de América comunicó la primera síntesis comercial en 1955, lograda a alta presión y a alta temperatura (HPHT).[39] Y la investigación siguió.

Los métodos *chemical vapour deposition* (CVD), en español deposición química de vapor, permiten depositar elementos químicos, entre ellos C, y compuestos inorgánicos (óxidos, nitruros, sulfuros, etcétera).[40]

La empresa Diamond Foundry Europe, SL, construye la primera fábrica de diamantes de Europa en Trujillo (Cáceres). Según su proyecto industrial, se producirán obleas de diamantes de grado semiconductor por CVD asistida por plasma, método que permite recubrimientos uniformes.[41]

El esquema (Figura 2) ahorra descripciones más prolijas; muestra que el Cv y los diamantes sintéticos tienen un origen so-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

lar remoto. En reactores de plasma, el C del metano cristalizará en obleas de diamante. La fábrica se alimentará de una planta solar fotovoltaica con una potencia total de 120 MW hibridada con un sistema de baterías de hasta 60 MW para conseguir la alta temperatura.

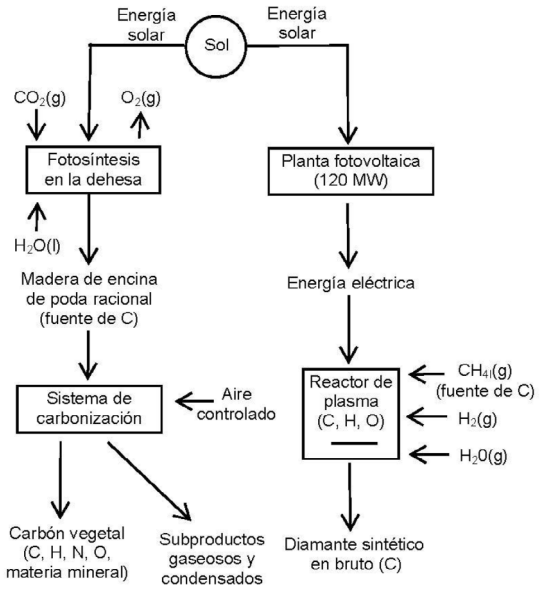


Figura 2. Esquema del origen solar y fabricaciones del carbón vegetal y diamantes.

Conclusiones

1. El carbón vegetal artesanal fue el primer material de carbono sintético; contribuyó significativamente, como combustible y reductor metalúrgico de Cu, Sn, Pb y Fe, al progreso humano desde la Prehistoria.
2. En Extremadura, la fabricación de carbón vegetal en el siglo XXI tiende a ser más industrial que artesanal, para uso principal como combustible en barbacoas y parrillas. Además, es un hito la construcción en Trujillo (Cáceres) de la primera fábrica de Europa de diamantes por CVD asistida por plasma, de grado semiconductor.
3. El carbón vegetal y los diamantes sintéticos fabricados en Extremadura tienen origen solar remoto.

Bibliografía

[1] A. Asimov, *Introducción a la Ciencia*, Plaza&Janes, Espluges de Llobregat (Barcelona), **1982**.

[2] M. Á. Aledo (ed.), *Inventos que cambiaron el mundo*, Selecciones del Reader´s Digest, Madrid,**1982**.

[3] N. Toth, D. Clark, G. Ligabue, *Investigación y Ciencia*, **1992**, *192*, 6-11.

[4] N. Martín León, *An. Quim.* **2019**,*115*, 68-69.

[5] F. Á. Calvo, en *Curso de conferencias sobre Historia de la Química* (Ed.: F. Calvo Calvo), Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Madrid, **1981**, 41-84.

[6] H. Marsh, en *Introduction to carbon technologies* (Eds.: H. Marsh, E. Heintz, F. Rodríguez-Reinoso), Universidad de Alicante, Alicante, **1997**, 1-34.

[7] F. Rodriguez-Reinoso, *Carbon*, **1989**, *27*, 305-312, https://doi.org/10.1016/0008-6223(89)90140-1.

[8] E. Fitzer, K.H. Köchling, H.P. Boehm, H. Marsh, *Pure Appl. Chem.* **1995**, *67*, 473-506, https://doi.org/10.1351/pac199567030473.

[9] T. P. Jones, W. G. Chaloner, *Mundo científico* **1991**, *119*, 1160-1168.

[10] C. Plinio Segundo, *Historia Natural de Cayo Plinio Segundo*, Visor, Madrid, **1999**.

[11] A. Macías, J. Macías, J. Pastor, *Apuntes de educación* **1988**, *31*, 7-9.

[12] M. J. Antal, M. Grønli, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2003**, *42*, 1619-1640, https://doi.org/10.1021/ie0207919.

[13] F. Shafizadesh, en *Fundamentals of thermochemical biomass conversión* (Eds.: R. P. Overend, T. A. Milne, L. K. Mudge), Elsevier, Londres, **1985**, pp. 183-217.

[14] *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*, *vol. 24* (Eds.: M. Grayson, Eckroth), Wiley, Nueva York, **1984**, pp. 579-611.

[15] E. Sjöström, *Wood Chemistry*, Academic Press, San Diego, **1993**, pp. 234-236.

[16] C. Valenzuela Calahorro, *Introducción a la Química Inorgánica*, McGraw-Hill, Madrid, **1999**, pp. 687-690.

[17] R. E. Kirk, D. F. Othmer, *Enciclopedia de tecnología química*, UTHA, México, **1961**, *vol. 10*.

[18] J. F. Pastor Valle, *Fabricación de materiales carbonosos en Extremadura, calidad y comercialización*, Escuela de Ingenierías industriales, Badajoz, **2000**.

[19] N. Carrillo, A. Hernández Hernández, B. P. Castellano-Pontiano, *C-3 Bioeconomy* **2021**, *2*, 55-68, https://doi.org/10.21071/c3b.vi2.13527.

[20] J. Pastor Villegas, J. F. Pastor Valle, M. García García en *Los Barruecos: Primeros Resultados* (Eds.: E. Cerrillo Cuenca), *MArqEx*, **2006**, *6*, 103-110.

[21] M. Á. Elena Roselló, J. Pastor Villegas, en *Actas de la VI Reunión del Grupo Español del Carbón* (Eds.: J. Pastor Villegas, C. J. Durán Valle), UEx, Mérida, **2001**, pp. 19-21.

[22] Decreto 160/2018, de 2 de octubre, por el que se establecen las bases reguladoras para el régimen de concesión de subvenciones para actuaciones relacionadas con la fabricación de biocombustibles sólidos a partir de la biomasa en Extremadura, *DOE* 8 oct. **2018,** (196), disponible en https://doe.juntaex.es/pdfs/doe/2018/1960o/18040185.pdf (consultado: 03/12/2025).

[23] J. Pastor Villegas, J. F. Pastor Valle, J. Meneses Rodríguez, M. García García, *J. Anal. Appl. Pyrolysis*, **2006**, *76*, 103-108, https://doi.org/10.1016/j.jaap.2005.08.002.

[24] J. A. Babor, J. Ibarz Aznárez, *Química General Moderna*, Marín, Barcelona, **1964**.

[25] R. J. Forbes, *Metallurgy in Antiquity*, Brill, Leiden,**1950**.

[26] C. Stanley Smith, en *Historia de la Tecnología. La técnica en Occidente de la Prehistoria a 1900* (Eds.: M. Kranzberg, C. W Pursell), Gustavo Gili, Barcelona, **1981**, pp. 162-188.

[27] F. R. Morral, E. Jimeno, P. Mollera, *Metalurgia General*, *vol. 1*, Reverté, Barcelona, **1982**.

[28] O. Puche Riart, L. F. Mazadiego, M. Martín Díez, *Bol. Geol. Min.* **1996**, *107*, 90-100.

[29] M. Ayarzagüena Sanz, O. Puche Riart, *Bol. Geol. Min.* **2012**, *123*, 157-171.

[30] J. Pastor Villegas, J. F. Pastor Valle, *An. Quím*, **2021**, *117*, 62-70.

[31] M. León-Portilla, J. Gurría Lacroix, R. Moreno, E. Madero Bracho, *La minería en México*, UNAM, México, **1978**.

[32] J. Pastor Villegas, J. F. Pastor Valle, *An. Quím. RSEQ* **2023**, *119*, 32-41, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.1861.

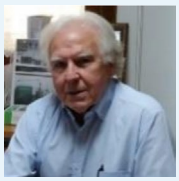
[33] Á. Alonso Barba, *Arte de los metales*, Imprenta del Reyno, Madrid, **1640**.

[34] M. Bargalló, *La minería y la metalurgia en la América española durante la época colonial*, Fondo de Cultura Económica, México, **1955**.

[35] I. Pellón González, *Un químico ilustrado Lavoisier*, Nivola, Madrid, **2002**.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

[36] M. Martín Sánchez, M. T. Martín Sánchez, *An. Quím.* **1999**, *1*, 52-53.
[37] A. L. Lavoisier, *Traité élémentaire de Chimie, présenté dans un ordre nouveau et d´après; avec les découverts modernes; avec figures*, Chez Cuchet, París, **1789**.
[38] S. Tennant, *Philos. Trans. R. Soc. London* **1797**, *87*, 123-127, https://doi.org/10.1098/rstl.1797.0005.
[39] W. Zhu, S. Jin, J. Pickrell, en *Introduction to carbon technologies* (Eds.: H. Marsh, E. Heintz, F. Rodríguez-Reinoso), Universidad de Alicante, Alicante, **1997**, 211-268.
[40] F. Ojeda, F. J. Martí, J. M. Albella, *Bol. Soc. Esp. Ceram. Vidrio*, **1998**, *37*, 447-453.
[41] Decreto 165/2022, de 30 de diciembre, por el que se declara Proyecto Empresarial de Interés Autonómico al proyecto presentado por la empresa Diamond Foundry Europe, SL, para la construcción de una fábrica de diamantes sintéticos en la localidad de Trujillo (Cáceres), *DOE* 10 ene. **2023**, (6), disponible en https://doe.juntaex.es/pdfs/doe/2023/60o/23040003.pdf (consultado: 03/12/2025).



José Pastor Villegas
Universidad de Extremadura, jubilado
C-e: josepastorvillegas@gmail.com

Formación inicial: Maestro Enseñanza Primaria (1963), Licenciado (1973) y Doctor en Ciencias (Químicas) por la UEx (1990).
Docencia: Primaria, Secundaria, UEx (E. U. Profesorado y E. U. Ingenieros Obras Públicas): No Numerario (1974-1981), Agregado Física y Química (1981-1993), Catedrático E. U. Química Inorgánica (1993-2008) y UEx (Mayores): Profesor de Química (1999-2011).
Investigación y publicaciones diversas: Didáctica científico-tecnológica, Historia de la Ciencia y la Tecnología, y Materiales de carbono.

Jesús F. Pastor Valle
Ingeniero Industrial
C-e: jesusf@hotmail.com

Formación inicial: Ingeniero Industrial por la Escuela de Ingenierías Industriales de Badajoz (Universidad de Extremadura, 2000).
Actividad profesional: Ingeniería industrial y docencia universitaria.
Investigación y publicaciones diversas: Materiales de carbono e Historia de la Ciencia y la Tecnología; dos artículos nuestros publicados en *Anales de Química* merecieron el Premio "Salvador Senent" (8ª edición).

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ

An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 342-351
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2040

La revista de la Real Sociedad Española de Química

HISTORIA DE LA QUÍMICA

Las cuatro primeras décadas del Instituto Nacional del Carbón (INCAR) del CSIC (1946-1984)

The first four decades of the National Coal Institute (INCAR) of CSIC (1946-1984)

Juan M. D. Tascón

Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono, INCAR-CSIC.

PALABRAS CLAVE:
Combustibles sólidos
Coquización
Hulla
Investigación

RESUMEN:
Este artículo resume la evolución histórica y la producción científica entre 1946 y 1984 del Instituto Nacional del Carbón (INCAR), centro perteneciente al Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). Tras una breve información sobre las primeras incorporaciones de personal, se presenta la construcción del edificio principal y de una planta semiindustrial para coquización. El centro publicó, entre 1952 y 1963, el *Boletín Informativo del INCAR*, y, entre 1971 y 1982, las denominadas *Publicaciones INCAR*. Se revisa la evolución con el tiempo de las diferentes líneas de investigación a la vista de los diferentes artículos publicados en dichas revistas. También se examina la evolución de las entidades que constituyeron el centro a lo largo del período considerado. Por último, se presentan brevemente algunos proyectos fallidos y la implementación de nuevas instalaciones.

KEYWORDS:
Bituminous coal
Coking
Research
Solid fuels

ABSTRACT:
This article summarizes the historical evolution and scientific production of the National Coal Institute (INCAR), a center belonging to the Spanish Council for Scientific Research (CSIC), between 1946 and 1984. After a brief account of the initial staff additions, the construction of the main building and a semi-industrial coking plant is presented. The center published the INCAR Newsletter between 1952 and 1963, and the so-called INCAR Publications between 1971 and 1982. The evolution of the different lines of research over time is reviewed in light of the various articles published. The evolution of the entities that constituted the center throughout the period considered is also examined. Finally, some failed projects and the implementation of new facilities are briefly presented.

Introducción. Planteamiento de las líneas de trabajo iniciales del INCAR

El INCAR, centro de investigación del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), fue fundado en 1946 en el marco del Instituto del Combustible, perteneciente a su vez a la división tecnológica del CSIC, el denominado Patronato "Juan de la Cierva" (PJC). Este centro precursor del INCAR, creado en 1940 y reorganizado en 1946 con el nombre de Instituto Nacional del Combustible, ha sido descrito en dos trabajos anteriores.[1,2]

En 1945, la denominada Comisión Técnica Especializada (CTE) de Combustibles emite un pormenorizado informe para el PJC,[3] que recomendaba, para los combustibles sólidos, la creación de un nuevo centro, para el que proponía el nombre de *Instituto Nacional del Carbón*. Además de laboratorios se consideraba imprescindible equiparlo con instalaciones a escala al menos de planta piloto, para poder obtener resultados relevantes para las actividades industriales de *lavado*, *mezclas*, *aglomeración* y *coquización* del carbón. De este planteamiento derivaron muchas de las actividades que desarrollaría inicialmente el INCAR en lo relativo a preparación de carbón, mezclas de carbones para coque y especialmente coquización. Sin embargo, veremos que, en cuanto a la aglomeración o la preparación de mezclas para vapor, no se llegaron a cumplir las propuestas de la Comisión, quizá excesivamente ambiciosas.

El INCAR ha tenido varios cambios de nombre a lo largo de su historia (concretamente en 1965, 1972, 1993 y 2020), denominándose Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono desde 2020. No hay que confundir su nombre inicial con el del antiguo *Instituto del Carbón* de la Universidad de Oviedo,[4] que había existido entre 1927 y 1933. En vista de la variedad de nombres, en este artículo hemos recurrido en todo momento al acrónimo INCAR, que ha sido empleado prácticamente sin modificación durante toda su existencia.

Este trabajo resume y destaca los hechos principales descritos en dos artículos previos del mismo autor y dedicados a la producción científica del INCAR,[5] y su organización y estructura,[6] aspectos todos ellos limitados al período 1946-1984, que representa aproximadamente la primera mitad de la vida del centro transcurrida hasta la fecha de redacción del presente trabajo. En el año 2000, Gómez Herrera publicó un artículo que análogamente evoca la historia de las primeras décadas

CÓMO CITAR: J.M.D. Tascón. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 342-351, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2040

* C-e: tascon@incar.csic.es

Manuscrito recibido: 07/06/2025 · aceptado: 02/12/2025

© 2025 Real Sociedad Española de Química

de un centro también perteneciente al PJC del CSIC,[7] el Instituto de la Grasa y sus Derivados, desde su fundación en 1947 hasta 1977, fecha a partir de la cual se inició una nueva etapa con importantes transformaciones en aquel Instituto; también el INCAR experimentaría cambios importantes a partir de 1984, fecha de cierre del presente artículo.

Medios humanos. Las primeras incorporaciones de personal

El primer director del INCAR fue Francisco Pintado Fe (Madrid, 1914 – Oviedo, 1971) (Figura. 1). Tras terminar sus estudios de ingeniería de Minas en 1940, pasó a trabajar en la Sociedad Metalúrgica Duro-Felguera y en la Dirección Técnica del Instituto Nacional de Industria (INI) en Madrid, siendo nombrado director del INCAR en 1947. En 1965 es nombrado catedrático de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas de Oviedo (ETSIMO), que dirigió entre 1968 y 1971. Es muy difícil resumir en pocas líneas sus campos de interés, pero si hubiese que elegir un área de trabajo que le definiese ésta sería, sin duda, la coquización, aunque también publicó abundantes artículos en un campo bastante diferente, el de la preparación del carbón.

Figura 1. Fotografía de un busto de Francisco Pintado Fe situado en la calle Independencia de Oviedo.

En junio de 1947 se convocaron a concurso las jefaturas de las secciones de Ingeniería y de Química del Instituto. La primera fue ocupada por Carlos Bertrand y Bertrand (Gijón, 1913 – Oviedo, 1994), ingeniero de Minas que hasta entonces trabajaba en la Sociedad Metalúrgica Duro-Felguera. La jefatura de la Sección de Química fue asignada a Lucas Rodríguez Pire (Madrid, 1900 – Oviedo, 1989), que era doctor en Ciencias Químicas y catedrático de Química Técnica de la Universidad de Oviedo. Dando un salto en el tiempo, en una distribución del personal del INCAR por categorías, extraída de una lista de funcionarios del PJC a fecha del 4 de septiembre de 1971 (BOE, 1973),[8] destaca, entre otras singularidades, la abundancia de ayudantes diplomados de investigación (39 personas) y ayudantes de investigación (20 personas), que para una nómina total de 101 personas se explica por la existencia de la planta experimental de coquización, con trabajo continuo en tres turnos diarios.

Publicaciones iniciales del INCAR. Primeras tesis y estancias de investigadores en el extranjero

Un año después de su nombramiento como director, Francisco Pintado Fe, comisionado por el PJC, emprende un periplo que, en el verano de 1948, le llevaría a visitar diferentes centros de investigación sobre carbón de cuatro países europeos de gran tradición carbonera. Fruto de ese viaje sería su gran obra "El Carbón", en tres tomos publicados en años sucesivos donde describiría de modo muy detallado la actividad investigadora sobre carbones en Francia,[9] Bélgica,[10] y Holanda e Inglaterra.[11] Otro libro de referencia fue derivado del *Curso de Verano acerca de la Investigación sobre las Hullas*,[12] celebrado en la Universidad de Oviedo en el verano de 1949. Los tres coautores del libro aportaron diez capítulos relacionados con sus respectivos campos de especialización.

A partir de 1941, el Instituto Nacional del Combustible publicó una revista denominada *Combustibles* (ISSN: 0366-7707), que constituyó el medio de publicación de algunos de los primeros artículos firmados por autores del INCAR. Parte de esos primeros artículos fueron reproducciones de capítulos del curso antes mencionado y eran de tipo didáctico.[12] Otros investigadores incorporados al INCAR en aquellos primeros años, como Corrales Zarauza, García-Conde Ceñal y Hevia Rodríguez, aportaron artículos con mayor componente investigador a aquellos números de la revista *Combustibles*.

