

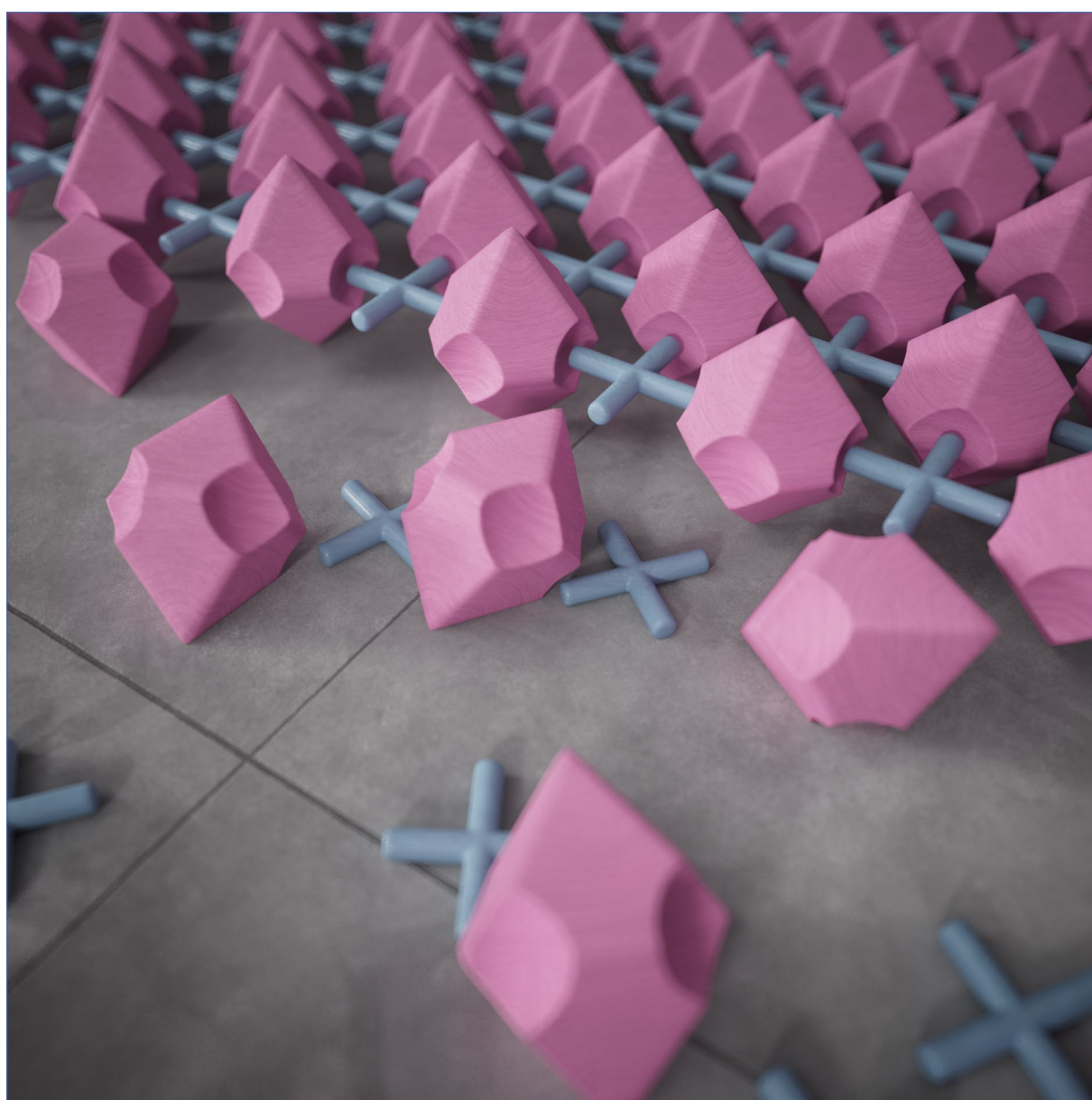
Anales de

Química

de la RSEÖ

La revista de la Real Sociedad Española de Química

• Vol. 122 • N° 2 • www.analesdequimica.es •



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 MOFs (Metal-Organic Frameworks)

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

Comité Editorial

Carla Casadevall
Departamento de Química Física, Universitat Rovira i Virgili, Instituto Catalán de Investigación Química (ICIQ).