Las dos primeras tesis doctorales realizadas en el INCAR, ambas dirigidas por Lucas Rodríguez Pire, fueron defendidas en la Universidad de Oviedo el día 20 de diciembre de 1955. Sus autores fueron José Antonio Corrales Zarauza y José Benjamín Escudero Fernández. Fueron las primeras tesis doctorales presentadas en la Universidad de Oviedo desde que, más de un siglo antes, la Ley Pidal de 1845 había limitado la concesión del grado de doctor a la Universidad Central. Las primeras estancias pre- y postdoctorales de investigadores del INCAR en centros del extranjero también se dieron en esa época. Así, en 1948-49, García-Conde Ceñal trabajó con R.J. Sarjant en la Universidad de Sheffield (Reino Unido).[13] Hevia Rodríguez realizó en 1950-52 una estancia predoctoral con A. Duparque en la Universidad de Lille (Francia),[14,15] y Corrales Zarauza realizó a partir de 1958 una estancia postdoctoral bajo la dirección de D.W. van Krevelen en el Laboratorio Central de la empresa *Staatsmijnen in Limburg*, en Geleen, Países Bajos.[16]

La época del *Boletín Informativo del INCAR*

Entre 1952 y 1963 el INCAR publicó el denominado *Boletín Informativo del Instituto Nacional del Carbón* (ISSN: 0561-3787), al que nos referiremos abreviadamente en este artículo como el *Boletín*. Es una inestimable fuente de información sobre la trayectoria del centro en aquellos años. A continuación, examinaremos brevemente los artículos publicados por autores del INCAR en el *Boletín*, agrupados por temáticas e intentando seguir una secuencia cronológica dentro de cada temática, que a su vez siguen un orden próximo al de las presentaciones de secciones, departamentos y UEIs en la Figura 3 (ver más adelante).

Las publicaciones relativas a **Análisis** se pueden dividir en dos grandes grupos: por una parte, descripciones de métodos seguidos en el INCAR y, por otra, trabajos sobre el desarrollo de nuevos métodos de análisis para combustibles sólidos o innovaciones en los mismos. Los artículos del primer grupo fueron muy numerosos en los primeros años del *Boletín* y trataron temas tan variados como la medida de la potencia calorífica, la determinación de parámetros de análisis inmediato y elemental y otras propiedades físicas y químicas del carbón. No entramos en detalles sobre estos artículos porque no constituyen una producción investigadora en sí.

En cuanto a trabajos de investigación sobre métodos de análisis, merecen especial mención los relacionados con el índice de hinchamiento al crisol de las hullas, para cuya deter-

© 2025 Real Sociedad Española de Química

minación Rodríguez Pire y R. Martínez Gayol desarrollaron un equipo con calentamiento eléctrico como alternativa al mechero de gas que hasta entonces figuraba en las normas internacionales. El horno eléctrico operaba a una temperatura de 830±5 °C en la base del crisol que contenía el carbón a analizar.[17]

En el campo del análisis elemental mencionaremos dos trabajos sobre fósforo. En uno de ellos, García Gutiérrez y Rodríguez Pire publicaron un trabajo sobre la puesta a punto de un método colorimétrico de determinación del fósforo en el carbón y el coque,[18] que proporcionaba excelentes resultados con una gran economía de tiempo. En el otro trabajo, González y González comparó experimentalmente cinco procedimientos diferentes (gravimétrico, fusión alcalina, método del ácido sulfúrico, volumétrico y colorimétrico); el autor recomendaba los métodos gravimétrico y volumétrico como los más fiables y concordantes entre sí.[19]

Corrales Zarauza publicó en el *Boletín* varios artículos relacionados con el cálculo de la potencia calorífica de carbones a partir de datos del análisis inmediato,[20] deduciendo que ninguna de las fórmulas propuestas por diferentes autores proporcionaba resultados satisfactorios para el conjunto de 91 carbones españoles estudiados en este trabajo. También investigó la búsqueda de una fórmula para el cálculo de la relación másica de materia mineral/cenizas que fuese específica para carbones españoles,[21] encontrando que la fórmula deducida por King, Maries y Crossley para carbones ingleses, era apropiada para carbones españoles.

Corrales Zarauza trabajó así mismo en el campo de la **Pirólisis**, siguiente temática que analizaremos. Como continuación a los trabajos derivados de su estancia en los Países Bajos publicaría un estudio del efecto sobre las curvas termograviméricas (TG) de una serie de variables de operación: tipo de navecilla, velocidad de calentamiento, precalentamiento y oxidación del carbón.[22] Las curvas TG obtenidas por calentamiento a temperatura programada de una vitrinita coquizante extraída con cloroformo para desorber el contenido de los poros y posteriormente impregnada con tres líquidos orgánicos diferentes mostraban cómo la vaporización (en realidad, desorción) de las sustancias retenidas en los poros del carbón se verifica a temperaturas considerablemente más altas que en estado normal.

Los primeros trabajos aparecidos en el *Boletín* sobre **Petrografía** versaron sobre la puesta a punto de instrumentos y metodologías de trabajo, como el desarrollo de procedimientos para el montaje de la muestra y su examen por microscopía óptica. El autor, Hevia Rodríguez, también publicó acerca de los errores cometidos en los análisis microscópicos cuantitativos, describiendo un método gráfico-estadístico realizado según el principio de recuento de puntos,[23] y desarrollando un procedimiento para investigar el posible sesgo en las medidas debido a su realización por diferentes analistas sobre la misma muestra.[24] En un trabajo mucho más general, Hevia Rodríguez y González Prado desarrollaron un método para calcular la precisión en los análisis de macerales así como las diferencias admisibles en los análisis duplicados.[25] El laboratorio de Petrografía del INCAR participó en numerosas actividades científicas internacionales, especialmente de normalización y perfeccionamiento de métodos. Merece especial mención un informe en el que se desarrollaban los contenidos de la primera edición del Glosario Internacional de Petrografía del Carbón.[26]

Las primeras publicaciones del INCAR sobre **Preparación** de carbones fueron básicamente revisiones hechas por Pintado Fe que no entrañaban labor investigadora propia.[27] También se publicaron tres informes sobre el funcionamiento de cajas de pistón para el lavado de diversas fracciones de hulla, como los menudos.[28] Son de mencionar dos trabajos de Bertrand y Bertrand sobre las posibilidades de lavado de un carbón bruto,[29] y sobre la determinación de la densidad de lavado del carbón menudo más conveniente desde el punto de vista económico.[30] Barrero García, miembro del equipo de Preparación del INCAR, participó en los años 60 en un trabajo sobre la sedimentación del Cretácico en La Manjoya (Oviedo), concluyendo que el tramo estudiado correspondía a sedimentos depositados en un medio litoral bajo la acción de fuertes corrientes de agua.[31]

En la época de publicación del *Boletín*, la **Carboquímica** no constituía aún un tema de trabajo tan significativo del INCAR como veremos que lo sería posteriormente. Solo hemos detectado en el *Boletín* un trabajo clasificable en este campo, en el que Bermejo Mayoral, incorporado muy poco antes al INCAR, revisaba la utilidad de los clatratos (un tipo de complejos de Werner cristalinos) para la separación de mezclas de isómeros aromáticos obtenidas en la destilación del alquitrán de hulla.[32]

Las **Propiedades Plásticas** del carbón constituyen el siguiente tema a analizar en cuanto a su contribución al *Boletín*. Escudero Fernández publicó tres trabajos derivados de su tesis doctoral, relacionados con la técnica operatoria del ensayo en el dilatómetro Audibert-Arnu (proporcionando numerosas reglas prácticas), el establecimiento de un índice para la correcta expresión del hinchamiento de los carbones en el mismo dilatómetro y la aplicación del mismo a la coquización de mezclas de diferentes tipos de carbones. Escudero Fernández también publicaría un trabajo conducente a una clasificación científica de las hullas basada en dos parámetros: el índice de hinchamiento y la temperatura de reblandecimiento.[33] Al analizar las variaciones de cada uno de estos parámetros entre diferentes carbones el autor observó que ambos presentan desviaciones de la ley de las mezclas, proporcionando una clasificación complementaria a la conocida *clasificación INCAR*, de la que hablaremos a continuación.

Pasando al campo de la **Coquización**, una de las mayores necesidades identificadas por Pintado Fe era establecer criterios objetivos para el precio de las hullas españolas, en cuyo marco desarrolló la que sería la conocida *Clasificación INCAR de las hullas españolas*.[34] En ella se representaba el índice de hinchamiento al crisol frente al contenido en materias volátiles. De acuerdo con sus valores, las hullas se clasificaban en seis grupos: I (hullas secas de llama larga), II (h. de gas), III (h. de fragua), IV (h. de coque), V (h. de vapor) y VI (h. secas de llama corta y antracitosas). Pintado Fe y García-Conde Ceñal publicaron conjuntamente en el *Boletín* una serie de ocho trabajos bajo el título genérico de "Coque Siderúrgico". Las temáticas variaban desde la identificación de las propiedades que definen si un coque se puede o no calificar como siderúrgico,[35] hasta el uso de granos de carbón para la fabricación de coque,[36] pasando por varios trabajos sobre la coquización de mezclas de diferentes tipos de hulla y las propiedades de los coques resultantes.

La construcción del edificio principal del INCAR

Los primeros experimentos de los que derivaron publicaciones e informes técnicos del Instituto se llevaron a cabo en un sótano alquilado en la calle Matemático Pedrayes de Oviedo, espacio que se adaptó a la ejecución de ensayos de lavabilidad de carbones. También se instalaron laboratorios en espacios cedidos por la Facultad de Ciencias de la Universidad de Oviedo. Para la labor de gabinete (al igual que las tareas administrativas en general) se utilizarían las primeras oficinas del INCAR, situadas en un piso alquilado en la calle Asturias, también de Oviedo, en tanto se construían las instalaciones propias del INCAR.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

En 1947 se iniciaron gestiones con propietarios de terrenos situados al nordeste de la ciudad de Oviedo, en una zona llana junto a la carretera de La Corredoria a San Cucao de Llanera. Fruto de esas largas negociaciones (más de dos años) se adquirió una superficie de terreno de unos 62 000 metros cuadrados. En la Figura 2a, el terreno del INCAR se encuentra rayado y situado en el mapa ligeramente a la izquierda del río Nora. El terreno ofrecía como potencial ventaja el paso, lindando con el mismo, de la línea férrea de RENFE Oviedo-Gijón, lo que hizo pensar en la posibilidad de instalar allí un apartadero de ferrocarril para el transporte de carbón. Sin embargo, en 1955, la RENFE rechazaría esta solicitud, por lo que se tuvo que recurrir al transporte de cargas de carbón en camiones, desde la próxima estación de Lugones u otros orígenes.

La construcción del edificio principal del INCAR fue encomendada a Fernando Moreno Barberá (1913-98), arquitecto de construcciones civiles del Ministerio de Educación que, entre 1945 y 1950, había sido autor de un edificio con función similar: el Centro de Investigación de la *Empresa Nacional Calvo Sotelo (ENCASO)*, situado en la calle Embajadores de Madrid.[37] El edificio principal para laboratorios, oficinas y otras dependencias, que se construyó para el INCAR en hormigón armado, estaba compuesto por cuatro unidades estructurales (Fig. 2b): cuerpo de laboratorios (A), cuerpo de oficinas (B), sala de conferencias (C) y nave para ensayos a escala intermedia (D). Se proyectaba construir una superficie total de unos 6.000 m^2, estimándose el coste de la construcción del edificio, incluidos sus servicios, en unas 11.500.000 pesetas de 1950. En primer lugar, se construyó la nave para ensayos a escala intermedia (señalada como "D" en la Figura 2b) que comenzaría a funcionar como sede de laboratorios provisionales a partir de junio de 1952. En la zona central de la misma se colocaron algunas plantas piloto de tamaño intermedio. Antes de disponer de instalaciones propias para los experimentos de coquización a mayor escala que en la nave, el INCAR recurrió a préstamos de espacios y material por parte de empresas del sector, que esencialmente permitieron al INCAR llevar a cabo experimentos de coquización en cajas en sus instalaciones. Para el resto del edificio principal, en 1960 se indica textualmente: "El edificio de laboratorios y oficinas ha quedado prácticamente terminado, y su entrada en servicio está prevista dentro del primer trimestre de 1961".[38] Dado que las posteriores memorias no añaden nada sobre obras de construcción del edificio podemos considerar 1961 como año de terminación del mismo.

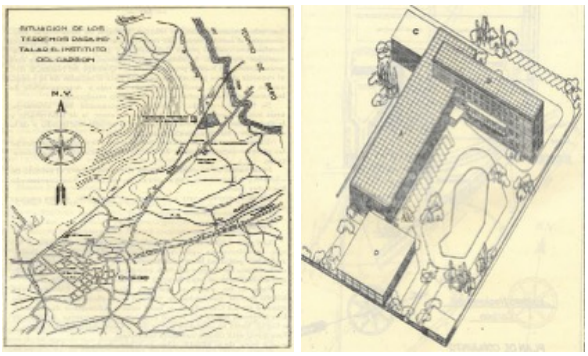


Figura 2. Izquierda, mapa de los alrededores de Oviedo (zona nordeste) que muestra la localización de los terrenos adquiridos para el INCAR; adaptado de la ref. [11], p. 382. Derecha, esquema del edificio principal del INCAR: cuerpo de laboratorios (A), cuerpo de oficinas (B), sala de conferencias (C) y nave para ensayos a escala intermedia (D); adaptado de la ref. [11], p. 386.

Las plantas experimentales. Aspectos técnicos y económicos. Su construcción

Ya se indicó que, en 1946, la Comisión Técnica Especializada de Combustibles del PJC había justificado la necesidad de llevar a cabo experimentación a escala al menos semiindustrial, además de la escala de laboratorio. De acuerdo con los ambiciosos planes iniciales, el INCAR hubiera dispuesto de plantas experimentales que hubieran llenado la práctica totalidad de los 62 000 m^2 de terreno una vez construido el edificio principal, lo que parece a todas luces desmedido. Muy pronto, en 1950, de todas esas plantas se decidió limitarse a proyectar solo las de mezclas, coquización y aglomeración; el resultado final es que solo se llegarían a construir las dos primeras y ni siquiera la de aglomeración llegó a ejecutarse.

Desde el proyecto inicial de la planta de coquización, la batería de hornos se inspiró en la existente en el *Centre de Pyrolyse de Mariénau* (Lorena, Francia). Inicialmente se planteó instalar un macizo de cuatro hornos de longitud y altura iguales a las de los hornos industriales (12 y 4 m, respectivamente), pero en 1952 se decidió reducir la longitud de los hornos a la mitad (6 m),[39] considerando dos posibles valores para la altura (3 ó 4 m). Para poder estudiar el efecto de la velocidad de calentamiento, los cuatro hornos tendrían anchuras distintas y calentamiento independiente de cada uno de ellos. En 1954 se publica una descripción de la coquería experimental del Instituto,[40] que reproduce el proyecto que había sido presentado por la casa *Dr. C. Otto & Comp.*, que fue la suministradora de la misma. Finalmente se optó por una altura de solera a bóveda de 3 metros. La longitud entre puertas de los cuatro hornos se fijó en 6,25 metros, y las anchuras medias de los hornos eran de 300, 350, 400 y 450 mm. Se calculaban unas capacidades de tratamiento de 30,9 toneladas de carbón/día para los hornos de 3 metros de altura. Para la manipulación del coque se planificó desde el principio la extinción en torre, considerando incluso la posibilidad futura de extinción en seco.

Por su parte, el proyecto de la estación de mezclas constaba de 10 tolvas de almacenamiento con una capacidad individual de 23 toneladas y estaba dotada de molinos del tipo de martillos con rejilla de agujeros redondos variables entre 3 y 6 m de diámetro, siendo la capacidad de cada molino de 2,5 toneladas/hora.

Pasando a los aspectos económicos, en trabajos anteriores hemos mencionado la excepcional importancia que tuvieron las aportaciones industriales para el funcionamiento del Instituto Nacional del Combustible de 1947 en adelante. En 1960, en que las aportaciones industriales pasaron a denominarse exacciones parafiscales, se fijaron cánones sobre las ventas (entre 1 y 4 pesetas por tonelada de carbón vendida) y también sobre los transportes marítimos de carbón, aplicándose estas exacciones exclusivamente a subvencionar las actividades del PJC. Por tanto, a partir de esa fecha, los fondos iban en su totalidad al PJC y además incluían un sustancioso canon sobre los fletes marítimos.

López García ha mostrado la gran importancia que tuvieron para el PJC las contribuciones industriales,[41] que estuvieron vigentes desde 1946 hasta 1970, representando a lo largo de todo ese período de tiempo cerca del 40% del conjunto de la financiación recibida por el PJC. En los primeros años, estas aportaciones repercutían no en todo el PJC sino solamente en el instituto dedicado a cada uno de los cuatro sectores implicados (carbón, cemento, productos siderúrgicos o soldadura). Pero, recíprocamente, si un determinado sector entraba en crisis, el afectado era sólo el correspondiente centro. Así ocurrió con el INCAR cuando la minería del carbón entró en declive a partir

© 2025 Real Sociedad Española de Química

de 1953, haciéndose necesario unificar los cánones existentes a tal fecha para recaudar fondos con los que subvencionar la construcción de las plantas experimentales (para las que el INI había concedido un crédito por valor de 40 millones de pesetas). López García señala que esta crisis incluso llegó a amenazar con cierres, o al menos reducción de personal en algunas delegaciones del Instituto Nacional del Combustible.[42]

La construcción de la batería se inició en agosto de 1954 con la excavación del área donde se situaría el macizo de hornos. Sin embargo, la construcción de la estación de mezclas de carbones no pudo ser iniciada hasta 1955, año que aportó la noticia negativa de un retraso forzoso en el ritmo de construcción de las plantas experimentales debido a una denegación de la solicitud de importación de material alemán para la coquería. Esta situación duraría varios años, y no tenemos constancia de un avance real hasta que se anuncia en el *Boletín* la llegada al puerto del Musel (Gijón), el 23 de abril de 1961, del primer barco con material alemán para la coquería experimental del Instituto; el mismo artículo señala que, en el siguiente mes de junio de 1961, se esperaba la llegada del material de la empresa *Union Chimique Belge* que faltaba para la estación de mezclas.

Finalmente, la Memoria del PJC de 1968 indica que la concesión de subvenciones por parte de la Comisión Asesora de Investigación Científica y Técnica (CAICYT) había hecho posible acelerar la terminación de la coquería y programar su puesta en marcha. El 4 de septiembre de 1968 se inició el calentamiento de los cuatro hornos y el 1 de diciembre del mismo año se produjo la primera hornada de coque. Dando un gran salto en el tiempo indicaremos que la última coquización se llevó a cabo el 13 de julio de 1999 y que dos años después, en julio de 2001, se procedería a la demolición de las instalaciones y la explanación del terreno liberado.

La estructura departamental del INCAR

La Figura 3 muestra la evolución de las entidades constituyentes del INCAR entre 1946 y 1984. La estructura departamental del centro fue bastante cambiante en sus primeros años. En 1947 se crearon dos secciones, Ingeniería y Química y, ya en 1949, se realiza el desdoblamiento de la primera en dos más especializadas de Preparación y Utilización. El siguiente cambio (en enero de 1950) fue más sustancial, pasando el INCAR a constar de cuatro departamentos; quizá el principal cambio fuese la transferencia de los trabajos sobre coquización del Departamento de Preparación al recién creado de Transformación. Hay aspectos que se mantuvieron inamovibles durante bastantes años, como los nombres de los departamentos y las jefaturas de los mismos (Preparación: Bertrand y Bertrand; Química: Rodríguez Pire; ver Fig. 3). En el caso del Departamento de Transformación, Pintado Fe ejerció *de facto* la jefatura, aunque sin figurar formalmente como tal sino como director del INCAR.

El intento fallido de crear una delegación del INCAR en León y la supresión del Departamento de Utilización. El primer cambio de Dirección en el INCAR

En 1960, las contribuciones del INCAR a las memorias del Patronato y del CSIC recogen iniciativas de llevar a cabo estudios de amplio alcance sobre la lavabilidad de carbones de Asturias y León, incorporando con ello a una provincia, cuya producción y reservas de combustibles fósiles sólidos adquirían importancia creciente. Al año siguiente se anunciaba en el *Boletín* la noticia de la visita al INCAR de una delegación leonesa relacionada con el posible montaje en León de una delegación del INCAR.[43] En 1962 la Diputación y el Ayuntamiento de León hicieron una propuesta formal al INCAR de crear en dicha ciudad una dependencia del mismo.[44]

La Dirección del INCAR debió ver en esta operación un modo de dar vida real al Departamento de Utilización, que había existido solo "en el papel", figurando en numerosos organigramas del Instituto desde su fundación, pero no habiendo nunca sido dotado de medios ni humanos ni materiales. De hecho, la Memoria del PJC de 1964 indicaba que "el Departamento de Utilización, que acaba de empezar a trabajar en escala muy reducida, tendrá parte de sus laboratorios en León". Sin embargo, las memorias del PJC de 1966 a 1968 proporcionan noticias cada vez más negativas de paralización del proyecto de construir la Estación de Ensayos de León. Finalmente, en 1968 se decide el cierre definitivo de este proyecto y al mismo tiempo se informa de la supresión del Departamento de Utilización del INCAR, eliminándolo como unidad independizada y distribuyendo sus misiones específicas entre otros departamentos.

El día 2 de diciembre de 1971 fallece repentinamente Francisco Pintado Fe. Cuatro meses después, el 14 de abril de 1972, José Ramón García-Conde Ceñal (Oviedo, 1920 – Oviedo, 2004) es nombrado nuevo director del INCAR. García-Conde Ceñal fue licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de Oviedo (1944) y doctor en Química Industrial por la Universidad de Madrid (1947). Además de los cargos que desempeñó en el INCAR, ejerció como profesor adjunto

<table>
<tr><th>1947-1949</th><th>1949-1950</th><th>1950-1968</th><th>1968-1978</th><th>1978-1983</th><th>1983-1984</th></tr>
<tr><td>Secciones</td><td>Secciones</td><td>Dptos.</td><td>Dptos.</td><td>UEIs</td><td>UEIs</td></tr>
<tr><td>Química (Rodríguez Pire)</td><td>Química (Rodríguez Pire)</td><td>Química (Rodríguez Pire)</td><td>Química (Rodríguez Pire)</td><td rowspan="2">Ciencia y tecnología de los combustibles (Hevia Rodríguez)</td><td rowspan="2">Caracterización y preparación (Hevia Rodríguez)</td></tr>
<tr><td rowspan="5">Ingeniería (Bertrand y Bertrand)</td><td>Preparación (Bertrand y Bertrand)</td><td>Preparación (Bertrand y Bertrand)</td><td>Preparación (Bertrand y Bertrand)</td></tr>
<tr><td rowspan="4">Utilización</td><td rowspan="3">Transformación</td><td rowspan="3">Transformación</td><td rowspan="2">Ciencia y tecnología de los derivados de los combustibles (Bermejo Mayoral)</td><td>Carbonización (Álvarez Miyar)</td></tr>
<tr><td>Carboquímica (Bermejo Mayoral)</td></tr>
<tr><td>Tecnologías y ensayos especiales (Escudero Fernández)</td><td>Tecnologías y ensayos especiales (Escudero Fernández)</td></tr>
<tr><td>Utilización</td><td></td><td></td><td></td></tr>
</table>

Figura 3. Evolución de las entidades constituyentes del INCAR entre 1947 y 1984. Se señalan entre paréntesis los apellidos de los jefes de sección, departamento o unidad estructural de investigación (UEI).

© 2025 Real Sociedad Española de Química

en las facultades de Ciencias de las Universidades de Madrid y Oviedo y, posteriormente, ganó por oposición la cátedra de "Química de los materiales, combustibles y explosivos" y otras materias en la ETSIMO, que desempeñaría hasta su jubilación.

Las *Publicaciones INCAR*

Algo que caracterizó al período 1971-82 en el INCAR fue la producción de una serie de 39 artículos denominados en su conjunto *Publicaciones INCAR*, que, a diferencia de muchos trabajos publicados en el *Boletín*, se basaban en resultados de investigación. En esta sección examinaremos una selección de artículos de autores del INCAR aparecidos en las *Publicaciones INCAR* (o en otras revistas, en ese mismo período), advirtiendo al lector que el nombre, número y tipo de referencia que se dieron a estas publicaciones evolucionaron con el tiempo, de manera un tanto enrevesada, lo que explica que en la lista de referencias del presente trabajo exista una aparente heterogeneidad de citas bibliográficas.

Pintado Fe inaugura la serie *Publicaciones INCAR* con una relativa al uso de los carbones asturianos en la industria siderúrgica española, que por la fecha que lleva pudo ser su última publicación.[45] Además de una discusión pormenorizada de la *Clasificación INCAR* y algunas variaciones de la misma, el artículo también incluía una descripción detallada del *Parque de Carbones de Aboño*, en cuyo proyecto había intervenido el propio autor y que en aquel entonces tenía por misión suministrar carbón a las coquerías de *ENSIDESA*, *UNINSA* y *Altos Hornos de Vizcaya*.

Cabe mencionar aparte, por su singularidad, una publicación realizada en colaboración con el Departamento de Química Básica de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas de Oviedo acerca de la inflamabilidad de mezclas de aire-polvo de carbón donde,[46] trabajando con diez tipos de carbones de rangos muy diferentes, se concluía que el parámetro más relacionado con la inflamabilidad del carbón era su contenido en materias volátiles.

El primer bloque temático de *Publicaciones INCAR* que analizaremos corresponde a trabajos sobre **Análisis** de carbones y sus derivados, todos ellos relativos a elementos inorgánicos. En uno de ellos se analizaron 28 elementos traza en alquitranes de hulla utilizando absorción atómica,[47] fotometría de llama y espectrofotometría de absorción, observándose que la mayoría de esos elementos quedan retenidos en la fracción insoluble en benceno del alquitrán. Utilizando las mismas técnicas, Cardín González llevó a cabo el análisis de veinte elementos en muestras certificadas de carbón y de cenizas volantes, obteniendo una excelente concordancia con los resultados obtenidos con los datos certificados y con los informados por otros autores.[48] También trabajó sobre el cálculo del rendimiento en coque de los carbones a partir de los análisis de contenidos de silicio y aluminio y sobre la determinación del arsénico en carbones y coques.

En un artículo de revisión sobre el campo de la **Preparación** de carbones, Bertrand y Bertrand presentó la situación de las diferentes tecnologías de preparación de combustibles sólidos entonces implementadas en España.[49] El autor proponía recomendaciones para mejorar la situación, tales como agrupar plantas pequeñas por zonas o implantar sistemas más avanzados para aumentar el rendimiento. Años después, Acebal de la Vallina,[50] investigaría las variaciones de la imperfección de una celda de flotación de laboratorio utilizando una muestra de finos de carbón de tamaños comprendidos entre 0 y 0,5 mm procedente del lavadero de Turón de la empresa *Hulleras del Norte, S.A.* (*HUNOSA*).

En 1967, el grupo de **Carboquímica** investigaba el análisis del alquitrán de coquerías mediante extracción con disolventes utilizando sucesivamente éter de petróleo (40-60 °C) y benceno.[51] En aquel mismo año, este grupo, liderado por Jenaro Bermejo Mayoral, inició la publicación de trabajos sobre el estudio de los alquitranes derivados del carbón mediante técnicas cromatográficas. En aquel momento el INCAR buscaba valorizar el alquitrán de hulla excluyendo cualquier calentamiento del mismo a fin de evitar la formación de brea y poder valorar el alquitrán en su integridad.

En 1971, J.O. Martínez Gayol identificó un gran número de compuestos encontrados en el alquitrán,[52] comparando datos proporcionados por diversas fuentes. El listado de 475 compuestos resultante, ordenados según sus puntos de ebullición, fue frecuentemente utilizado en el INCAR como referencia. A partir de 1973 aparecen numerosas publicaciones conjuntas de Bermejo Mayoral y Martínez Gayol comenzando con un estudio general sobre la separación e identificación de los componentes del alquitrán.[53] En este trabajo utilizaron las cromatografías en columna, en papel y de gases, con lo que combinaban, respectivamente, técnicas de separación, identificación y cuantificación de los componentes del alquitrán. Dada la multiplicidad de posibles subfracciones y el ingente trabajo que representaría su caracterización una por una, decidieron centrarse en las fracciones llamadas "aceites neutros". A pesar de esa aparente limitación el trabajo impresiona por su extensión y profundidad.

Entre los trabajos ajenos al uso de técnicas cromatográficas cabe mencionar los basados en la extracción con disolventes y la espectroscopía ultravioleta. Para la primera técnica, Bermejo Mayoral y Martínez Gayol aplicaron un protocolo común de separación en ocho fracciones a muestras de alquitrán procedentes de seis coquerías asturianas.[54] En cuanto a la espectroscopía ultravioleta,[55] desarrollaron un método cuantitativo de análisis de mezclas complejas de fenoles. Aunque los resultados eran excelentes, los autores consideraban que el método resultaba demasiado largo y caro en comparación con la cromatografía de gases, que proporcionaba resultados similares, pero siendo más sencilla y de más rápida ejecución.

El resto de los trabajos del grupo de Carboquímica lleva indefectiblemente como "marca de la casa" el uso de diferentes modalidades de la cromatografía, técnica en la que este grupo adquirió un reconocido prestigio. Bermejo Mayoral y Martínez Gayol analizaron cuantitativamente un extracto bencénico integral, directamente y sin fraccionamiento previo, por cromatografía sólido-líquido. Dada la dificultad de analizar por cromatografía de gases mezclas de compuestos de puntos de ebullición tan dispares como los allí presentes, utilizaron la temperatura programada a pesar del criterio general de no emplearla para análisis cuantitativos. Los resultados no fueron tan precisos como con temperatura constante, pero fueron razonablemente satisfactorios. Para la fracción industrial "cumarona-indeno" los autores siguieron un criterio equivalente, de normalización interna con temperatura programada, siendo satisfactoria la repetibilidad del método.[56]

En años posteriores se identifican en el contexto analítico trabajos metodológicos dirigidos, por ejemplo, a la predicción de índices de retención para compuestos aromáticos. Bermejo Mayoral y colaboradores llevaron a cabo estudios con columnas capilares de alta resolución,[57] en las que el grupo tuvo un papel destacado en los primeros años de su uso en España. El grupo de Carboquímica también trabajó en la aplicación conjunta de diferentes técnicas cromatográficas (en capa fina bidimensional y de gases) a la separación y cuantificación de hidrocarburos aromáticos policíclicos.[58] Otro trabajo particularmente complejo[59] consistió en la identificación de metil y dimetilderivados del

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2040

diciclopentadieno, haciendo uso de la Teoría del Orbital Frontera y de resultados experimentales de espectroscopía IR, RMN y cromatografías de gases analítica y preparativa.

Hasta aquí hemos discutido trabajos del equipo de Carboquímica con objetivos principalmente analíticos. Otra importante línea de trabajo de este grupo fue la cloración de xilenos, cuyo objetivo estaba en separar los isómeros que forman el xilol industrial mediante cloración selectiva del *m*-xileno con cloro gaseoso y destilación fraccionada del resto de sus componentes. Se utilizó principalmente como técnica analítica la cromatografía de gases; las mezclas estudiadas eran particularmente complejas, ya que a las reacciones de cloración se superponían las de isomerización y desproporcionación. Para los metilbencenos y monocloroderivados, Álvarez-Uría, Bermejo Mayoral y Rodríguez Moinelo encontraron 23 compuestos que pudieron ser identificados en su totalidad.[60] El caso de los dicloroderivados era un problema mucho más complejo,[61] por lo que a la cromatografía de gases (con diferentes columnas) fue necesario añadir otras técnicas como la cromatografía preparativa y la espectroscopía IR.

Los trabajos sobre cloración selectiva de xilol propiamente dicha incluyeron estudios de la cinética del proceso y de la influencia de diferentes medios de reacción sobre la selectividad. El estudio realizado por Bermejo Mayoral y Rodríguez Moinelo de las selectividades *m*-xileno/*p*-xileno y *m*-xileno/Cl-*m*-xilenos,[62] mostró un claro efecto de la naturaleza y concentración del medio de reacción, con excelentes resultados en el caso de catalizadores de I_2 y $FeCl_3$. Bermejo Mayoral y Martínez Alonso investigaron la cloración del etanol motivados por la observación previa de que la cloración de *m*-xileno con cloro molecular en medio de etanol transcurría rápidamente y con elevada selectividad,[63] lo que sugería que el agente clorante fuera alguno de los derivados del etanol. Con los productos de la reacción identificados mediante cromatografía de gases, IR, RMN y análisis elemental propusieron una secuencia de reacciones que explicaba el mecanismo del proceso. El grupo de Carboquímica también investigó la formación de dicloroderivados en la cloración heterogénea de xilenos con cloro gaseoso.[64] Para ello se cloraron diferentes mezclas de hidrocarburos y sus derivados monoclorados y los resultados demostraron inequívocamente que, en ausencia de cualquier tipo de activador, los dicloroderivados no se forman a partir de los monocloroderivados, sino directamente a partir de los hidrocarburos.

Merece mención aparte, por su peculiar temática, la actividad de Bermejo Mayoral en el campo del análisis de aromas de frutas, consecuencia de haber dirigido la tesis doctoral de Saura Calixto, centrada en el análisis de los componentes volátiles en manzana de sidra asturiana. En los primeros artículos, Bermejo Mayoral y Saura Calixto identificaron por cromatografía de gases los componentes volátiles de diferentes variedades de manzana de sidra.[65] En trabajos posteriores, compararon diferentes métodos de obtención de aromas de frutas para su análisis por cromatografía de gases, de entre los cuales seleccionaron como más adecuados la destilación en corriente de vapor y la adsorción-desorción sobre carbón activado.[66]

Las **Propiedades Plásticas** del carbón constituyen la siguiente temática a examinar, en la que se buscaba tanto establecer relaciones entre diferentes parámetros indicativos del intervalo plástico de las hullas como utilizar esos parámetros para investigar los efectos negativos de la oxidación del carbón por exposición al aire sobre la calidad del coque producido a partir del mismo. Pis Martínez, Escudero Fernández y Béjar Suárez concluyeron que la carbonización Gray-King permite establecer el grado de oxidación de un carbón con respecto al mismo carbón fresco, pero que está en franca desventaja con respecto a la información más objetiva proporcionada por el ensayo Audibert-Arnu.[67] Por otra parte, el estudio detallado del efecto de la oxidación sobre la fluidez Gieseler mostró una reducción importante del intervalo de plasticidad al aumentar el grado de oxidación. Un tercer trabajo trató sobre la relación entre fluidez Gieseler e hinchamiento Audibert-Arnu en muestras de una hulla típica de coque oxidadas a diferentes temperaturas, encontrándose relaciones lineales entre los logaritmos del hinchamiento y de la máxima fluidez para cada serie isoterma de oxidación aérea. En otros estudios sobre propiedades plásticas, Escudero Fernández, García Gutiérrez y Pis Martínez utilizaron como parámetro alternativo la solubilidad del carbón en cloroformo.[68] Observaron una buena relación lineal entre el índice de hinchamiento Audibert-Arnu y el máximo porcentaje de materia soluble en cloroformo de una serie de 12 hullas frescas, así como para muestras de una misma hulla oxidada en aire a diferentes temperaturas entre 100 y 160 °C.

Dos de los componentes del equipo investigador implicado en el anterior grupo de trabajos, Escudero Fernández y Pis Martínez, iniciaban en aquellos años una línea de investigación sobre Combustión. Muestra de lo publicado en los inicios de esa línea son varios artículos de revisión sobre combustión en lecho fluidizado, tecnología entonces en sus comienzos. Uno de ellos partía de la necesidad de desarrollar sistemas de alto rendimiento energético y evitando la contaminación.[69] Otros trabajos de este grupo exponían las ventajas específicas de la combustión en lecho fluidizado para carbones con alto contenido en materia inerte, poniendo énfasis en el uso de los reactores circulantes. Un trabajo más sobre nuevas tecnologías de gasificación del carbón,[70] presentaba los gasificadores que estaban funcionando a escala comercial y destacaba el esfuerzo de I+D en los de segunda generación, enfocados a maximizar o bien minimizar la producción de metano.

El último bloque de *Publicaciones INCAR* que examinaremos corresponde al campo de la **Coquización** y trata en gran parte sobre los carbones de "empuje peligroso", que desarrollan una elevada presión durante la carbonización pudiendo llegar a dañar seriamente las paredes de las cámaras de coquización. Un primer trabajo desarrollaba varias modificaciones del ensayo Koppers,[71] de donde derivó el denominado horno Koppers-INCAR; las principales variables de operación del correspondiente ensayo fueron estudiadas por los mismos autores en una publicación posterior. Álvarez García y Escudero Fernández estudiaron también el efecto del contenido en cenizas sobre el grado de peligrosidad de los carbones durante la coquización, obteniendo buenas correlaciones con las magnitudes contracción y expansión del ensayo Koppers-INCAR.

Posteriormente, Escudero Fernández, Álvarez Miyar y Álvarez García estudiaron la eficacia de carbones correctores del empuje y determinaron la mínima cantidad de éstos que se deben añadir a los carbones peligrosos para realizar la coquización con seguridad. Los autores lograron realizar una coquización segura del carbón "Sabero", de reconocida peligrosidad en la práctica industrial, por adición de cantidades discretas de carbones altos en materias volátiles o bien mediante un control riguroso de la densidad de carga. Además, encontraron una buena correlación entre la densidad de carga de laboratorio (ensayo Koppers-INCAR) y la de la práctica industrial en la Coquería Experimental del INCAR.

El equipo de Carbonización publicaría también trabajos sobre la calidad del coque siderúrgico. En uno de ellos, Álvarez Miyar y Álvarez García compararon los métodos MICUM e IRSID para la determinación de la resistencia mecánica del coque,[73] encontrando una correlación muy marcada entre ambos parámetros y proponiendo la sustitución del segundo método

© 2025 Real Sociedad Española de Química

por el primero, de más fácil ejecución práctica. Álvarez García abordó el tema de la calidad del coque para los nuevos altos hornos de gran tamaño, concluyendo que los parámetros principales eran la reactividad y la resistencia mecánica del coque tras los ensayos de reactividad.[74] Concluimos esta sección mencionando un artículo de prospectiva de las posibilidades de utilización del carbón en España en 1980, donde García-Conde Ceñal estimaba como impedimento principal a la sustitución del petróleo por carbón la lentitud por parte de muchos planificadores energéticos en apreciar el creciente atractivo económico de dicha sustitución.[75]

Las primeras publicaciones internacionales de trabajos realizados en el INCAR (1977-84)

En la transición de los años setenta a los ochenta comienzan a aparecer en medios internacionales los resultados de la actividad investigadora del INCAR. Los dos primeros artículos que discutiremos se publicaron en un volumen especial del *Journal of Microscopy* editado en 1977 por D. Murchison. Estudiando el rango y la anisotropía de las antracitas, Hevia Rodríguez y Virgós Rovira presentaron fórmulas tanto teóricas como empíricas que relacionaban las reflectividades principales de las sustancias uniáxicas y biáxicas con los valores medios de la reflectividad medidos experimentalmente.[76] En otro trabajo incluido en el mismo volumen, González Prado investigó las propiedades ópticas de la vitrinita y la exinita de un carbón de bajo rango oxidado con aire a temperaturas hasta 300 °C,[77] mostrando que el espectro de la exinita oxidada constituye un buen parámetro indicativo del grado de oxidación.