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.

Carola Gallo Rodríguez, CIHIDECAR-UBA-CONICET
Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires (Argentina).

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.

Ingrid Montes
Professor of Chemistry, University of Puerto Rico, Campus Río Piedras.

María Paulis Lumbreras
POLYMAT, Departamento de Química Aplicada, Universidad de País Vasco.

Elena Pazos Chantretero
CICA – Centro Interdisciplinar de Química e Biología & Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidade da Coruña.

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

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.

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

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

Secretaría Editorial

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

www.analesdequimica.es
administracion@analesdequimica.es



Entidad colaboradora



Miembros corporativos



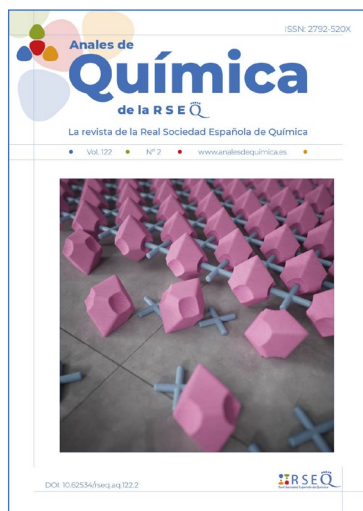
Johnson & Johnson



Anales de Química de la RSEQ

Volumen 122 · Número 2 · abril-junio 2026

SUMARIO



Diseño y maquetación:
Ostraca Servicios editoriales

Ilustración portada:
Eugenio Vázquez Sentís

An. Quím. RSEQ, 122 (2), 2026, 107-200
ISSN: 2792-520X
e-ISSN: 2792-5250
D. L.: M-232-1958

Carta de los editores

Juan Á. Casares y Carlos Martí-Gastaldo110

Ensayo

España y la IUPAC: una alianza estratégica para la química global

Javier García Martínez 111

IA para los datos, Ciencia para el criterio: un modelo de trabajo para la investigación científica

Antonio M. Rodríguez-García y Carlos E. Ynojosa Reyes.....117

Investigación química

Estructuras imidazolato zeolíticas (ZIFs): de materiales cristalinos porosos a vidrios híbridos funcionales

Luis León Alcaide y Guillermo Mínguez Espallargas..... 126

Nanomedicinas basadas en redes metal-orgánicas y nanopartículas plasmónicas

Catalina Biglione, Yolanda Pérez y Patricia Horcajada 134

MOF vítreos: una nueva frontera en materiales híbridos funcionales

Celia Castillo Blas.....141

Investigadores menores de 35

Materiales reticulares: cuando la química molecular se vuelve programable en el espacio

Jorge Albalad148

Enseñanza de la química

El sistema de unidades en magnetismo

Francesc Lloret Pastor y Rafael Ruiz García 155

Interpretar perturbaciones en sistemas en equilibrio químico a partir del cociente de reacción Q : una propuesta didáctica digital para Bachillerato

Rafael Cabrera Moscoso..... 165

Ilumínate con química: un proyecto dentro del programa Bachillerato de Excelencia

Ana M. del Hoyo Martín..... 169

Historia de la química

Un itinerario didáctico y divulgativo por Madrid: La Ilustración española y el descubrimiento de tres elementos químicos

Gabriel Pinto Cañón y Victoria Alcázar Montero 177

Noticias..... 183

Carta del editor

Carlos Martí-Gastaldo

El número dos de 2026 de *Anales de Química de la RSEQ* está dedicado a la investigación en MOFs. Quiero agradecer a Carlos Martí-Gastaldo su iniciativa de hacer un número especial sobre este tema tan actual y su generosa actuación como editor invitado.

Les dejo con él.

Juan Á. Casares

El Premio Nobel de Química 2025, concedido a Susumu Kitagawa, Richard Robson y Omar M. Yaghi por el desarrollo de los *metal-organic frameworks*, constituye un reconocimiento histórico a una de las áreas que más ha transformado la química de materiales en las últimas décadas. Con este galardón se premia una familia de sólidos cristali-

nos porosos, pero también una idea mucho más profunda: que la estructura de un material puede diseñarse desde sus componentes moleculares con un grado de control que, hasta hace no tanto, parecía reservado a la química molecular.