En 1981, Escudero Fernández y Alvarez García investigaron el efecto de la oxidación con aire sobre la antes mencionada presión de ciertos carbones coquizantes durante la carbonización,[78] comparando la cinética de la oxidación aérea de tres carbones españoles a partir de las variaciones del hinchamiento Audibert-Arnu y del perfil del ensayo Koppers-INCAR. Poco después, Álvarez García, Álvarez Miyar y Suárez Canga investigaron a mayor escala de trabajo el efecto de los agentes atmosféricos sobre la calidad del coque,[79] exponiendo una pila de unas 200 toneladas de carbón a la intemperie durante largo tiempo. No observaron deterioro en la calidad del coque obtenido a partir de ese precursor hasta una vez pasados 14 meses, si bien hacían esta afirmación con reservas al no existir igualdad de respuesta entre los índices MICUM e IRSID del coque resultante.

Bermejo Mayoral y colaboradores producirían varias de las primeras publicaciones en medios internacionales del INCAR. En una de ellas estudiaron las relaciones entre el índice de retención y la estructura molecular de hidrocarburos aromáticos presentes en mezclas complejas.[80] El artículo contribuía a la identificación de los constituyentes de las naftas aromáticas, ya que incluía prácticamente todos los compuestos presentes en las mismas.

También en 1983, Bermejo y Guillén publicaron un trabajo sobre las relaciones entre indices de retención y propiedades fisicoquímicas de los alquilbencenos.[81] Los autores utilizaron varias propiedades fisicoquímicas de solutos para deducir ecuaciones para el cálculo de los índices de retención de los alquilbencenos en fases estacionarias de diferente polaridad. Posteriormente, autores del mismo grupo profundizaron en la conexión entre parámetros relacionados con la polarizabilidad electrónica y los índices de retención de los alquilbencenos.[82] Completa este conjunto de trabajos internacionales publicados hasta 1984 inclusive uno de Bermejo y Guillén sobre la predicción de índices de retención de alcanos de diferentes tipos y sus propiedades fisicoquímicas,[83] que encontraban que las desviaciones estándar de las ecuaciones de cálculo de los índices de retención de Kováts estaban próximas al error experimental; inversamente, estas ecuaciones podían ser utilizadas para el cálculo de los parámetros fisicoquímicos que contienen.

Finalmente, en el campo de la cloración de xilenos Bermejo Mayoral, Gutiérrez Blanco, Martínez Alonso y Rodríguez Moinelo informaron sobre la existencia de reacciones de adición-eliminación en las cloraciones heterolíticas de *p*-xileno.[84] Utilizando una mezcla equimolecular de *p*-xileno deuterado y cloro-*p*-xileno sin deuterar, los autores demostraron la formación directa de dicloroderivados del *p*-xileno, así como la de tricloro-*p*-xileno a partir de cloro-*p*-xileno. También mostraron su importante contribución a la formación de dicloroderivados en la cloración del *p*-xileno, excepto cuando ésta se lleva a cabo en presencia de catalizadores ácidos fuertes como el $FeCl_3$.

La división en Unidades Estructurales de Investigación. Nuevas construcciones en el centro. El segundo cambio de Dirección en el INCAR

En 1978 se promulga un nuevo Reglamento Orgánico del CSIC donde se sustituye el concepto de Departamento de los Institutos por el de Unidad Estructural de Investigación (UEI). La Figura 3 indica los cambios habidos en la estructura del INCAR como consecuencia del nuevo reglamento en lo relativo a UEIs. Por una parte, en 1978-80 dos de los departamentos existentes desde 1950 (Preparación y Química) se fusionaron en una UEI (Ciencia y Tecnología de los Combustibles), mientras que el otro departamento tradicional (Transformación) se escindió en dos UEIs: Ciencia y Tecnología de los Derivados de los Combustibles, y Tecnologías y Ensayos Especiales (INCAR, 1981). En 1983 se detectan nuevos cambios, que se encuentran también reflejados en la Figura 3. Por una parte, la UEI de Ciencia y Tecnología de los Combustibles cambió su nombre al de Caracterización y Preparación. Por otra, la UEI de Ciencia y Tecnología de los Derivados de los Combustibles se dividió en dos UEIs con los nombres de Carbonización y de Carboquímica. Esta división de 1983 subsistiría en 1984, año en el que interrumpimos esta presentación histórica del INCAR. Adelantamos aquí que el próximo cambio vendría en 1993, en que un nuevo reglamento del CSIC vuelve a la denominación de departamentos, resultando agrupaciones tales como "Carboquímica y Carbonización", que vendría a reconstruir en parte el antiguo Departamento de Transformación.

A finales de los años setenta del pasado siglo, la empresa *HUNOSA* decidió adquirir una tecnología (*reactor Thagard*) entonces muy novedosa que utilizaba un reactor de pared fluida operando a muy alta temperatura. La pared fluida se conseguía pasando un flujo muy elevado de gas inerte (nitrógeno) hacia el interior de un reactor de grafito altamente poroso,[85] con lo que los materiales tratados en ese reactor no llegaban a tocar físicamente ese núcleo de grafito y por tanto no se acumulaban en él ni lo dañaban. La capa de gas inerte tenía un espesor aproximado de 6 mm. Las temperaturas de operación variaban entre 1.100 y 2.200 °C (lo que se conseguía mediante calentamiento radiante), mientras que la presión era la atmosférica.

HUNOSA adquirió esta tecnología dentro de un plan de diversificación de sus actividades. El objetivo era la obtención de nuevos materiales por tratamientos a temperaturas elevadas de diferentes tipos de materias primas, de origen principalmente mineral. Sin embargo, surgieron problemas técnicos, principalmente por abrasión del reactor de grafito, de coste muy elevado, por las partículas que circulaban por él (José González Cañibano, comunicación personal) y el proyecto Thagard languideció hasta ser abandonado. Cuando *HUNOSA* clausuró la instalación el

© 2025 Real Sociedad Española de Química

edificio, conocido popularmente como "el Thagard", pasó a ser propiedad del CSIC en virtud de los acuerdos tomados cuando había sido construido en terrenos del INCAR.

A comienzos de los años ochenta, el INCAR instaló una nueva tecnología anexa a la coquería experimental: un proceso de secado del carbón previo a la coquización que permitía obtener mejoras en la calidad del coque utilizando un determinado tipo de carbón; o, inversamente, mantener a niveles aceptables la calidad del coque usando como materia prima mayores proporciones de carbones de peor calidad y más baratos. En el tratamiento de secado, el carbón era calentado a unos 200 °C y mantenido a esa temperatura y bajo atmósfera inerte hasta su carga en los hornos. La mayor ventaja estaba en la mejora de las características físicas del coque, especialmente para las hullas de más bajo rango, tal como afirmaba Álvarez García que en el mismo trabajo,[86] comparó las tres tecnologías que habían alcanzado explotación industrial en 1984: *Coaltek*, *Thermocharge* y *Precarbon*. La primera de ellas alimentaba el carbón a los hornos de coque mediante una tubería, mientras que las otras dos lo hacían por gravedad. El INCAR, en colaboración con la empresa *ENSIDESA*, optó por implantar en la coquería experimental el proceso *Precarbon*, que había sido desarrollado en Alemania en 1971-73 por *Bergbau-Forschung* y *Didier Engineering GmbH*. El montaje de este sistema en el INCAR se llevó a cabo a principios de los años 80, concluyéndose en 1985 (Silvino Fernández Muñiz, comunicación personal.) Por tanto, los resultados de la aplicación de esta tecnología en el INCAR, que fueron de gran interés para la empresa siderúrgica involucrada (*ENSIDESA*), caen fuera del período examinado en este trabajo.

En septiembre de 1984, José Ramón García-Conde Ceñal presenta su dimisión como director del INCAR, que le es aceptada por las autoridades del CSIC el 14 de diciembre de 1984. Con esa misma fecha es nombrado para sucederle, como director en funciones, Víctor Hevia Rodríguez (Oviedo, 1922 – Oviedo, 2015), que fue licenciado (1945) y doctor (1970) en Ciencias Químicas por la Universidad de Oviedo. Alcanzó la categoría de profesor de investigación en 1971, jubilándose en 1987. Puede encontrarse información biográfica sobre Hevia Rodríguez en la siguiente presentación, elaborada por la Dra. Isabel Suárez Ruiz: https://digital.csic.es/handle/10261/140708.

Interrumpimos esta presentación de la historia del INCAR en diciembre de 1984, dejando el testigo a quien desee continuar cronológicamente el examen de la evolución del centro y advirtiéndole que la segunda mitad de la vida del mismo es más abundante en realizaciones, y por tanto más laboriosa y compleja de analizar.

Agradecimientos

El autor agradece la ayuda económica (subvención IDE/2024/000763) recibida conjuntamente del Gobierno del Principado de Asturias y el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (ERDF/FEDER). Es de justicia agradecer al bibliotecario del INCAR, D. Luis Gutiérrez Fernández-Tresguerres, por su eficaz ayuda para la consecución de material bibliográfico y, muy especialmente, por su iniciativa de digitalizar y archivar los contenidos del *Boletín Informativo del INCAR* (https://digital.csic.es/handle/10261/92518), preservando de ese modo una parte muy importante del patrimonio del centro.

Bibliografía

[1] J. M. D. Tascón, *An. Quím. RSEQ* **2023**, *119*, 107-112, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.1893.
[2] J. M. D. Tascón, *An. Quím. RSEQ* **2023**, *119*, 113-119, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.1894.
[3] Anónimo, *Combustibles* **1946**, *35-36*, 135-155.
[4] J. M. D. Tascón, *An. Quím. RSEQ* **2023**, *119*, 311-318, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.1948.
[5] J. M. D. Tascón, *Bol. Cien. Tecnol. R.I.D.E.A.* **2024**, *58*, 339-404.
[6] J. M. D. Tascón, *Bol. Cien. Tecnol. R.I.D.E.A. preimpresión* **2025**, *59*.
[7] C. Gómez Herrera, *An. Real Soc. Esp. Quím.* **2000**, *96*, 54-56.
[8] Resolución del Patronato de Investigación Científica y Técnica "Juan de la Cierva" por la que se dispone la publicación en el "Boletín Oficial del Estado" de la relación de los funcionarios de carrera de este Organismo referida al 4 de septiembre de 1971, *BOE*, 22 feb **1973**, (46), 3493-3517.
[9] F. Pintado Fe, *El carbón. Algunos aspectos de los estudios sobre su origen, propiedades, preparación y utilización. Memoria de un viaje de estudios efectuado a Francia, Bélgica, Holanda e Inglaterra, Tomo I.- Primera parte: A propósito de la investigación sobre el carbón en Francia*, C. Bermejo impr., Impresor, Madrid, **1949**.
[10] F. Pintado Fe, *El carbón. Algunos aspectos de los estudios sobre su origen, propiedades, preparación y utilización. Memoria de un viaje de estudios efectuado a Francia, Bélgica, Holanda e Inglaterra, Tomo II.- Segunda parte: A propósito de la investigación sobre el carbón en Bélgica*, C. Bermejo, Impresor, Madrid, **1950**.
[11] F. Pintado Fe, *El carbón. Algunos aspectos de los estudios sobre su origen, propiedades, preparación y utilización. Memoria de un viaje de estudios efectuado a Francia, Bélgica, Holanda e Inglaterra, Tomo III.- Tercera parte: A propósito de la investigación sobre el carbón en Holanda. Cuarta parte: Ídem en Inglaterra*, C. Bermejo, Impresor, Madrid, **1951**.
[12] F. Pintado Fe, L. Rodríguez Pire, C. Bertrand y Bertrand, *Introducción a la investigación sobre las hullas*, Talleres Tipográficos "La Cruz", Oviedo, **1950**.
[13] J. R. García-Conde, *Combustibles* **1950**, *51*, 10-14.
[14] A. Duparque, V. Hevia-Rodriguez, *Ann. Soc. Géol. Nord* **1952**, *LXXII*, 106-112.
[15] A. Duparque, V. Hevia-Rodriguez, *Ann. Soc. Géol. Nord* **1953**, *LXXIII*, 36-42.
[16] J. A. Corrales, D. W. van Krevelen, *J. Inst. Fuel* **1960**, *XXXIII (228)*, 10-16.
[17] L. Rodríguez Pire, R. Martínez Gayol, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1952**, *4*, 11-23.
[18] L. Rodríguez Pire, C. García Gutiérrez, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1955**, *20*, 84-101.
[19] L. González y González, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1962**, *54*, 58-71.
[20] J. A. Corrales Zarauza, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1953**, *11*, 7-21.
[21] J. A. Corrales Zarauza, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1956**, *26*, 49-70.
[22] J. A. Corrales Zarauza, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1959**, *46*, 150-156.
[23] V. Hevia Rodríguez, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1959**, *44*, 73-80.
[24] V. Hevia Rodríguez, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1959**, *45*, 111-116.
[25] V. Hevia Rodríguez, J. González Prado, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón*, **1961**, *52*, 137-155.
[26] Anónimo, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1963**, *57*, 95-96.
[27] F. Pintado Fe, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1953**, *8*, 16-30.
[28] F. Pintado Fe, C. Bertrand y Bertrand, A. Acebal de la Vallina, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1953**, *12*, 35-48.
[29] C. Bertrand y Bertrand, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1957**, *32*, 65-83.
[30] C. Bertrand y Bertrand, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1960**, *49*, 136-138.
[31] L. Sánchez de la Torre, M. L. Barrero, *Revista de la Facultad de Ciencias (Nueva Serie)* **1962**, *III (2)*, 87-113.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

[32] J. Bermejo Mayoral, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1962**, *55*, 102-110.
[33] J. B. Escudero Fernández, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1957**, *34*, 175-184.
[34] F. Pintado Fe, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1956**, *28*, 172-188.
[35] F. Pintado Fe, J.R. García-Conde, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1952**, *5*, 5-15.
[36] F. Pintado Fe, J.R. García-Conde Ceñal, E. Álvarez Miyar, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1962**, *54*, 41-44.
[37] F. Moreno Barberá, F., *Revista Nacional de Arquitectura* **1953**, *143*, 1-14.
[38] PJC, *Memoria de las Actividades Desarrolladas por el Patronato "Juan de la Cierva" de Investigación Técnica, Año 1960*, Madrid, **1961**.
[39] Anónimo, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1952**, *1*, 11-18.
[40] Anónimo, *Bol. Inf. Inst. Nac. Carbón* **1954**, *14*, 39-47.
[41] S. López García, *Arbor* **1998**, *159 (625)*, 1–44.
[42] S. López García, Tesis Doctoral, Facultad de Ciencias Económicas y Empresariales, Universidad Complutense de Madrid, **1994**.
[43] Anónimo, *Bol. Inf. Inst. Nacl. Carbón*, **1961**, 50, 46.
[44] PJC, *Memoria de las Actividades Desarrolladas por el Patronato "Juan de la Cierva" de Investigación Técnica, Año 1962*, Madrid, **1963**.
[45] F. Pintado Fe, *La utilización del carbón asturiano por la industria siderúrgica española. Publicación del Instituto Nacional del Carbón, y sus Derivados (INCAR)*, Gráficas Summa, Oviedo, **1971**.
[46] J. A. Corrales Zarauza, F. Lavilla Corcobado, *INCAR* **1976**, *9*, 1-8.
[47] J. Bermejo, J. M. Cardín, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1979**, *I.T.2/79*, 1-9.
[48] J. M. Cardín González, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1980,** *P.I.* 4/80, 1-15.
[49] C. Bertrand y Bertrand, *Publicación INCAR*, noviembre **1971**, 27 págs.
[50] A. Acebal de la Vallina, *INCAR* **1976**, *8*, 1-8.
[51] R. Usón, J. Bermejo, O. M. Gayol, en: *XXXVII Congreso Internacional de Química Industrial. Memoria*, Tomo I, pp. 215-220. Héroes, S.A., Madrid, **1967**.
[52] O. Martínez Gayol, *Publicación del Instituto Nacional del Carbón y sus Derivados (INCAR), diciembre 1971*, Gráficas Summa, Oviedo, **1971**.
[53] J. Bermejo, O. M. Gayol, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1973**, *4*, 1-30.
[54] J. Bermejo, O. M. Gayol, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1974**, *5*, 1-6.
[55] J. Bermejo, O. M. Gayol, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1974**, *5*, 15-19.
[56] J. Bermejo, O. M. Gayol, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1974**, *6*, 1-7.
[57] J. Bermejo, C. G. Blanco, A. González de Andrés, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1982**, *C.T.* 2/82, 1-16.
[58] J. Bermejo, R. Menéndez, J. Suárez Canga, *Afinidad* **1983**, *40*, 117-125.
[59] J. Bermejo, C. G. Blanco, M. A. Díez, J. Suárez Canga, *Afinidad* **1983**, *40*, 320-326.
[60] J. Álvarez-Uría, J. Bermejo, S. R. Moinelo, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1974**, *6*, 19-22.
[61] J. Bermejo, S. R. Moinelo, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1975**, *7*, 15-21.
[62] J. Bermejo, S. R. Moinelo, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1975**, *7*, 11-14.
[63] J. Bermejo, A. Martínez, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1980**, *P.I.* 5/80, 1-11.
[64] J. Bermejo, C. G. Blanco, C. Cabeza, S. R. Moinelo, *INCAR*, **1980**, P.I. 7/80, 1-12.
[65] J. Bermejo, F. Saura Calixto, *Afinidad* **1975**, *32 (326)*, 369-377.
[66] F. Saura Calixto, J. Bermejo, *An. Bromatol.*, **1980**, *31-3/4*, 379-390.
[67] J. J. Pis, J. B. Escudero, F. J. Béjar, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1980**, *P.I.* 3/80, 1-8.
[68] J. B. Escudero Fernández, M. C. García Gutiérrez, J. J. Pis Martínez, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1979**, *I.T. 3/79*, 1-12.
[69] J. J. Pis Martínez, J. B. Escudero Fernández, *Quím. Ind.* **1979**, *25 (10)*, 647-652.
[70] J. B. Escudero Fernández, en: *El Futuro de los Carbones Españoles*, pp. 141-146, ANQUE, Madrid, **1984**.
[71] J. B. Escudero Fernández, R. Álvarez García, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1979**, *I.T.* 1/79, 1-20.
[72] J.B. Escudero Fernández, E. Álvarez Miyar, R. Álvarez García, *Inst. Nac. Carbón, Oviedo* **1981**, *P.I.* 2/81, 1-12.
[73] E. A. Miyar, R. Álvarez, *Rev. Metal.*, **1979**, *15*, 311-314.
[74] R. Álvarez García, *Rev. Metal.*, **1980**, *16*, 287-289.
[75] J. R. García-Conde, *Bol. Inf. Fund. Juan March* **1980**, *89*, 2-16.
[76] V. Hevia, J.M Virgós, *J.Microsc.* **1977**, *109*, 23-27, https://doi.org/10.1111/j.1365-2818.1977.tb01113.x.
[77] J. G. Prado, *J. Microsc.* **1977**, *109*, 85-92, https://doi.org/10.1111/j.1365-2818.1977.tb01118.x.
[78] J. B. Escudero, R. Alvarez, *Fuel*, **1981**, *60*, 251-253, https://doi.org/10.1016/0016-2361(81)90188-5.
[79] R. Álvarez García, E. Álvarez Miyar, C. Suárez Canga, *Siderurgia Latinoamericana*, **1983**, *284*, 55-58.
[80] J. Bermejo, J. S. Canga, O. M. Gayol, *Int. J. Environ. Anal. Chem.*, **1982**, *11*, 271-281, https://doi.org/10.1080/03067318208078318.
[81] J. Bermejo, M. D. Guillén, *Chromatographia* **1983**, *17*, 664-668, https://doi.org/10.1007/BF02259316.
[82] J. Bermejo, J. S. Canga, O. M. Gayol, M. D. Guillén, *J. Chromatog. Sci.* **1984**, *22*, 252-255, https://doi.org/10.1093/chromsci/22.6.252.
[83] J. Bermejo, M. D. Guillén, *J. High-Res. Chromatog. & Chromatog. Commun.* **1984**, *7*, 191-195, https://doi.org/10.1002/jhrc.1240070404.
[84] J. Bermejo, C. G. Blanco, A. Martínez, S. R. Moinelo, *J. Chem. Soc., Perkin Trans. II* **1984**, 1993-1995, https://doi.org/10.1039/p29840001993.
[85] Anónimo, *Chem. Eng. News*, **1975**, Oct. 27, 5-6.
[86] R. Álvarez García, *Rev. Metal.* **1979,** *20*, 278-287.