Los MOFs ocupan hoy un lugar singular dentro de la química contemporánea. Su desarrollo parte de una premisa aparentemente sencilla: combinar bloques de construcción orgánicos e inorgánicos para formar redes extendidas. Sin embargo, las consecuencias de esa idea han sido extraordinarias. La posibilidad de modificar de manera precisa la composición, el tamaño u organización espacial de los poros, la funcionalidad química y la respuesta dinámica de estos materiales sintéticos ha convertido a los MOFs en una plataforma excepcional para explorar la relación entre estructura y función. En pocas décadas, estos materiales han pasado de ser una curiosidad científica a convertirse en candidatos sólidos para procesos de separación, captura de gases, catálisis, almacenamiento de energía, liberación controlada de moléculas, detección química, remediación ambiental o incluso capturar el agua atmosférica.



Carlos Martí-Gastaldo.

El Nobel a Kitagawa, Robson y Yaghi recuerda, además, el valor de la investigación fundamental guiada por preguntas científicas ambiciosas. Buena parte del campo nació de intentar entender cómo ensamblar unidades moleculares en sólidos extendidos, ordenados y potencialmente porosos. Esa pregunta, formulada desde la química básica, acabó generando un lenguaje nuevo para diseñar materiales: la química reticular.

Este número especial de *Anales de Química* quiere sumarse a esa celebración ofreciendo una mirada accesible al campo de los MOFs. Las contribuciones reunidas en este volumen reflejan distintas formas de programar esa organización molecular en el

espacio, así como el uso de estos materiales en nanomedicina o la posibilidad de desarrollar MOFs vítreos basados en arquitecturas zeolíticas. Junto a ellas, el número mantiene la vocación general de la revista, incorporando ensayos sobre la IUPAC y la inteligencia artificial en investigación, así como contribuciones de enseñanza e historia de la química.

Para la comunidad química española, este Nobel tiene también una lectura cercana. En España se ha desarrollado durante los últimos años una actividad intensa y reconocible en el ámbito de los materiales porosos cristalinos, tanto en la síntesis de nuevas arquitecturas como en su conceptualización, caracterización e integración en aplicaciones. Este número especial ofrece una oportunidad para visibilizar parte de esa contribución y para acercar al lector una panorámica de este campo de la química contemporánea en el que nuestra comunidad goza de una excelente salud.

Espero que lo disfruten.

España y la IUPAC: una alianza estratégica para la química global

Spain and IUPAC: a strategic alliance for global chemistry

Javier García Martínez

Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Alicante.

PALABRAS CLAVE:

IUPAC
Química española
Gobernanza científica
Cooperación internacional
Ciencia global

RESUMEN:

La pertenencia de España a la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC) es clave para reforzar la visibilidad y la capacidad de influencia de la química española. Hoy, la IUPAC va más allá de la estandarización del lenguaje químico y actúa como un actor central en la gobernanza científica global, impulsando estándares y proyectos internacionales en sostenibilidad, educación y transformación digital. Este artículo analiza el impacto científico, educativo y de influencia que supone para España formar parte de la IUPAC y destaca el traslado de su sede internacional a Europa, con una sede compartida entre Málaga y Roma, como un hito que consolida el papel de España y abre nuevas oportunidades de liderazgo y cooperación internacional.

KEYWORDS:

IUPAC
Spanish chemistry
Scientific governance
International cooperation
Global science

ABSTRACT:

Spain's membership of the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) is key to strengthening the visibility and influence of Spanish chemistry. Today, IUPAC goes beyond the standardisation of chemical language and acts as a central player in global scientific governance, promoting international standards and projects in sustainability, education, and digital transformation. This article analyses the scientific, educational, and strategic impact of Spain's membership of the IUPAC and highlights the relocation of its international headquarters to Europe, with shared headquarters in Malaga and Rome, as a milestone that consolidates Spain's role and opens up new opportunities for leadership and international cooperation.

Introducción

La pertenencia de España a la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC) es uno de los pilares menos visibles, pero más determinantes, de la proyección internacional de nuestra química. Más allá de la nomenclatura o de los símbolos que aprenden los estudiantes en las aulas, la IUPAC es hoy un actor central en la gobernanza global de la química: define estándares, promueve consensos científicos, impulsa proyectos internacionales y actúa como foro neutral en un mundo crecientemente fragmentado. En este contexto, analizar las ventajas de que España forme parte activa de la IUPAC resulta no solo pertinente, sino estratégico.

Este artículo pretende ofrecer una visión detallada del valor que la pertenencia de España a la IUPAC ha tenido y tiene para nuestro sistema científico y educativo, así como un hito histórico reciente: el traslado de la sede internacional de la IUPAC a Europa, con una sede compartida entre Málaga y Roma. La IUPAC ha sido definida en numerosas ocasiones como las "Naciones Unidas de la Química" (Figura 1). Esta analogía no es retórica. La IUPAC actúa como un espacio de consenso basado exclusivamente en la mejor evidencia científica disponible. Gracias a ella existe un lenguaje químico universalmente aceptado,

que permite que investigadores, docentes y profesionales de la química en general se entiendan.

En paralelo, la IUPAC ha asumido en los últimos años un papel cada vez más relevante en la transformación digital de la química, promoviendo iniciativas estratégicas en inteligencia artificial, gestión de datos científicos y acceso abierto al conocimiento. La Unión impulsa activamente la adopción



Figura 1. Representantes de los distintos países emitiendo su voto durante la última Asamblea General de la IUPAC celebrada en Kuala Lumpur, Malasia, del 12 al 16 de julio de 2025. Fotografía del autor.

de los principios FAIR (*Findable, Accessible, Interoperable, Reusable*) en los datos químicos, consciente de que la calidad, trazabilidad e interoperabilidad de los datos son condiciones esenciales para el avance de la investigación y para el uso responsable de herramientas basadas en inteligencia artificial. Proyectos como Digital IUPAC, la modernización del *Gold Book*, el desarrollo del estándar InChI (*International Chemical Identifier*), o la participación en iniciativas internacionales como *WorldFAIR Chemistry*, sitúan a la IUPAC a la vanguardia de la estandarización digital de la información química.

Al mismo tiempo, la Unión defiende de forma decidida el acceso abierto a recursos fundamentales: recomendaciones, nomenclatura, datos y materiales educativos, reforzando el carácter público, global e inclusivo de la ciencia química y garantizando que los avances digitales se traduzcan en un beneficio real para toda la comunidad científica y para la sociedad.

La pertenencia de España a esta organización garantiza que nuestra comunidad científica participe directamente en la definición de estas prioridades globales, en lugar de limitarse a adoptar decisiones tomadas por terceros.

España en la IUPAC: una relación histórica y estratégica

La relación de España con la IUPAC hunde sus raíces en uno de los momentos más brillantes de nuestra historia científica. Nos incorporamos a la Unión casi inmediatamente después de la creación de la IUPAC en 1919 (Figura 2) y ya en 1934, en plena Edad de Plata de la ciencia española y durante la II República, Madrid fue sede del IX Congreso de la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada, un acontecimiento de primer nivel internacional que reunió a más de 1.200 químicos procedentes de 32 países, incluidos varios premios Nobel, y convirtió, durante esos días, a la capital española en el auténtico centro mundial de la química (Figura 3).

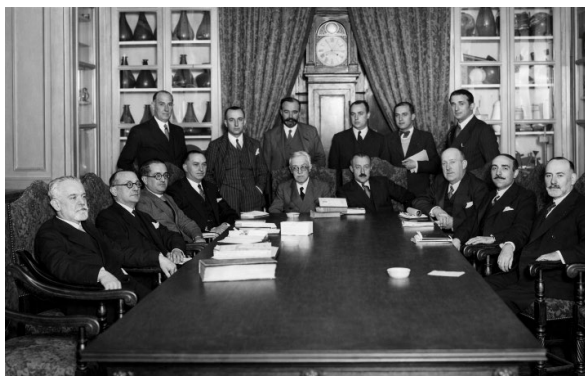


Figura 2. Reunión de los miembros de la Federación de Sociedades Químicas, en Madrid, en 1923. Esta organización es la que representaba a España en la IUPAC. Reproducido de Ref. [1].