Juan Manuel Diez Tascón

Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono, INCAR-CSIC

C-e: tascon@incar.csic.es
ORCID: 0000-0001-9219-7266

Juan Manuel Diez Tascón es, desde 2024, Profesor *ad honorem* en el INCAR-CSIC. Exceptuando dos estancias postdoctorales, una en Bélgica y otra en USA, ha trabajado siempre en el CSIC, primero en el Instituto de Catálisis y Petroleoquímica y desde 1985 en el INCAR, donde fue director entre 2011 y 2015. Su labor investigadora se ha centrado principalmente en las propiedades de superficie de materiales carbonosos. Ha publicado más de 300 trabajos en revistas internacionales, poseyendo un índice h de 70. Es editor (desde 2012) de la revista *Carbon* y miembro de los comités editoriales de otras cinco revistas.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 352
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2101
La revista de la Real Sociedad Española de Química

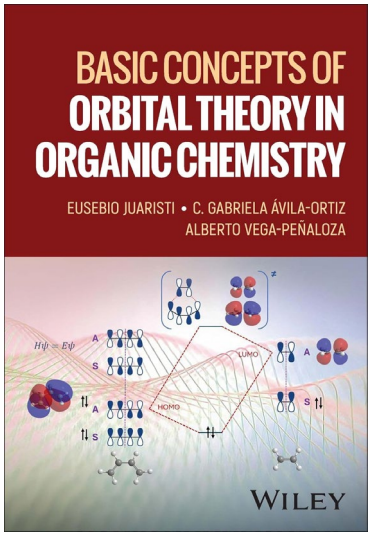
Reseña

Basic concepts of orbital theory in organic chemistry

Eusebio Juaristi, C. Gabriela Ávila-Ortiz y Alberto Vega-Peñaloza

Tal vez haya sido puro azar que el último número de Anales, destacando el acuerdo de la RSEQ con la Sociedad Mexicana de Química, coincidiera en el tiempo con la aparición de esta monografía, publicada por Wiley, sobre la teoría orbitálica en química orgánica, y escrita por dos autores desde Ciudad de México (Eusebio Juaristi y C. Gabriela Ávila-Ortiz) y otro desde Barcelona (Alberto Vega-Peñaloza). Juaristi, cuyo liderazgo internacional en química orgánica, y estereoquímica en particular, es indiscutible, ha coordinado la elaboración del texto, que emana en gran medida de una estancia en el pasado en Berkeley, donde Andrew Streitwieser se esforzaba en enseñar esta temática, sin duda compleja, a sus alumnos.

El libro está organizado en doce capítulos con un enfoque transversal. Así, los cuatro primeros, sobre teoría de orbitales moleculares (OM), orbitales híbridos, formación de enlace a partir de orbitales atómicos, y el método de Hückel de OM, pueden utilizarse desde diferentes áreas de la química en el tratamiento mecano-cuántico de enlace y estructura a través de ejemplos representativos. Los capítulos 5 y 6 introducen la interacción de los OM para racionalizar la reactividad química, las observaciones espectroscópicas, o la generación de complejos de transferencia de carga. Aunque existe un sesgo hacia la química orgánica, el tratamiento es lo suficientemente multidisciplinar para que otras disciplinas puedan aprovechar estos recursos. Los capítulos 7 a 11 representan el meollo principal de la obra, abordando la conservación de la simetría orbital y las reacciones pericíclicas. Las cicloadiciones (Cap. 7) se analizan con detalle mediante reacciones modelo (1,3-butadieno y etileno, o la formación de ciclobutano), prestando también atención a la topicidad y estereoselectividad; si bien se omite el aspecto de la regioselectividad. Los autores enfatizan cómo el concepto explica el proceso, más que incrementar el número de ejemplos. Esta aproximación aparece de nuevo en las reacciones electrocíclicas (Cap. 9), donde se diseccionan las interacciones orbitálicas en los casos arquetípicos de cierres/aperturas en sistemas 4π y 6π. Merece destacar el análisis de reacciones queletrópicas (Cap. 8), que raramente se incluyen en el currículum de Grado, aunque una reacción tan conocida como la de Simmons-Smith suele pasar desapercibida en este contexto. De igual modo, el capítulo 11 discute las cicloadiciones 1,3-dipolares que, generalmente se abordan en posgrado, y cuyo tratamiento aquí es bastante didáctico a través de dipolos representativos. A mi juicio, el capítulo 10 sobre reacciones sigmatrópicas (desplazamientos típicos de hidrógeno y carbono) está muy bien conseguido. Mi experiencia docente indica que el alumno capta mejor su fundamento si previamente conoce los reordenamientos. Los aspectos, siempre difíciles, de retención o inversión de configuración en transposiciones de grupos alquilo



Autores: E. Juaristi, C. Gabriela Ávila-Ortiz y Alberto Vega-Peñaloza
Páginas: 273
ISBN: 978-1-394-25384-5 (pasta blanda)
Publicación: agosto 2025 (John Wiley & Sons)

se ilustran con claridad. Finalmente, el capítulo 12 ofrece una excursión a las interacciones estereoelectrónicas, usando en gran parte el paradigmático efecto anomérico en heterociclos sencillos. Obviamente un texto de menos de 300 páginas en este campo no puede ser exhaustivo. No encontraremos aplicaciones sintéticas complejas, cicloadiciones de orden superior, la reacción eno, o reacciones sigmatrópicas con heteroátomos; innecesarias para los objetivos del texto. Como se ha indicado, el éxito de la obra radica en su enfoque pedagógico, conciso y riguroso a la vez. El uso del color es un valor añadido. Cada capítulo contiene al final ejercicios asequibles al nivel de Grado, junto con bibliografía suplementaria.

En conjunto, un libro altamente recomendable que permite unificar una amplia gama de contenidos en un único material didáctico. Dicho sea de paso, la obra también contribuye a empoderar un poco más a Latinoamérica en el escenario global de la química.

Pedro Cintas
Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Universidad de Extremadura

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: P. Cintas. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 352, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2101

* C-e: pecintas@unex.es

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 353-363
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2106
La revista de la Real Sociedad Española de Química

Noticias de la RSEQ

Entrega de Premios y Distinciones de la RSEQ 2025

El pasado 16 de octubre, el Museo de las Ciencias Príncipe Felipe, en la Ciudad de las Artes y las Ciencias de Valencia acogió la ceremonia de entrega de los Premios y Distinciones de la RSEQ correspondiente a la edición de 2025.

Se entregaron los premios en las modalidades de Medalla de la RSEQ, Reconocimiento a una Carrera Investigadora Distinguida, Excelencia Investigadora y Tareas Educativas y Divulgativas de Enseñanza Preuniversitaria. Asimismo, se reconoció a los miembros con cuarenta y cinco años de servicio a la Sociedad.

Los premiados acompañados por los representantes de las empresas colaboradoras, el Secretario Autonómico de Industria, Comercio y Consumo de la Generalitat Valenciana, el Decano de la Facultad de Química de la Universidad de Valencia, la Directora de la Escuela Técnica Superior de Ingeniería Agronómica y del Medio Natural de la Universidad Politécnica de Valencia, la Vicedirectora de la Escuela Superior de Tecnología y Ciencias Experimentales de la Universidad Jaume I y el Presidente de la RSEQ.

La gala comenzó con el "Reconocimiento a los socios con 45 años de servicios a la RSEQ", representados por la Dra. María del Mar Gómez Gallego, Dra. Mercedes Amat Tusón y Dr. José Miguel Martín Martínez. Los miembros reconocidos este 2025 fueron: Dr. José Aracil Mira, Dr. Manuel R. Bermejo Patiño, Dr. Marcelo Blanco Romia, Dr. Pedro Luis Cabot Juliá, Dr. Francisco Andrés Centellas Masuet, Dr. Francisco Javier Cuadrado Alfonso, Dr. Pedro M. Deyá Serra, Dr. Domingo Domínguez Francisco, Dra. Iluminada Gallardo García, Dr. Félix García-Ochoa Soria, Dr. Ángel García Raso, Dra. Agustina Gómez Hens, Dr. Vicente Gotor Santamaría, Dra. Agustina Guiberteau Cabanillas, Dr. Enrique Guitián Rivera, Dr. Carlos Gutiérrez Blanco, Dr. Emilio Hidalgo García-Chicote, Dr. Manuel Nogueras Montiel, Dr. Juan Ortega Saavedra, Dra. María Mercedes Pérez Manrique, Dr. Justo Félix Rodríguez Amo, Dr. Juan José Rodríguez Jiménez, Dr. Joaquim Sales Cabré, Dr. Alfredo Sanz Medel, Dr. Paulino Tuñón Blanco, Dr. José Luis Usero García.

Hablando en nombre de todos ellos la Dra. María del Mar Gómez Gallego destacó la fidelidad y el compromiso que han caracterizado la relación con la RSEQ, a lo que añadió que «conseguir este compromiso de fidelidad de los socios, sobre todo en los jóvenes, es hoy día uno de los problemas a los que se enfrentan todas las sociedades científicas en Europa».

Reconocimiento a los socios con 45 años en la RSEQ. Dr. José Miguel Martín, Dra. Mercedes Amat y Dra. María del Mar Gómez, en representación del resto de los socios, junto al Dr. Antonio M. Echavarren y D. Felipe J. Carrasco.

Dña. Nuria Muñoz Molina, del Colegio La Inmaculada (Algeciras, Cádiz), recogió el "Premio a las tareas educativas y divulgativas de enseñanza preuniversitaria" y resaltó la «importancia de acercar la ciencia al alumnado [...] y seguir despertando vocaciones científicas entre los jóvenes».

Premio a las tareas educativas y divulgativas de enseñanza preuniversitaria, otorgado a Dña. Nuria Muñoz Molina y entregado por Dña. Constanza Rubio y Dña. Mónica Oliva.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Los Premios de reconocimiento a carreras investigadoras distinguidas, que recayeron en el Dr. José Manuel González Díaz de la Universidad de Oviedo, que no pudo asistir a la ceremonia, y en el Dr. José Manuel Pingarrón Carrazón de la Universidad Complutense de Madrid. En su intervención, el Prof. Pingarrón agradeció a todos los que le han apoyado en su trayectoria científica y expresó su deseo de que la RSEQ siga siendo una punta de lanza en la defensa de la ciencia y el conocimiento científico.

Premios de reconocimiento a carreras investigadoras distinguidas. Dr. José Manuel Pingarrón, acompañado de D. Rafael Ibáñez y D. Juan Carlos Caballero.

Los "Premios a la Excelencia Investigadora" fueron entregados a los Drs. Gonzalo Abellán Sáez del Instituto de Ciencia Molecular (UV), Jesús Campos Manzano del Instituto de Investigaciones Químicas (CSIC-US), Dr. Óscar Millet Aguilar-Galindo del CIC bioGUNE y Dra. Mariola Tortosa Manzanares por los representantes de las empresas colaboradoras D. José María Carracedo Zorita, de BASF Española, Dña. Mariana Da Silva, de Moeve Chemicals, Dña. Teresa de Haro, de UCB Biopharma y D. Andrés Trabanco, de Johnson & Johnson. Todos los galardonados agradecieron a sus mentores, colaboradores y a la RSEQ el reconocimiento. El Dr. Gonzalo Abellán subrayó el impacto de los pequeños avances en química; el Dr. Jesús Campos destacó el valor de formar discípulos que superen al maestro; el Dr. Óscar Millet agradeció la apertura de la RSEQ a perfiles diversos dentro de la comunidad química; y la Dra. Mariola Tortosa reivindicó el apoyo institucional a la investigación y reconoció la aportación de las generaciones anteriores al prestigio de la química española.

Premios a la Excelencia Investigadora. Arriba – izquierda: Dr. Gonzalo Abellán, premio entregado por D. José María Carracedo (BASF Española) y D. Juan Carlos Caballero; derecha: Dr. Jesús Campos, acompañado de Dña. Mariana Da Silva (Moeve Chemicals) y D. Rafael Ibáñez. Abajo – izquierda: Dra. Mariola Tortosa con D. Andrés Trabanco (Johnson & Johnson) y Dña. Mónica Oliva; derecha: Dr. Óscar Millet, Dña. Teresa de Haro (UCB Biopharma) y Dña. Constanza Rubio.

Finalmente, en esta edición de 2025, la Medalla de la RSEQ fue concedida al Dr. Miquel Solà Puig de la Universidad de Gerona. El Dr. Antonio Echavarren, como Presidente de la RSEQ, presentó al premiado haciendo un repaso de la dilatada trayectoria investigadora y destacando los avances conceptuales a los que ha contribuido, e hizo entrega del premio conjuntamente con el Dr. Víctor Pidal de Bruker Española. En un emotivo discurso de agradecimiento el Dr. Miquel Solà agradeció a sus profesores y mentores, así como a todos sus colaboradores: «no basta con tener un grupo de investigación, tenemos que construir equipos de investigación. [...] Un grupo suma, es la suma de los miembros, un equipo multiplica. Convertir un grupo en un equipo es el verdadero camino hacia el éxito», y destacó la importancia del premio «la lista de quienes me preceden en esta distinción es verdaderamente impresionante. Formar parte de este grupo de insignes químicos es un privilegio que valoro enormemente».

Medalla de la RSEQ 2025, concedida al Prof. Miquel Solà y entregada por D. Víctor Pidal (Bruker Española) y D. Antonio M. Echavarren.

La sesión finalizó con la conferencia "Innovación en UCB para una atención sanitaria sostenible" impartida por el Dr. Pablo Talavera, director de Asuntos Médicos de UCB Iberia.

Conferencia del Dr. Pablo Talavera (UCB Iberia).

Otros actos en torno a la entrega de premios

Aprovechando la presencia en Valencia de un numeroso grupo de miembros de la RSEQ, han tenido lugar otros actos de divulgación científica. En particular, en el día previo a la ceremonia

© 2025 Real Sociedad Española de Química

de entrega de los premios el Prof. Miquel Solà, premiado con la Medalla de la RSEQ 2025, impartió una conferencia en el Instituto de Ciencia Molecular (ICMol – Universidad de Valencia) con el título "¿Qué hace que un compuesto sea aromático? La aromaticidad molecular en sus diferentes vertientes".

Asimismo, en un acto de acercamiento de la química a la sociedad, el Prof. Antonio M. Echavarren Pablos, presidente de la RSEQ, impartió una conferencia con el título "Sobre Química y «Químicos»" dirigida a los estudiantes de bachillerato del Instituto de Educación Secundaria de Sedaví (Valencia).

Entrega de los Premios de Investigación RSEQ–Lilly 2025

La Real Sociedad Española de Química (RSEQ), en colaboración con Lilly, ha celebrado la entrega de los Premios de Investigación 2025, destinados a reconocer la excelencia científica y a impulsar la carrera investigadora de jóvenes investigadores en las primeras etapas de su trayectoria profesional.

En esta edición, los Premios de Investigación para alumnos de doctorado han recaído en Helena Fernández (Universidad de Oviedo), Julio Puigcerver (Universidad de Murcia) y María Martín (Universidad Autónoma de Madrid), en reconocimiento a la calidad y relevancia de sus tesis doctorales en los ámbitos de la Química Orgánica, Farmacéutica y Analítica, respectivamente.

Asimismo, el Premio *Early Career Researcher*, concedido a investigadores en una etapa inicial de su carrera independiente, ha sido otorgado a Isabel Abánades Lázaro (Universitat de València) por su trabajo en el desarrollo de materiales porosos avanzados (MOFs) con aplicaciones en salud, medioambiente y catálisis.

Durante el mismo acto, Anabel Sánchez Merino (*St. Jude Children's Research Hospital*) recibió el premio para investigadores noveles de la Sociedad Española de Química Terapéutica (SEQT) por su investigación titulada *Development of new microbiota-inspired compounds for the validation of NPM1 protein as a therapeutic target for acute myeloid leukemia.*

De izquierda a derecha, Julio Puigcerver, doctorando de la Universidad de Murcia; María José Lallena, directora del Centro de I+D de Lilly; María Martín, de la Universidad Autónoma de Madrid; Helena Fernández, de la Universidad de Oviedo, e Isabel Abánades, Premio *Early Career Researcher*.

Reunión de las Sociedades Químicas Europeas (*Chemistry Europe*)

Entre los días 1 y 3 de octubre de 2025 se celebró en la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid la reunión anual de las sociedades químicas europeas que integran el consorcio *Chemistry Europe*, del cual la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) es miembro fundador. El encuentro reunió a los representantes de las dieciséis sociedades químicas más importantes de Europa.

El acto de apertura contó con la participación de la Dra. Sonsoles Martín Santamaría, Secretaria General de la RSEQ, y de la Decana de la Facultad de Ciencias Químicas, María Teresa Villalba. En sus intervenciones destacaron la importancia de reforzar la interacción entre los profesionales de la química en un momento de profundos cambios tecnológicos, así como los vínculos históricos entre la RSEQ y la Facultad, que datan de principios del siglo XX, cuando la Real Sociedad Española de Física y Química estableció su sede en la primera planta de la facultad (entonces Facultad de Ciencias).

La reunión, presidida por la RSEQ a través de la profesora Mar Gómez Gallego, representante española en *Chemistry Europe*, incluyó diversas ponencias centradas en el impacto de las nuevas herramientas tecnológicas en las publicaciones científicas, tanto para autores como para revisores. Asimismo, se debatió el papel esencial que desempeñan las sociedades científicas para promover la cooperación entre profesionales de la química a nivel nacional e internacional.

Chemistry Europe es una iniciativa conjunta de las principales sociedades químicas europeas para impulsar proyectos comunes y fortalecer la comunicación científica. La RSEQ, como miembro fundador del consorcio, es además coproprietaria de un portfolio de veinte revistas científicas que abarcan todas las áreas de la química, en formatos abierto, híbrido y tradicional. Este modelo editorial, desarrollado junto con Wiley VCH, promueve valores de integridad, diversidad y cooperación, con el objetivo de facilitar la publicación de investigación de calidad y mejorar el acceso de los investigadores a los datos científicos.

Sociedades participantes:

- Real Sociedad Española de Química (RSEQ).
- *German Chemical Society (Gesellschaft Deutscher Chemiker, GDCh).*
- *Royal Netherlands Chemical Society (Koninklijke Nederlandse Chemische Vereniging, KNCV).*
- *Société Chimique de France (SCF).*

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2106

Participantes en la reunión anual de *Chemistry Europe* celebrada en la Facultad de Ciencias Químicas de la UCM.

- *Italian Chemical Society (Società Chimica Italiana, SCI).*
- *Austrian Chemical Society (Österreichische Chemische Gesellschaft, GÖCH).*
- *Swiss Chemical Society (SCS).*
- *Swedish Chemical Society (Svenska Kemisamfundet).*
- *Hungarian Chemical Society (Magyar Kémikusok Egyesülete, MKE).*
- *Slovak Chemical Society (Slovenská Chemická Spoločnosť, SChemS).*
- *Association of Greek Chemists (Énosi Ellínon Chimikón, EEX).*
- *Portuguese Chemical Society (Sociedade Portuguesa de Química).*
- *Royal Flemish Chemical Society (Koninklijke Vlaamse Chemische Vereniging, KVCV).*
- *Royal Society of Chemistry Belgium (Société Royale de Chimie, SRC).*
- *Czech Chemical Society (Česká společnost chemická, ČSCH).*

Renovación del equipo editorial de Anales de Química de la RSEQ

Acompañando al proceso de renovación de la Junta de la Real Sociedad Española de Química, se ha llevado a cabo una renovación parcial del Comité Editorial de Anales de Química. Dejan de formar parte de él los profesores Fernando Cossío, Alfonso Salinas Castillo, Rolando Ángel Spanevello y Otilia Val Castillo, quienes a lo largo de los últimos años han contribuido de manera muy notable a mantener la actividad y la calidad científica de la revista. Desde aquí les expresamos nuestro agradecimiento por su dedicación y compromiso.