Este congreso, el primero de carácter internacional celebrado tras la Primera Guerra Mundial, simbolizó la voluntad explícita de la ciencia española de integrarse plenamente en la comunidad científica internacional. Figuras de referencia como Enrique Moles, uno de los químicos teóricos españoles con mayor proyección internacional de la época, desempeñaron un papel central en aquel esfuerzo, asumiendo responsabilidades clave tanto en la organización del congreso como en el seno de la propia IUPAC. Junto a él, científicos como Antonio Madinaveitia, José Giral, Obdulio Fernández, María Teresa Toral, José Casares, Dorotea Barnés, José Rodríguez Mourelo y Enri-

que Hauser representaron una generación comprometida con la modernización científica del país, estrechamente conectada con las grandes corrientes internacionales de la química.

Tras el abrupto paréntesis que supusieron la Guerra Civil y las posteriores décadas de aislamiento científico, la reincorporación de España a las grandes organizaciones internacionales constituye una de las historias de éxito más relevantes de nuestro sistema científico contemporáneo. En este proceso de normalización y proyección internacional, la química ha ocupado un lugar central, retomando una tradición de excelencia, apertura y compromiso internacional que ya había quedado firmemente establecida en los años treinta.



Figura 3. Momento en el que el presidente de la República, Niceto Alcalá-Zamora, se dirige a los participantes del IX Congreso Internacional de Química Pura y Aplicada, durante la ceremonia de apertura el 4 de abril de 1934 en Madrid. Reproducido de Ref. [2].

En 2025, España se sitúa entre los diez primeros países del mundo en producción científica en química y cuenta con una de las industrias químicas más sólidas de Europa, responsable de cerca del 5 % del PIB, con más de 700.000 puestos de trabajo y una parte sustancial de la inversión industrial en I+D+i. La pertenencia a la IUPAC refuerza esta posición, ofreciendo a España una ventaja competitiva clara: participar en la definición de las reglas del juego científico e industrial que condicionan sectores tan estratégicos como la energía, los materiales avanzados, la salud, la alimentación o la sostenibilidad. De la misma forma, en los últimos años, en la IUPAC se han llevado a cabo cambios importantes para mejorar su funcionamiento interno. Uno de los principales logros ha sido la aprobación, por una amplísima mayoría, de la sustitución del antiguo Bureau por un Comité Ejecutivo y un Comité Científico que han permitido simplificar los procesos de toma de decisiones, mejorar la alineación estratégica y reforzar el papel de la ciencia en el corazón de la organización. Este cambio, complejo pero necesario, dota a la IUPAC de mayor agilidad en un contexto científico y geopolítico en rápida transformación (Figura 4). Estos cambios organizativos han dado lugar a una Unión más ágil, eficaz y alineada con sus objetivos estratégicos. La racionalización de estructuras, la mejora de los procesos de toma de decisiones y una gestión más eficiente de los recursos han supuesto, además, un importante ahorro económico.

Como resultado, la situación financiera de la IUPAC se ha visto claramente fortalecida, permitiendo no solo consolidar una posición presupuestaria saneada, sino también incrementar de manera significativa el impacto de sus actividades. La Unión financia más de 180 proyectos internacionales, reforzando su papel como referente global en la promoción de la química, el desarrollo sostenible, la educación y la cooperación científica internacional. Al mismo tiempo, la IUPAC continúa apoyando



Figura 4. Congreso Mundial de Química y Asamblea General de la IUPAC celebrada en La Haya, Países Bajos, del 20 al 25 de agosto de 2023, en la que se aprobó la simplificación de su estructura organizativa. Reproducido con permiso de VideoMatic/Gerrit Vermeulen. © VideoMatic/Gerrit Vermeulen, 2023.

un amplio abanico de actividades, incluyendo congresos científicos, programas educativos, premios, iniciativas de divulgación y acciones dirigidas a fortalecer la comunidad química a nivel mundial.

Asimismo, los últimos años han sido clave para la ampliación y fortalecimiento de la base de miembros de la Unión, logrando la incorporación de nuevos países, entre ellos Singapur, Estonia, Perú, Guatemala y Brasil. Esta incorporación ha contribuido positivamente tanto a la situación financiera de la IUPAC como a su proyección y presencia en América Latina, una región estratégica para el futuro de la química y de la propia Unión.

En los últimos años, en la IUPAC hemos reforzado de manera decidida la comunicación interna y externa de la Unión, se han impulsado nuevos formatos de diálogo directo con nuestros miembros y se han desarrollado iniciativas globales de gran impacto, como el *Global Women's Breakfast*, el *Top Ten Emerging Technologies in Chemistry* o la integración de la *International Younger Chemists Network* en la estructura de la IUPAC. Especial mención merece el énfasis que hemos puesto en la digitalización del conocimiento químico y en la aplicación de los principios FAIR a los datos químicos. Proyectos como *Digital IUPAC*, la modernización del *Gold Book* o el desarrollo de estándares para la interoperabilidad de datos sitúan a la Unión y, con ella, a España en la vanguardia de la química del siglo XXI.

El traslado de la sede internacional a Europa: Málaga como hito histórico

Uno de los hitos más relevantes de este periodo ha sido, sin duda, el traslado de la sede internacional de la IUPAC desde Estados Unidos a Europa, después de casi tres décadas establecida en Carolina del Norte, en el corazón del Research Triangle Park. Se trata de una decisión de enorme trascendencia, no solo desde el punto de vista organizativo, sino también simbólico y geopolítico, ya que acerca a Europa y, de manera muy significativa, a España uno de los principales centros de decisión de la ciencia mundial. La IUPAC no es únicamente la institución que define la nomenclatura química; es un actor clave en la construcción de consensos científicos globales, en diálogo permanente con organismos como la UNESCO y el Consejo Internacional de la Ciencia, y un referente en ámbitos estratégicos como la educación, la sostenibilidad, la regulación y la innovación científica.

Este traslado no fue el resultado de una decisión improvisada, sino la culminación de un proceso internacional abierto, transparente y altamente competitivo. En junio de 2024, la IUPAC lanzó una convocatoria global para albergar su sede



Figura 5. Acto de firma del acuerdo entre la IUPAC y la Universidad de Málaga el pasado 5 de febrero. Fotografía del autor.

internacional, a la que respondieron numerosas ciudades e instituciones de distintos continentes, reflejo del interés y del prestigio asociados a la Unión.

Durante meses, las candidaturas fueron evaluadas mediante un procedimiento riguroso que tuvo en cuenta criterios como la solidez institucional, el respaldo político, las infraestructuras disponibles, la estabilidad jurídica, el compromiso financiero a largo plazo y la capacidad de proyección internacional. El resultado fue una solución inédita en la historia de la organización: el establecimiento de una sede europea compartida entre Málaga y Roma, elegidas por la complementariedad de sus propuestas y por la fortaleza del apoyo ofrecido por sus respectivas instituciones académicas y públicas.

La elección de Málaga no es, en absoluto, casual. En los últimos años, la ciudad se ha consolidado como un ecosistema de innovación capaz de articular de manera eficaz la colaboración entre la universidad, la industria y las administraciones públicas, con una clara vocación internacional.



Figura 6. Edificio del Rectorado de la Universidad de Málaga donde está previsto que se ubique la sede de la IUPAC. (Imagen de Zarateman, reproducida de Ref. [3] bajo licencia CC BY 1.0)

El respaldo decidido de la Universidad de Málaga (Figura 5) y el Ayuntamiento de la ciudad fue determinante para construir una candidatura sólida, creíble y alineada con las necesidades presentes y futuras de la IUPAC. La sede de la Unión en Málaga se ubicará en el antiguo edificio del Rectorado de la Universidad de Málaga, situado en pleno centro histórico de la ciudad, un espacio emblemático que combina valor patrimonial, proyección institucional y apertura a la sociedad (Figura 6). La llegada de la IUPAC refuerza este ecosistema, lo proyecta globalmente y sitúa a Málaga como un nuevo nodo estratégico en la red internacional de gobernanza científica (Figura 7).



Figura 7. Acto de firma del acuerdo entre la IUPAC y el ayuntamiento de Málaga el pasado 5 de febrero. Fotografía del autor.

El hecho de que una de las sedes de la principal organización química del mundo se ubique en España, sitúa a nuestro país en una posición privilegiada en la gobernanza global de la ciencia y constituye, al mismo tiempo, una oportunidad estratégica y una responsabilidad. Refuerza el papel de España como actor relevante en la definición de prioridades científicas internacionales y como puente natural entre Europa y América Latina, una región con la que compartimos lengua, lazos culturales y numerosos desafíos comunes. La sede de la IUPAC en Málaga puede convertirse así en una plataforma clave para intensificar la cooperación científica iberoamericana, promover el uso del español en la ciencia y desarrollar proyectos conjuntos en investigación, educación e industria, contribuyendo de manera decisiva a que la química afronte con éxito los grandes retos del siglo XXI.