Se incorporan como editores asociados:

- **Carola Gallo-Rodríguez**, CIHIDECAR-UBA-CONICET, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires (Argentina).
- **Ingrid Montes**, Professor of Chemistry, University of Puerto Rico – Campus Río Piedras.
- **Elena Pazos Chantrero**, CICA – Centro Interdisciplinar de Química e Bioloxía & Departamento de Química, Facultade de Ciencias, Universidade da Coruña.
- **Ángel Ríos Castro**, Departamento de Química Analítica y Tecnología de los Alimentos, Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas, Instituto Regional de Investigación Científica Aplicada (IRICA), Universidad de Castilla-La Mancha.
- **Carla Casadevall**, Departamento de Química Física, Universitat Rovira i Virgili, Instituto Catalán de Investigación Química (ICIQ).

De izquierda a derecha y de arriba a abajo: Dra. Carola Gallo-Rodríguez, Dra. Ingrid Montes, Dra. Elena Pazos Chantrero, Dr. Ángel Ríos Castro y la Dra. Carla Casadevall.

Damos la bienvenida a los nuevos miembros del Comité Editorial, confiando en que su experiencia y visión contribuirán al desarrollo de futuras etapas de la revista.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

NOTICIAS GRUPOS ESPECIALIZADOS

Celebración de la XLIII Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica (GEQO) y entrega de los Premios GEQO 2025

El 3 de octubre de 2025 se celebró la XLIII reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica de la RSEQ (GEQO) en su formato de jornada-simposio en el rectorado de la Universidad de Alcalá. Durante la jornada, en la que participaron alrededor de 70 investigadores del área, se entregaron los premios GEQO 2025 a:

Arjan Kleij, Medalla Rafael Usón 2025, por sus excepcionales aportaciones al campo de la química organometálica, en particular a los acoplamientos carbono-carbono catalizados por metales de transición y la fijación de CO_2 siguiendo los principios de la sostenibilidad.

Laura Rodríguez Raurell, Premio a la Excelencia Investigadora, por sus recientes contribuciones al uso de compuestos de metales de transición en la creación de materiales con propiedades luminiscentes.

Fabio Juliá Hernández, Premio Jóvenes Investigadores 2025, por su labor investigadora independiente y su liderazgo en el campo de las reacciones fotoquímicas catalizadas por complejos de hierro en la creación de nuevos enlaces carbono-carbono y carbono-heteroátomo.

La jornada comenzó con la intervención de Rafael Gramage-Doria, investigador de la Universidad de Rennes y premio GEQO a joven investigador de 2024, que habló sobre enfoques supramoleculares para realizar transformaciones sostenibles en catálisis metálica homogénea. Laura Rodríguez Raurell, de la Universidad de Barcelona, habló sobre el control de las emisiones lumínicas de complejos organometálicos de oro y platino para sus aplicaciones en fototerapia o en dispositivos OLED. Fabio Juliá Hernández, de la Universidad de Murcia, abordó el desarrollo de métodos sintéticos sostenibles mediante la activación con luz de complejos de hierro con ligandos oxalato. Por último, Arjan Kleij, del ICIQ, describió la síntesis estereoselectiva potenciada por la catálisis con metales de transición en transformaciones en las que participa el dióxido de carbono.

Entrega de los Premios GEQO 2025. De izquierda a derecha: Dr. Arjan Kleij (Medalla Rafael Usón), Dra. Laura Rodríguez-Raurell (Premio a la Excelencia Investigadora) y Dr. Fabio Juliá (Premio Jóvenes Investigadores).

Junto a ellos, algunos estudiantes de doctorado y personal investigador posdoctoral del GEQO tuvieron la oportunidad de presentar sus investigaciones en forma de comunicación flash.

Foto de los asistentes a la XLIII Reunión del GEQO.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2106

OTRAS NOTICIAS

Los profesores Urtiaga y Serrano nombrados Académicos Correspondientes de la RAC

El pasado 12 de noviembre, la Sección de Ciencias Físicas y Químicas de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales de España celebró una doble sesión científica de recepción de Académicos Correspondientes en la que la Prof. Ana María Urtiaga, de la Universidad de Cantabria, y el Prof. David Serrano Granados, del Instituto IMDEA Energía y Universidad Rey Juan Carlos, ambos miembros de la RSEQ y del Grupo Especializado de Ingeniería Química, recibieron su diploma acreditativo.

El Prof. Serrano pronunció la conferencia titulada "Los residuos plásticos como recurso energético y fuente de materias primas" y la Prof. Ana María Urtiaga impartió la conferencia "Tecnología de membranas para un uso eficiente de los recursos". La contestación corrió a cargo del Prof. Arturo Romero Salvador, miembro de la RSEQ y presidente de Honor del Grupo Especializado de Ingeniería Química.

Los Profs. Ana María Urtiaga y David Serrano, nuevos Académicos Correspondientes de la Real Academia de Ciencias.

Larry Falvello, Doctor Honoris Causa por la Universidad Pavol Jozef Šafárik de Košice (Eslovaquia)

El Profesor Lawrence R. (Larry) Falvello, catedrático de Química Inorgánica de la Universidad de Zaragoza, ha sido distinguido con el título de Doctor Honoris Causa por la Universidad Pavol Jozef Šafárik (UPJŠ) de Košice en Eslovaquia. El acto académico tuvo lugar el pasado 21 de octubre de 2025 en el Auditorio Histórico del Rectorado de la UPJŠ en Košice y estuvo presidido por el Rector Daniel Pella, quien le hizo entrega del diploma y medalla acreditativos de la distinción. La ceremonia contó con la presencia de los miembros del Consejo Internacional de la UPJŠ, de otros destacados representantes de la UPJŠ y de otras universidades y de la Academia Eslovaca de Ciencias. Asimismo, numerosos integrantes de la comunidad académica y antiguos alumnos del Profesor Falvello también estuvieron presentes.

El Profesor Falvello es un experto internacionalmente reconocido en el campo de la cristalografía de rayos X y de neutrones y la química de la coordinación. Mantiene desde hace dos décadas una relación muy estrecha con la UPJŠ, concretamente con el grupo de investigación del Profesor Juraj Černák, que incluye estancias de investigación, proyectos conjuntos y la formación de estudiantes de posgrado.

Prof. Larry Falvello.

El Profesor Roman Soták, Decano de la Facultad de Ciencias de la UPJŠ, que se encargó de pronunciar el laudatio, glosó los importantes aportes científicos del Profesor Falvello y resaltó su papel como mentor y guía de jóvenes científicos y la generosidad con la que ha compartido sus conocimientos y su tiempo con estudiantes y colegas. Destacó que la colaboración entre las Universidades de Zaragoza y la UPJŠ ha resultado fructífera, duradera y mutuamente enriquecedora, de modo que, en común, forman a nuevos investigadores, desarrollan proyectos y construyen puentes entre ambas instituciones, creando un entorno en el que los estudiantes aprenden a pensar críticamente, trabajar con precisión y comunicarse internacionalmente.

La Facultad de Ciencias de la UPJŠ en Košice ya otorgó al Profesor Falvello una medalla de bronce (2013) y una de oro (2018) por su aportación al desarrollo de los estudios de doctorado en la Facultad, por su cooperación científica y por su contribución a dar a conocer la UPJŠ en España, Estados Unidos y otros países.

El Profesor Falvello, por su parte, agradeció profundamente el honor otorgado. Comentó sus inicios científicos en el campo de la cristalografía y también la necesidad de explorar nuevas áreas de investigación, en su caso el estudio de propiedades magnéticas y la preparación de nuevos compuestos. Recalcó la importancia de la colaboración entre instituciones y se congratuló de los excelentes resultados de su colaboración con la UPJŠ, como ejemplo para el desarrollo profesional de los jóvenes científicos.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

200 años del benceno en San Sebastián

El pasado 12 de noviembre de 2025, el Centro Carlos Santamaría (EHU) de San Sebastián acogió la jornada *200 Years of Benzene*, un encuentro científico que celebró los dos siglos transcurridos desde el descubrimiento del benceno y su impacto en la química moderna.

El programa contó con conferencias plenarias de Nazario Martín (UCM – IMDEA Nanociencia), Amaia Zurutuza (Graphenea), Fernando Cossío (DIPC – EHU) y Martina Corso (CFM – CSIC), que abordaron temas como la evolución del concepto de aromaticidad, el paso del benceno al grafeno, la reactividad molecular asociada a compuestos aromáticos y las técnicas avanzadas de imagen de nanoestructuras basadas en anillos benzenoides. La jornada estuvo presidida por Aurelio Mateo-Alonso (POLYMAT–UPV/EHU).

El evento reunió a un amplio grupo de investigadores y estudiantes y fue organizado con el apoyo de POLYMAT, Ikerbasque, UPV/EHU, diversas secciones de la RSEQ y el *European Innovation Council*.

Participantes de la jornada *200 Years of Benzene*, celebrada el 12 de noviembre de 2025 en el Centro Carlos Santamaría (EHU) de San Sebastián.

XXV aniversario del Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (TCCM)

Para celebrar y conmemorar el XXV aniversario del programa formativo de Química Teórica y Modelización Computacional (TCCM) se ha organizado un volumen especial de la revista *Theoretical Chemistry Accounts*, fundada en 1962 por Springer Nature y considerada la publicación más longeva de su área de conocimiento.

Concebido inicialmente como una serie de cursos de doctorado, el TCCM se ha convertido en un programa de máster y doctorado de gran éxito que ha formado a generaciones de científicos y científicas de todo el mundo, muchos de los cuales ocupan hoy posiciones destacadas en los ámbitos académico, industrial y empresarial. A lo largo de estos años, el programa ha construido una comunidad internacional sólida y dinámica que reúne a profesores, investigadores, profesionales de la industria y estudiantes especializados en química teórica y computacional.

Con motivo de este número especial, se invita calurosamente a los lectores de *Anales de Química* a presentar contribuciones sobre cualquiera de los temas relacionados con esta área de trabajo, de gran actualidad y en estrecha sintonía con el resto de disciplinas químicas.

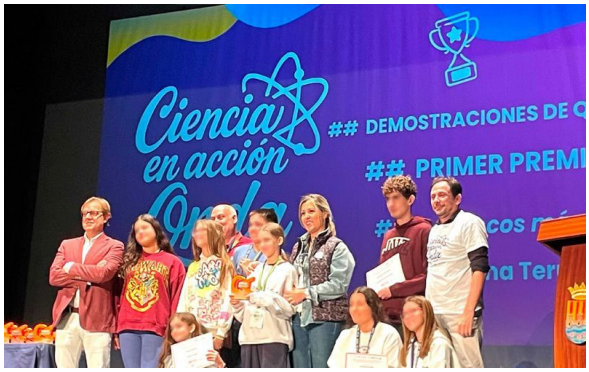
Flyer del volumen especial de *Theoretical Chemistry Accounts* con motivo del XXV aniversario del programa TCCM.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2106

Ciencia en Acción 2025: premios en la categoría 'Demostraciones de Química'

La fase final de la XXVI edición del concurso internacional Ciencia en Acción se ha celebrado en Onda (Castellón) entre el 7 y el 9 de noviembre de 2025. Se trata de un programa dirigido a estudiantes, profesores, investigadores y divulgadores de la comunidad científica que busca presentar la ciencia de una manera atractiva y motivadora de modo que los jóvenes y el gran público se interesen por ella.



Participantes de la XXVI edición del concurso internacional Ciencia en Acción.

La Real Sociedad Española de Química (RSEQ) cofinancia y participa en la concesión de estos galardones que premian, agrupados en 14 modalidades, trabajos de todas las disciplinas científicas. En esta edición, la RSEQ estuvo representada por los Profs. Óscar Rodríguez Montoro y Miguel Ángel González González que han formado parte del jurado.

En la modalidad "Demostraciones de Química", la más directamente vinculada a la RSEQ, el Primer Premio fue otorgado al trabajo titulado "Refrescos mágicos" coordinado por la Prof.ª Gloria Ruiz García del Centro Educativo Los Olivos de Molina de Segura, Murcia, por la originalidad, el rigor científico, su potencial divulgador e impacto social de acercar la Química a personas de todas las edades, despertando su interés mediante una experiencia amena y divertida.

Asimismo, se concedieron en esta modalidad dos Menciones de Honor para los siguientes trabajos:

- *La química de los olores de antaño*, desarrollado por Antonio Marcos Naz del IES Gran Capitán – RED FABIDI, Córdoba.
- *Estudio del efecto del agua destilada de los aires acondicionados en las resinas intercambiadoras de los cartuchos de jarras purificadoras* de Juan Jiménez Martín del IES Gran Capitán – RED FABIDI, Córdoba.

España gana la XXIX Olimpiada Iberoamericana de Química 2025

El alumno Carlos Calderón Alba (Complejo Preuniversitario Mas Camarena de Paterna, Valencia) ha quedado el primer clasificado y ganador absoluto de la XXIX Olimpiada Iberoamericana de Química (OIAQ'2025).

El resto de integrantes de la delegación española también lograron excelentes resultados. Víctor Zhou (Colegio Internacional Ausiàs March, Picassent, Valencia) obtuvo medalla de oro y fue reconocido por el mejor examen teórico del certamen, mientras que José Martín Daries (Escuelas San José – Jesuitas, Valencia) consiguió medalla de bronce.

La Olimpiada Iberoamericana de Química es un certamen supranacional de gran prestigio, que se celebra anualmente desde hace 30 años. Esta edición, celebrada en México del 26 al 31 de octubre de 2025, tuvo como sedes la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México (Ciudad de México) y la Universidad Autónoma del Estado de México (Cuernavaca, Morelos). Contó con la participación de 38 estudiantes y 20 docentes procedentes de 13 países iberoamericanos: Brasil, Chile, Colombia, Costa Rica, Cuba, Ecuador, El Salvador, España, Honduras, Panamá, Perú, Portugal y México.

El desempeño de la delegación española ha sido sobresaliente y se ha traducido en que España haya ganado por primera vez este importante certamen. Queremos dar las gracias al resto de la delegación (mentores): Prof. María del Mar Ramos Gallego y Prof. Javier Recio Ramos, así como al resto de profesores involucrados en la preparación del equipo olímpico español de química.

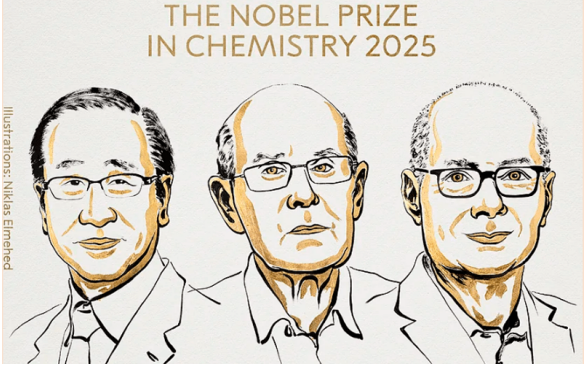
La formación específica para el evento tuvo lugar el pasado verano en la Escuela Superior de Ciencias Experimentales y Tecnología de la Universidad Rey Juan Carlos en cuyos laboratorios de química se realizó la preparación práctica bajo la supervisión de la profesora María del Mar Ramos Gallego y el apoyo, entre otros colaboradores, de la técnico de laboratorio Carmen Garrido Gómez.

Los miembros de la delegación española con sus medallas y diplomas.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Premio Nobel de Química 2025: "Metal-organic frameworks"

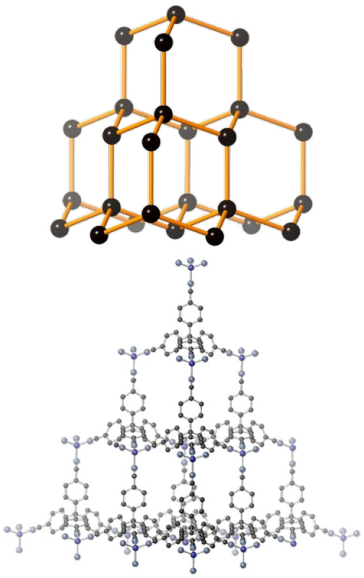
El Premio Nobel de Química de 2025 ha sido otorgado a Susumu Kitagawa, Richard Robson y Omar M. Yaghi por el desarrollo de redes metal orgánicas, *metal organic frameworks*, MOFs, una clase de sólidos cristalinos porosos construidos a partir de iones metálicos y ligandos orgánicos. Que los átomos se unan para formar moléculas es algo que se aprende ya en educación secundaria, cuando se explica cómo los distintos elementos químicos comparten densidad electrónica, forman enlaces y dan lugar a nuevas entidades químicas. Es la química molecular básica, elementos discretos que se combinan para originar moléculas discretas. Pero ¿por qué detenerse ahí? ¿por qué no permitir que esas moléculas se enlacen también entre sí y generen estructuras extensas y periódicas? ¿y, además, hacerlo de forma organizada, dirigida hacia arquitecturas y topologías concretas?



Susumu Kitagawa (izq), Richard Robson (centro) y Omar M. Yaghi (dcha) Fuente: Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach.

Puede que algo parecido pensara Richard Robson cuando a mediados de los años setenta construía modelos tridimensionales de bolas para sus clases a estudiantes de primer curso en la Universidad de Melbourne, en Australia.[1] Tardó todavía más de una década en poder llevar esa idea al laboratorio, pero finalmente, siguiendo conceptos básicos de química de coordinación y escogiendo con cuidado tanto las moléculas orgánicas como los centros metálicos, consiguió lo que buscaba. Sintetizó y demostró, mediante difracción de rayos X, la formación de un compuesto de coordinación cuya estructura se extiende tridimensionalmente a través de enlaces de coordinación, generando una red topológicamente equivalente a la del diamante (Figura 2), donde los nodos tetraédricos los ocupan átomos de cobre y los átomos de carbono centrales del ligando tetranitrilo que había diseñado para este propósito.[2]

Siguiendo ese primer ejemplo, Robson sintetizó otros compuestos cuyas estructuras cristalinas también se extienden mediante enlaces de coordinación para dar lugar a redes con topologías específicamente seleccionadas en función de la geometría y conectividad de los ligandos orgánicos y los centros metálicos. Por ejemplo, ligandos con geometría cuadrada, como derivados de porfirinas,[3] combinados con cationes metálicos tetraédricos, permiten obtener redes topológicamente equivalentes a la de sólidos inorgánicos como la cooperita. La descripción de estas estructuras de coordinación se apoya en



Representación de una red tipo diamante, formada por nodos tetraédricos (arriba), y representación del primer compuesto sintetizado por Robson en 1989 con este mismo tipo de red (abajo).

una aproximación claramente topológica, en la que se identifican nodos y conectores y se clasifican las redes resultantes según su conectividad. En este sentido, enlaza de forma natural con los trabajos clásicos de A. F. Wells sobre estructuras inorgánicas,[4] en los que ya se había establecido un lenguaje riguroso para describir redes cristalinas en términos de cómo se conectan sus átomos y no solo de su composición química. Robson traslada esa forma de pensar al dominio de la química de coordinación, mostrando que también aquí es posible hablar de redes con topologías bien definidas y comparables a las de sólidos inorgánicos.

Las implicaciones de estos primeros compuestos son profundas. Por un lado, muestran que es posible sintetizar y cristalizar compuestos de coordinación cuyas estructuras se extienden realmente en tres dimensiones, más allá de las moléculas discretas. Por otro, las redes de coordinación generadas ocupan solo una fracción del volumen total del cristal, mientras que el resto del espacio está lleno de contraiones y moléculas de disolvente. Ese espacio interno, que aparece de forma casi inevitable al unir nodos y conectores, sugiere ya la posibilidad de cavidades accesibles, de poros que algún día podrían utilizarse para alojar otras moléculas. Es, en esencia, la intuición temprana de que se puede acceder al espacio vacío de sólidos metal-orgánicos.

En la década de 1990 esta intuición se convierte en una cuestión experimental concreta, abordada casi en paralelo por dos grupos que acabarán marcando el campo, el de Susumu Kitagawa en Japón y el de Omar M. Yaghi en Estados Unidos. Ambos parten de compuestos de coordinación con estructuras extensas y se preguntan si es posible retirar o intercambiar los huéspedes del interior de los cristales y demostrar que el espacio vacío resultante sigue siendo accesible a otras moléculas. Precisamente, Yaghi quien acuñó el término "*metal-organic framework*", MOF, demostró en 1995 que los poros pueden ser

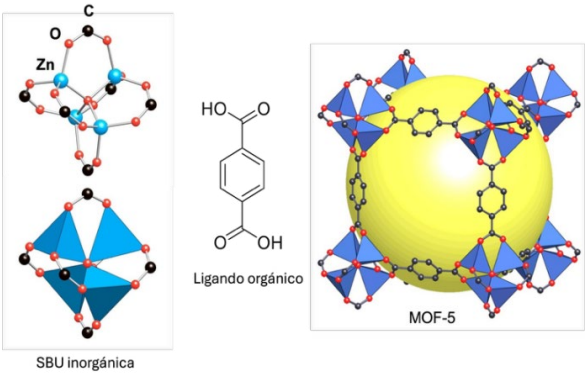
© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2106

efectivamente accesible de forma selectiva a otras moléculas.[5] En 1997, Kitagawa demostró que las cavidades de la estructura de un material pueden ser evacuadas, y ocupadas por gases a presiones de hasta 30 atm, manteniendo la estructura cristalina tras ciclos de adsorción y desorción.[6] Esta fue una demostración temprana, muy influyente, de que ciertas redes de coordinación se comportan como sólidos microporosos tradicionales, aunque caracterizadas todavía en el régimen de alta presión. Poco después, Yaghi y su grupo son capaces de medir isotermas de adsorción de nitrógeno en el régimen clásico de caracterización de sólidos microporosos, a baja temperatura y presiones relativas moderadas, y muestran isotermas reversibles, que permiten determinar áreas superficiales específicas y volúmenes de poro comparables a los de algunas zeolitas.[7] Con este trabajo se establece de manera explícita la existencia de microporosidad permanente en MOFs, accesibles a gases en condiciones similares a las empleadas para los tamices moleculares inorgánicos. Vistos en conjunto, estos estudios de Kitagawa y Yaghi cierran el círculo iniciado con las redes de Robson, al demostrar que las estructuras de compuestos de coordinación no solo pueden diseñarse con una topología determinada, sino que pueden vaciarse de forma controlada para dar sólidos microporosos robustos, con cavidades accesibles a moléculas huésped, y propiedades de adsorción cuantificables. A partir de aquí, la cuestión deja de ser si tales materiales existen, y pasa a ser cómo diseñarlos de forma racional y cómo aprovechar sus poros para funciones específicas, un cambio de paradigma en el campo de la química de coordinación, en el que la química reticular propuesta por Yaghi tendrá un papel central, y donde sin duda destacaron materiales como el icónico MOF-5,[8] (y su famosa esfera amarilla ilustrando el volumen vacío de la estructura), o HKUST-1,[9] que mostraron valores sin precedentes de superficie específica, con varios miles de metros cuadrados por gramo, lo que despertó un enorme interés por los MOFs, a nivel académico, pero ya también a nivel industrial.

El paso de ligandos neutros a ligandos aniónicos supuso un hito fundamental en el desarrollo de un campo que ya empezaba a atraer una atención creciente. Los primeros MOFs cuyas estructuras extensas son neutras se obtuvieron mediante el uso de ligandos carboxílicos, cuyos grupos carboxilato compensan la carga de los cationes metálicos y permiten formar clústeres inorgánicos bien definidos. En manos de Yaghi, estos clústeres metal carboxilato dejaron de ser simples detalles de la estructura cristalina para convertirse en verdaderas unidades de construcción inorgánicas, rígidas y repetitivas, que proporcionan direccionalidad y que pueden aparecer en diferentes arquitecturas (Figura 3). Así, el concepto de unidad de construcción secundaria (SBU), ya utilizado en el campo de las zeolitas, se adopta para el estudio estructural de MOFs, pero ahora cada SBU se interpreta y simplifica como un nodo con una geometría y una conectividad determinadas, y cada ligando policarboxilato como un conector que une esos nodos en una red extendida.

A partir de esta idea, Yaghi formula de manera explícita el concepto de química reticular.[10] La estructura cristalina de un MOF puede ser deconstruida topológicamente para identificar los nodos y conectores, y gracias a ello es posible utilizar este conocimiento para combinar bloques de construcción con geometrías conocidas y dar lugar a estructuras con topologías específicas. Esta aproximación permite controlar no solo la conectividad global de la red cristalina, sino también el tamaño y la forma de los poros que se generan al unir los bloques de construcción, gracias a principios como el de isoreticularidad, según el cual distintos MOFs pueden compartir la misma topología subyacente, aunque se modifique su composición química.[11] El concepto de expansión isoreticular fue rápidamente llevado a la práctica para obtener materiales con superficies específicas cada vez mayores y tamaños de poro controlables de manera sistemática mediante la utilización de ligandos de longitud creciente.[12] Además del tamaño de los poros, la accesibilidad a distintas moléculas huésped, así como la polaridad y el entorno químico del poro, pueden ajustarse sin alterar el esqueleto cristalino fundamental. A ello se suma la modificación postsintética, que permite introducir nuevos grupos funcionales en los ligandos ya anclados en la red o incluso intercambiar parcialmente los iones metálicos en los nodos, añadiendo un nivel adicional de programación de propiedades. Con este conjunto de reglas de diseño y de herramientas sintéticas, la química reticular impulsada por Yaghi convierte a los MOFs en una plataforma modular para el diseño racional de sólidos porosos y establece un marco conceptual que se ha extendido también a otras familias de materiales, como las redes covalentes orgánicas.



Representación de las unidades de construcción moleculares del MOF-5. A la derecha de la imagen se muestra la representación del mismo, incluyendo la esfera amarilla utilizada para representar el espacio vacío de la estructura.

De forma complementaria a esta formalización de la química reticular, Kitagawa y su grupo aportaron una visión centrada en cómo responden estos sólidos porosos cuando se vacían o cuando interaccionan con moléculas huésped.[13] Para describir de manera sistemática este comportamiento, Kitagawa propuso una clasificación por generaciones, que distingue entre materiales que colapsan al retirar los huéspedes, primera generación, redes que conservan de forma permanente su porosidad tras los procesos de adsorción y desorción, segunda generación, y estructuras capaces de cambiar de volumen o forma en respuesta a estímulos, como la difusión de moléculas en sus canales, sin perder la conectividad esencial de la red, tercera generación. Esta última generación introduce de manera explícita la flexibilidad y el dinamismo en el estudio de estos materiales, y se relaciona con conceptos como el de respiración estructural,[14] en el que el sólido se contrae o se expande de manera reversible en respuesta a estímulos externos como la presión, la temperatura o la presencia de determinadas moléculas huésped, un comportamiento que sería estudiado y popularizado en distintas familias de MOFs.

Esta perspectiva pone el acento no solo en la arquitectura de los poros, sino también en su dinámica, y subraya que el diseño de MOFs debe considerar tanto la topología de la estructura en estado ideal como los caminos por los que esta puede deformarse o reorganizarse en respuesta a estímulos, o durante el desempeño de su función. Así, en muchos de los materiales descritos por Kitagawa, la adsorción de moléculas

© 2025 Real Sociedad Española de Química

no es un proceso pasivo, sino que desencadena transiciones de fase entre formas cerradas y abiertas, o induce cambios cooperativos que se reflejan en isotermas con escalones y fenómenos de apertura de puertas en los poros. La idea de que un sólido cristalino puede comportarse como un sistema adaptativo, que reorganiza su estructura interna para optimizar la interacción con las moléculas huésped, fue paradigmática y ha sido fundamental para entender y explotar el carácter dinámico de los MOFs en aplicaciones como la separación, el almacenamiento o el transporte molecular.

La combinación de porosidad elevada, accesible y ajustable con un entorno químico interno programable hizo que los MOFs ocuparan un lugar privilegiado para abordar retos relacionados con la gestión de moléculas pequeñas, desde el almacenamiento, captura y separación de gases hasta aplicaciones relacionadas con el agua. La posibilidad de diseñar MOFs tamaños de poro y grupos funcionales específicos, capaces de discriminar gases ha permitido obtener materiales con capacidades de adsorción muy elevadas y con selectividades difíciles de alcanzar con sólidos porosos tradicionales, y su cristalinidad ha hecho posible estudiar a nivel atómico los mecanismos de captura y las estrategias de regeneración. Otros MOFs se han diseñado para capturar vapor de agua incluso en condiciones de humedad relativa muy baja o para procesos de purificación a través de la adsorción selectiva de contaminantes. A estos ejemplos se suman campos tan diversos como la catálisis, la detección de moléculas mediante cambios en propiedades ópticas o eléctricas, o el uso de MOFs en aplicaciones biomédicas, como la entrega selectiva de fármacos, de modo que la lista de posibles aplicaciones sigue creciendo a medida que se incorporan nuevas combinaciones de centros metálicos, ligandos orgánicos y estrategias de síntesis.

Pese a que el desarrollo de los MOFs ha venido de la mano de sus aplicaciones, el Premio Nobel de Química de 2025 reconoce, más que una aplicación concreta, un cambio de mirada sobre los compuestos de coordinación y sobre los sólidos porosos en general. Antes de los trabajos de Robson, Kitagawa y Yaghi, los complejos de coordinación se entendían sobre todo como entidades moleculares discretas, en disolución o presentes en el cristal por fuerzas débiles, y el foco estaba en la estructura y la reactividad de cada molécula individual. La historia que culmina con este premio transforma esa visión y propone considerar átomos metálicos y moléculas orgánicas como unidades básicas de construcción de redes extensas formadas por enlaces fuertes, capaces de generar arquitecturas cristalinas con topologías bien definidas.

El mérito que se reconoce ahora no reside por tanto en un dispositivo o en un proceso específico, por importantes que estos puedan ser, sino en haber proporcionado a la comunidad científica un lenguaje, conocimiento y un conjunto de herramientas para diseñar sólidos porosos casi a la carta.

Los trabajos de Robson, Kitagawa y Yaghi han convertido aquello que en los años noventa podía parecer una curiosidad estructural en un auténtico arsenal de herramientas químicas para la ciencia de materiales. Hoy la pregunta ya no es para qué sirven los MOFs, sino, ante un problema concreto, qué MOF se puede utilizar o diseñar para abordarlo. Ese cambio de pregunta resume, en buena medida, el cambio de paradigma que este Nobel pone en primer plano.

Bibliografía

[1] R. Robson, *The Chemical Record* **2024**, *24* (5), e202400038, https://doi.org/10.1002/tcr.202400038.

[2] B. F. Hoskins, R. Robson, I *J. Am. Chem. Soc.* **1989**, *111* (15), 5962-5964, https://doi.org/10.1021/ja00197a079.

[3] B. F. Abrahams, B. F. Hoskins, D. M. Michail, R. Robson, *Nature* **1994**, *369* (6483), 727-729, https://doi.org/10.1038/369727a0.

[4] A. F. Wells, *Three-Dimensional Nets and Polyhedra*, Wiley, New York, **1977**.

[5] O. M. Yaghi, G. Li, H. Li, *Nature* **1995**, *378* (6558), 703-706, https://doi.org/10.1038/378703a0.

[6] M. Kondo, T. Yoshitomi, H. Matsuzaka, S. Kitagawa, K. Seki, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1997**, *36* (16), 1725-172, https://doi.org/10.1002/anie.199717251.

[7] H. Li, M. Eddaoudi, T. L. Groy, O. M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.* **1998**, *120* (33), 8571-8572, https://doi.org/10.1021/ja981669x.

[8] H. Li, M. Eddaoudi, M. O'Keeffe, O. M.; Yaghi, *Nature* **1999**, *402* (6759), 276-279, https://doi.org/10.1038/46248.

[9] S. S.-Y. Chui, S. M.-F. Lo, J. P. H. Charmant, A. G. Orpen, I. D. Williams, *Science* **1999**, *283* (5405), 1148-1150, https://doi.org/10.1126/science.283.5405.1148.

[10] O. M Yaghi, M. O'Keeffe, N. W. Ockwig, H. K. Chae, M. Eddaoudi, J. Kim, *Nature* **2003**, *423* (6941), 705-714, https://doi.org/10.1038/nature01650.

[11] M. Eddaoudi, J. Kim, N. Rosi, D. Vodak, J. Wachter, M. O'Keeffe, O. M. Yaghi, *Science* **2002**, *295* (5554), 469-472, https://doi.org/10.1126/science.1067208.

[12] H. Deng, S. Grunder, K. E. Cordova, C. Valente, H. Furukawa, M. Hmadeh, F. Gándara, A.C. Whalley, Z. Liu, S. Asahina, H. Kazumori, M. O'Keeffe, O. Terasaki, J.F. Stoddart, O. M. Yaghi, *Science* **2012**, *336* (6084), 1018-1023, https://doi.org/10.1126/science.1220131.

[13] S. Kitagawa, M. Kondo, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1998**, *71* (8), 1739-1753, https://doi.org/10.1246/bcsj.71.1739.

[14] C. Serre, F. Millange, C. Thouvenot, M. Noguès, G. Marsolier, D. Louër, G. Férey, *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *124* (45), 13519-13526, https://doi.org/10.1021/ja0276974.

Felipe Gándara

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid - CSIC

© 2025 Real Sociedad Española de Química

https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2106

Anales de Química de la RSEQ
An. Quím. RSEQ, 2025, 121 (4), 364
https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2102
La revista de la Real Sociedad Española de Química

Obituario

In memoriam Prof. Miguel Ángel Miranda Alonso

El pasado 23 de octubre falleció de forma repentina el Profesor Miguel Ángel Miranda Alonso, catedrático recientemente jubilado de la Universitat Politècnica de València (UPV) e investigador del Instituto de Tecnología Química (ITQ).

Miguel Ángel se licenció en la Universidad de Valencia y completó su tesis doctoral en la Universidad Autónoma de Madrid, bajo la supervisión del Prof. Francisco Fariña, que fue también mi director de tesis. Miguel Ángel, desarrolló el trabajo experimental en el Instituto de Química Orgánica del CSIC, que dirigía el Profesor Fariña. Querría destacar que mis comienzos investigadores en ese grupo de investigación, seguramente el mejor en química orgánica de Madrid en la época, fueron más fáciles gracias a la ayuda que tanto Miguel Ángel Miranda como su buen amigo Tomás Torres me prestaron en todo momento. El pasado jueves 16 de octubre, estuve charlando un buen rato con Miguel Ángel, que me acompañó tras la entrega de Premios 2025 de la RSEQ en la Ciudad de las Artes y las Ciencias en Valencia.

Miguel Ángel Miranda Alonso.

Miguel Ángel ha sido autor de más de 500 publicaciones, dirigió 54 tesis doctorales y fue uno de los pioneros en España en el área de la fotoquímica orgánica. Fue presidente del Grupo Especializado de Fotoquímica de la RSEQ (GRUFO) entre 1995 y 1999, y de la Sociedad Europea de Fotobiología (ESP) entre 2007 y 2013 y organizador numerosas reuniones científicas en fotoquímica y fotobiología en España y el extranjero.

Miguel Ángel recibió el Premio Janssen-Cilag en Química Orgánica de la RSEQ en 2008, la 2010 *Theodor Förster Memorial Lectureship Award* de la Sociedad Química Alemana (grupo de Fotoquímica) y la Sociedad Bunsen de Química Física, la EPS *Award for Excellence in Photobiological Research (Medal of the European Society for Photobiology)* en 2017 y el Premio a una Carrera Distinguida de la RSEQ en 2018.

Con su partida no solo perdemos a un científico de una talla excepcional, sino también a una persona de una calidad humana difícil de igualar.

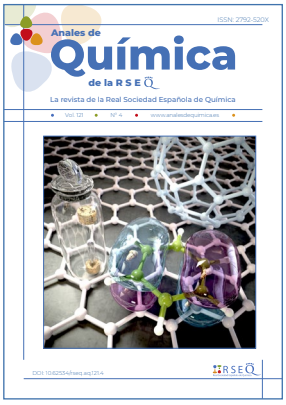
Antonio M. Echavarren
Presidente de la RSEQ

© 2025 Real Sociedad Española de Química

CÓMO CITAR: A.M. Echavarren. *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 364, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2102

Índice de autores

Anales de la Química de la RSEQ Volumen 121
ISSN: 2792-520X



ENSAYO

Chamizo, Antonio
Moléculas mononucleares o átomos en la enseñanza de la química, **2025**, *121 (1)* 173-178

Elguero, José
¡Qué grande es Avogadro!, **2025**, *121 (1)* 5

Pingarrón, José Manuel
Algunas reflexiones sobre la investigación y la transferencia de conocimiento y su impacto social, **2025**, *121 (4)* 273-276

ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

Caamaño Ros, Aureli
La evolución de la enseñanza de la química en la educación secundaria (1970-2025): una perspectiva desde Cataluña, **2025**, *121 (Extra.)* 231-237

Flores, Juan Carlos
Los estados de oxidación del vanadio: Experimentos a todo color, **2025**, *121 (3)* 165-172

Fuente Fernández, Almudena de la
Preguntas competenciales en la nueva PAU de Química y su utilidad como recurso didáctico, **2025**, *121 (Extra.)* 219-223

García Moríñigo, Mª. Jesús Olga
Véase, Peral Elena, Estela

González Galán, Carmen
Tecnecio: el metal que todos buscaban, **2025**, *121 (2)* 87-92

Guitart Mas, Fina
Véase, Caamaño Ros, Aureli

Hernández González, Olga
Véase, Peral Elena, Estela

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Molina Muñoz, Claudia Mei
Véase, Muñoz Molina, Nuria

Muñoz Molina, Nuria
Biotecnología y detergentes en la enseñanza de la Química, **2025**, *121 (4)* 251-256

Ortega Rodríguez, Pablo
Resonancia ludocognitiva en juegos educativos para la enseñanza de la Física y Química, **2025**, *121 (Extra.)* 224-230

Prada Pérez de Azpeitia, Fernando I. de
La química que se esconde en las tabletas efervescentes, **2025**, *121 (1)* 32-37
Un método sencillo para analizar el porcentaje de bioetanol en la gasolina: el test de la probeta
2025, *121 (4)* 329-335

Peral Elena, Estela
Investigación en Ciclos de Grado Básico: una estrategia motivadora para el estudio de las ciencias, **2025**, *121 (Extra.)* 246-250

Quílez, Juan
Errores sobre los criterios de espontaneidad y de equilibrio químico, **2025**, *121 (1)* 25-31
Retos en el currículum español de química de la enseñanza secundaria obligatoria y del bachillerato, **2025**, *121 (Extra.)* 238-245

Romero Muñiz, Carlos
Véase, González Galán, Carmen

Val Castillo, Otilia
Benceno: 200 años en el corazón de la Química, **2025**, *121 (Extra.)* 257-260

HISTORIA DE LA QUÍMICA

Cuevas González, Gabriel Eduardo
Véase, Pinto Cañón, Gabriel

Elguero, J.
50° aniversario del Instituto de Química Médica (IQM-CSIC), **2025,** *121 (1)* 38-41

Iruin, Juan J.
50 años de la Facultad de Química en Donostia / San Sebastián. De una iniciativa social a la semilla de una ciudad de Ciencia, **2025**, *121 (1)* 42-46

Matxain, Jon
Véase, Iruin, Juan J.

Moreno Martínez, Luis
El legado de Modesto Bargalló en España y México para la didáctica y la historia de la ciencia, **2025**, *121 (3)* 179-187

Pastor Valle, Jesús F.
Véase, Pastor Villegas, José

Pastor Villegas, José
Producción de carbón vegetal y de diamantes en Extremadura (España), **2025**, *121 (4)* 324-328

Pellón, Inés
Descubriendo al Faraday químico, el hombre que aisló el benceno, **2025**, *121 (4)* 336-341

Pinto Cañón, Gabriel
Vida y obra de Andrés Manuel del Río, el científico hispanomexicano que descubrió el vanadio, 2025, *121 (3)* 188-196

Quílez, Juan
Breve estudio histórico sobre el sentido del momento dipolar eléctrico en química, **2025**, *121 (1)* 57-61

Serrano Pérez, J
A todo color: los tintes a través de la historia, **2025**, *121 (1)* 47-56

Tascón, Juan M. D.
Las cuatro primeras décadas del Instituto Nacional del Carbón (INCAR) del CSIC (1946-1984), **2025**, *121 (4)* 342-351

INVESTIGACIÓN QUÍMICA

Alarcón, Erika
Véase, Caballero-Briones, Felipe

Amaya-Flórez, Andrés
Véase, R.-Galindo, Jordi

Arévalo, Alma
Hidrodesoxigenación catalítica aplicada a biomasa, **2025**, *121 (3)* 148-152

Arvizu-Rodríguez, Liliana E.
Véase, Caballero-Briones, Felipe

Barderas, Rodrigo
Véase, Campuzano, Susana

Barragán, Ana
El sueño de ver moléculas y sus reacciones químicas, **2025**, *121 (3)* 314-323

Bautista, Francisco
Véase, Caballero-Briones, Felipe

Benito Santiago, Sandra Edith
Véase, Caballero-Briones, Felipe

Caballero-Briones, Felipe
Investigaciones en Energía, Salud y Medio Ambiente en el contexto de los ODS, en Altamira, Tamaulipas, México, **2025**, *121 (3)* 153-164

Campos, Jesús
Véase, Corona, Helena

Campuzano, Susana
Pincelando nuevos horizontes en salud de precisión con tecnologías (bio)electroanalíticas vanguardistas, **2025**, *121 (1)* 11-18

Casado, Juan
200 Aniversario del descubrimiento del benceno y su papel en el 100 Aniversario de la mecánica cuántica, **2025**,*121 (4)* 277-291

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Corona, Helena
El modelo *Push-Pull* como estrategia de activación y estabilización molecular, **2025**, *121 (2)* 79-86

Cruz-Martínez, Felipe de la
Véase, Corona, Helena

Écija, David
Véase, Barragán, Ana

Espinosa-Faller, Francisco Javier
Véase, Caballero-Briones, Felipe

Fernández-García, Jesús M.
Véase, Lión-Villar, Juan

Gamella, María
Véase, Campuzano, Susana

Garranzo-Asensio, María
Véase, Campuzano, Susana

G. Campaña, Araceli
Véase, Páez, José L.

Hernández Castillo, Yarazett
Véase, Caballero-Briones, Felipe

Hidalgo, Nereida
Véase, Corona, Helena

Hortigüela, Lidia
Véase, Páez, José L.

Izquierdo-García, Patricia
Véase, Lión-Villar, Juan

J. García, Juventino
Véase, Arévalo, Alma

Lión-Villar, Juan
Nanografenos moleculares: el legado del benceno en la química del carbono, **2025**,*121 (4)* 292-301

López-Estrada, Santos
Véase, Caballero-Briones, Felipe

López Huerta, Francisco
Véase, Caballero-Briones, Felipe

López-Mendoza, Pedro
La creciente versatilidad del catión TEMPO+ en síntesis orgánica, **2025**, *121 (3)* 143-147

Mantilla, Ángeles
Véase, Caballero-Briones, Felipe

Martín, Nazario
Véase, Lión-Villar, Juan

Martín, Nazario
Véase, Barragán, Ana

M. Cruz, Carlos
Véase, Páez, José L.

Montero-Calle, Ana
Véase, Campuzano, Susana

Montes Rojas, M.ª Luisa
Véase, Caballero-Briones, Felipe

Morales-Morales, David
Véase, R.-Galindo, Jordi

Mustre de León, José
Véase, Caballero-Briones, Felipe

Páez, José L.
Del 'superbenceno' a los 'superhelicenos' para emitir CPL

Pedrero, María
Véase, Campuzano, Susana

Peña, Diego
Véase, Pozo,Iago

Pérez, Dolores
Véase, Pozo, Iago

Pérez-Jiménez, Marina
Véase, Corona, Helena

Pingarrón, José M
Véase, Campuzano, Susana

Porcel, Susana
Reacciones de arilación con sales de arildiazonio catalizadas por oro, **2025**, *121 (3)* 126-136

Povedano, Eloy
Véase, Campuzano, Susana

Pozo, Iago
Fusionando bencenos a demanda: integrando química orgánica y síntesis sobre superficie **2025**,*121 (4)* 302-307

R.-Galindo, Jordi
Compuestos pinza POCOP para-funcionalizados: de la síntesis a las aplicaciones, **2025**, *121 (3)* 137-142

Ruiz-Pérez, Fernando
Véase, Caballero-Briones, Felipe

Ruiz-Valdepeñas Montiel, Víctor
Véase, Campuzano, Susana

Sartillo-Piscil, Fernando
Véase, López-Mendoza, Pedro

Serafín, Verónica
Véase, Campuzano, Susana

Serrano-García, Juan S.
Véase, R.-Galindo, Jordi

Solà, Miquel
Aromaticidad molecular, **2025**, *121 (4)* 277-286

Suárez-Velázquez, Gladis G.
Véase, Caballero-Briones, Felipe

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Torrente-Rodríguez, Rebeca M.
Véase, Campuzano, Susana

Vallejo Rendón, Dulce Isaura
Véase, Caballero-Briones, Felipe

Viñas i Teixidor, Clara
Boro: de sus orígenes en el desierto a aplicaciones pioneras en energía, materiales y medicina, **2025**, *121 (1)* 19-24

IMÁGENES DE LA QUIMICA

Álvarez, Santiago
Erlenmeyer y su matraz, **2025**, *121 (1)* 62-66
Gafas y pantallas de seguridad, **2025**, *121 (2)* 93-94

© 2025 Real Sociedad Española de Química

Normas de publicación

Directrices para autores/as

Instrucciones generales

La revista ***Anales de Química de la RSEQ*** admite la publicación de artículos en español. Solo en caso de invitación expresa del Editor General en ese sentido se admitirán artículos escritos en inglés.

Los artículos deberán prepararse utilizando la 'plantilla_AnQuimRSEQ_articulos' (disponible en la web de la revista en el apartado Envíos) y podrán remitirse a las siguientes secciones:

- **Sección "Investigación Química".** Publica artículos de revisión, dirigidos a una audiencia multidisciplinar y no especializada. La extensión recomendada será de 6 páginas, incluyendo figuras y referencias. Los artículos serán sometidos a revisión por pares.
- **Sección "Enseñanza de la Química".** Publica artículos relacionados con la docencia de la Química tanto en aspectos conceptuales como experimentales, y en cualquier nivel de enseñanza, desde enseñanza primaria hasta post-grado. La extensión máxima recomendada será de 4 páginas, incluyendo figuras y referencias. Los artículos serán sometidos a revisión por pares.
- **Sección "Historia de la Química".** Publica artículos dedicados a difundir el conocimiento de la Historia de la Química. La extensión máxima recomendada será de 4 páginas, incluyendo figuras y referencias. Los artículos serán sometidos a revisión por pares.
- **Sección "Ensayos".** Publica artículos con una extensión máxima de 5 páginas. Los artículos deberán recoger una reflexión u opinión razonada sobre un tema de interés para la comunidad científica y educativa. Serán revisados por miembros del Comité Editorial.
- **Sección "Opinión".** Los artículos de opinión tendrán una extensión máxima de 4 páginas. Serán revisados por miembros del Comité Editorial.

Así mismo, podrá solicitarse al Equipo Editorial (administracion@ analesdequimica.es) la publicación de otros tipos de escritos, utilizando la 'plantilla AnQuimRSEQ_cartas' (disponible en la web de la revista en el apartado Envíos):

- **Reseñas de libros.** Deben tener una extensión máxima de una página. La solicitud deberá ir acompañada de un ejemplar del libro que quedará en poder de la persona que haga la reseña.
- **Cartas al editor y al presidente de la RSEQ.** Deben tener una extensión máxima de media página. Su publicación es potestativa del Editor General. Se publicarán sin editarse y no serán sometidas a revisión, excepto si se refieren a personas o instituciones de forma ofensiva.
- **Noticias.** Los miembros de la RSEQ podrán enviar para su publicación noticias relativas a la actividad de la RSEQ, los Grupos Especializados y las Secciones Territoriales. La extensión recomendada, incluyendo fotografías, es de media página. De forma excepcional podrán publicarse obituarios de miembros destacados de la RSEQ o de científicos cuya actividad haya sido muy relevante para un grupo importante de miembros de la RSEQ. Se ruega no superar en extensión la media página. La publicación o no de las noticias se hará según el criterio del Editor General y del Editor Asociado responsable de noticias, quienes también podrán modificar la redacción del texto.

Preparación del manuscrito

El manuscrito que se prepare para enviar a la revista debe integrar en el texto las figuras, tablas, esquemas y gráficos. El formato recomendado para el envío es PDF. Una vez aceptado el artículo, se debe enviar la versión definitiva del texto, tablas, y leyendas esquemas y figuras en formato Word. Las fotos, imágenes y esquemas en ChemDraw se deben aportar como archivos independientes en su formato original.

En el proceso de envío telemático de los manuscritos es necesario adjuntar una carta al editor (en formato docx o pdf) en la que se incluya la información de contacto del autor correspondiente y el tipo de contribución a ***Anales de Química de la RSEQ*** (Investigación Química, Enseñanza de la Química, Historia de la Química, Ensayo, etc.). Durante el proceso de envío los autores podrán sugerir los nombres de cuatro evaluadores competentes en la materia. Es responsabilidad del autor correspondiente el informar al resto de los autores del estado de recepción, revisión o publicación del manuscrito.

Tras el proceso de revisión, se requerirá a los autores, en su caso, que remitan la versión definitiva del texto, tablas y leyendas de esquemas y figuras en formato docx para la confección final del artículo. Las figuras, tablas, esquemas, gráficos y fotografía/s del/de los autor/es deberán remitirse en el formato original, cada una como un archivo independiente.

Para la publicación o adaptación de material gráfico que no sea de dominio público, como gráficos tomados de publicaciones preexistentes o fotografías de otros autores, se debe aportar la autorización para su publicación. Es responsabilidad del autor/autores la gestión de la necesaria autorización de los permisos de reproducción de las imágenes, esquemas y tablas a utilizar. Se deben solicitar antes de la publicación del artículo y si no se dispone de dicha autorización, no podrán incluirse en el documento. La autoría se debe citar según se describe en la 'plantilla_AnQuimRSEQ_articulos'

Se debe tener en cuenta que:

- Las imágenes creadas con datos o resultados de otras publicaciones, o redibujadas por el autor/autores no requieren permisos de derecho de autor, salvo que repliquen aspectos artísticos de la obra original.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

- El material publicado en revistas y artículos de acceso abierto no necesitan el permiso del editor aunque sí debe reconocerse la autoría. No obstante, deberán tenerse en cuenta las reglas de reutilización establecidas en el trabajo original.
  - Si la licencia incluye el requisito "Sin obras derivadas", se requiere solicitar una autorización para la reproducción/ adaptación de cualquier imagen porque constituyen un trabajo derivado.
  - Si la licencia incluye el requisito "Compartir igual (SA)" y admite los fines comerciales, se requiere un permiso para su reproducción/adaptación porque la revista Anales de Química de la RSEQ no permite los fines comerciales y, por tanto, no podría publicarse bajo los mismos términos que la licencia SA.
- Se requiere obtener el permiso de derechos de autor del propietario de una marca o logotipo para su reproducción o uso pues son un tipo de propiedad intelectual.
- Para las fotografías de archivo compradas en repositorios de fotografías es necesario revisar la licencia de reutilización para garantizar que se autorice su reutilización/adaptación. En caso contrario será necesario reemplazarla.
- Para las imágenes publicadas en Internet, es necesario verificar sus derechos de autor y comprobar sus permisos de reutilización. Será necesario pedir autorización, según corresponda. Si no es posible saber esta información, se debe reemplazar la imagen.
- Las imágenes de dominio público y las libres de derecho de autor se pueden utilizar sin mencionar su autoría.
- Aunque muchas obras de arte clásico son de dominio público, las fotografías obtenidas en Internet pertenecen al propietario del sitio o al fotógrafo. Se debe solicitar su permiso para reproducirla.

Todos los documentos se deben remitir a través del área de gestión de la revista **Anales de Química de la RSEQ**. No obstante, si por algún motivo no se pudiera utilizar, los manuscritos también pueden enviarse vía correo electrónico a Patricia Yáñez-Sedeño (pyanezs@rseq.org).

Los manuscritos deben redactarse utilizando la letra Arial 9 puntos, interlineado sencillo, sin espaciado anterior/posterior y justificado, y utilizando la plantilla que se indica en cada caso.

En el caso de los artículos, se deben respetar las siguientes secciones: título (español e inglés), nombre y filiación de los autores, resumen (español e inglés), palabras clave (español e inglés), introducción, exposición del trabajo, conclusiones, material complementario, agradecimientos, bibliografía, reseña biográfica de los autores.

Primera página. En esta página debe aparecer el título del manuscrito, los nombres de los autores, su filiación y la dirección de correo electrónico del autor principal o de contacto, que se puede identificar mediante un asterisco. También se incluirán en esta primera página un máximo de cinco palabras clave y un resumen de un máximo de 120 palabras, tanto en español como en inglés.

Texto. Deberá incluir referencias relevantes al tema que se presenta y su exposición se hará de modo que resulte atractivo y divulgativo. En la mayoría de los artículos se sugiere a los autores comenzar con una visión global del tema tratado para finalizar considerando los aspectos más particulares y las conclusiones de la investigación presentada.

Figuras y esquemas. Todas las figuras o esquemas deben mencionarse en el texto en orden consecutivo y numerarse en concordancia. Deben situarse detrás del párrafo de texto en el que se mencionan. Al pie de cada figura debe presentarse una leyenda que indique el número de figura correspondiente y una pequeña descripción, preferiblemente menor de cuatro líneas.

Tablas. Deben numerarse consecutivamente y situarse a continuación del texto donde se mencionan. En la parte superior de cada tabla, debe aparecer un título que describa su contenido, sin necesidad de recurrir al texto. Si se necesita especificar algún detalle se puede indicar como nota al pie de página.

Terminología empleada: La formulación y nomenclatura empleada en los artículos deberá seguir las recomendaciones de la IUPAC y su adaptación al idioma castellano (ver las Guías Breves de Nomenclatura Química: https://rseq.org/ mat-didacticos/nomenclatura-quimica-y-normas-de-la-iupac-enespanol/). En cuanto a los elementos que pueden tener distintos nombres en castellano, deberán ser escritos atendiendo a las conclusiones del grupo de trabajo sobre terminología química de la Real Sociedad Española de Química (Anales de Química **2017**, 113 (1), 65-67 https://analesdequimica.es/ index.php/Anales-Quimica/article/view/966/1301).

Parámetros físicos o ecuaciones, etc. Para aspectos más específicos relacionados con la presentación de parámetros físicos o ecuaciones, análisis de estructuras cristalinas, o cálculos teóricos, se recomienda seguir las normas generales de publicación de la revista Chemistry–A European Journal (https://onlinelibrary.wiley.com/page/journal/15213765/ homepage/2111_guideline.html).

Citas y referencias bibliográficas. La revista Anales de Química de la RSEQ utiliza el estilo de citación *Angewandte Chemie International Edition*. Es posible descargar el formato para EndNote o Zotero desde el Apartado Envíos en la web de la revista Anales de Química de la RSEQ. Mendeley lo incluye en su lista de estilos predefinidos.

Las citas bibliográficas siguen el sistema numérico. Para ello, se debe insertar el número correspondiente a la referencia bibliográfica entre corchetes y como superíndice, a continuación del signo de puntuación y sin espacio (.[1]). Dicho número se repetirá siempre que el mismo recurso sea citado en el texto. Si la cita corresponde a una página exacta del texto, a continuación del fragmento citado se indicará la página entre paréntesis y antes del signo de puntuación (p.5).[1] Las citas incluidas en tablas y las incluidas en los pies de las figuras y tablas forman parte del texto y no se ponen como superíndice (Figura extraída de la ref. [1]) o (Datos tomados de la ref. [1]).

Las referencias bibliográficas se numeran según el orden por el que se citan en el texto por primera vez y cada número de referencia debe estar entre corchetes. Se debe citar una única obra por referencia bibliográfica. Dado que hay flexibilidad en la extensión del artículo, no se deben acumular las referencias en un mismo número de cita.

Siempre que esté disponible, se deben incluir el DOI de la obra.

Las referencias en la revista ***Anales de Química de la RSEQ*** se escriben como se muestra en los siguientes ejemplos:

[1] <Artículo de revista> N. Apellidos 1, N. Apellidos 2, N. Apellidos 3, N. Apellidos 4, *Título de la revista abreviado* **Año**, v, pp-pp, https://doi.org/10.xxxxx/xxxxxxx.

[2] <Artículo de revista en preimpresión> N. Apellidos, *Título de la revista preimpresión* **Año**, https://doi.org/10. xxxxx/ xxxxxxx.

[3] <Artículo de revista aceptado> N. Apellidos, *Título de la revista*, aceptado, https://doi.org/10.xxxxx/xxxxxxx.

[4] <Libro> N. Apellidos 10, *Título del Libro*, Editorial, Lugar de publicación, **Año**.

[5] <Capítulo de libro> N. Apellidos 1, N. Apellidos 2, en *Título del libro,* vol. v (Eds.: N. Apellidos, N. Apellidos), Editorial, Lugar de publicación, **Año**, pp. p-p.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

[6] <Patente> N. Apellidos (Institución responsable), Número de la patente, **Año**.

[7] <Tesis> N. Apellidos, Tipo de tesis, Universidad, **Año**.

[8] <Recurso de internet> N. Apellidos "Título del artículo web," disponible en https://www.URL.xx, **Año** (consultado: dd/mm/aaaa).

[9] <Citas de datos> N. Apellidos, **Año**, Título del dataset, Nombre del repositorio o archivo de datos, versión, https://doi.org/10.xxxxx/xxxxxxx.

[10] <Programas> N. Apellidos. Nombre del programa, Institución, Lugar de Publicación (País), **Año**.

Los nombres de las revistas deben abreviarse de acuerdo con el Chemical Abstracts Service Source Index (CASSI) https://cassi.cas.org/search.jsp.

Reseña de los autores: Al final del documento se indicará el nombre completo de cada uno de los autores, su fotografía, filiación, dirección postal completa, correo electrónico, ORCID y síntesis biográfica de no más de 100 palabras.

El autor principal de un artículo publicado en ***Anales de Química de la RSEQ*** recibirá una copia de la edición impresa del número de la revista donde aparece su artículo.

© 2025 Real Sociedad Española de Química

MERCK

New Chemistry Products for **Drug Discovery & Development**

Issue 1 2023

The Life Science business of Merck operates as MilliporeSigma in the U.S. and Canada.

Sigma-Aldrich®
Lab & Production Materials