España como anfitriona de grandes congresos de la IUPAC

A lo largo de las últimas décadas, distintas ciudades españolas han acogido congresos de la IUPAC, convirtiéndose durante esos días en verdaderos puntos de encuentro para la comunidad científica internacional. Granada fue sede del 20th IUPAC Symposium on Photochemistry (2004), y Santiago de Compostela acogió la 19th International Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC-19) (2008), uno de los foros más prestigiosos en el campo de la química orgánica física. En 2024, Valencia acogió el 29th IUPAC Symposium on Photochemistry (PhotolUPAC) que atrajo a más de 500 participantes de todo el mundo. Además, en 2028 se celebrará en Alcalá de Henares el 29th IUPAC International Congress on Chemistry Education (ICCE2028), el congreso más importante en esta disciplina.

Estas y otras reuniones y congresos de la IUPAC que se han celebrado en nuestro país muestran cómo España ha sabido aprovechar la infraestructura y la red internacional de la IUPAC para acoger grandes encuentros científicos.

Estos congresos han hecho visible la madurez y la proyección internacional de la química española. Además, han contribuido de forma decisiva a la internacionalización de nuestras universidades, han permitido a generaciones de jóvenes investigadores entrar en contacto directo con referentes internacionales de sus campos y han reforzado la presencia de España en las redes científicas donde se construyen las grandes agendas de la química. En ese mismo espíritu, la celebración en 2018 de una reunión del Comité Ejecutivo de la IUPAC en la Universidad de Alcalá simboliza la confianza de la Unión en nuestras instituciones y en su capacidad para desempeñar un papel activo en la gobernanza científica internacional.

Química en español: un recurso útil y accesible

Desde 2022, están disponibles en español las guías breves de nomenclatura, los compendios de unidades, símbolos y terminología, así como la tabla periódica y la tabla de isótopos de la IUPAC. Se trata de un recurso educativo y profesional de enorme valor para toda la comunidad hispanohablante. Este esfuerzo, lejos de ser una mera traducción literal, ha requerido un trabajo científico de alto nivel para adaptar conceptos, vocabulario y convenciones a las particularidades del español, garantizando coherencia, precisión y fidelidad a las recomendaciones internacionales. En este contexto, resulta imprescindible destacar la labor de Efraim Reyes y Pascual Román, que han traducido a nuestra lengua las guías breves de nomenclatura de química orgánica e inorgánica, así como otros textos fundamentales, como las guías de nomenclatura de polímeros, la terminología de polimerización y los resúmenes oficiales de magnitudes, unidades y símbolos en química física y del Sistema Internacional de Unidades (Figura 8).

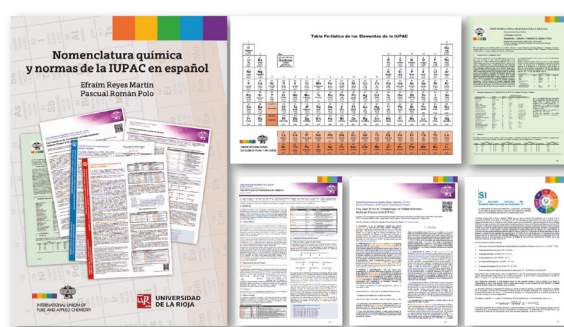


Figura 8. Portada y algunas páginas representativas del libro Nomenclatura química y normas de la IUPAC en español, editado por el Servicio de Publicaciones de la Universidad de La Rioja. Reproducido de Ref. [4]

Estos trabajos, revisados por expertos, aprobados por la IUPAC y acompañados por un prólogo institucional del presidente de la Unión, se han integrado en una obra de referencia publicada en 2022 y se encuentran disponibles de forma completamente gratuita a través de la página web de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ). Este material, concebido expresamente como recurso didáctico abierto, constituye hoy uno de los apartados más consultados y visitados del portal de la RSEQ, con un volumen de accesos y descargas extraordinariamente elevado. Su impacto confirma no solo la utilidad práctica de estos contenidos para estudiantes, docentes y profesionales, sino también la capacidad de España para liderar iniciativas de acceso abierto que democratizan el lenguaje de la química y refuerzan la proyección internacional del uso del español en la ciencia.

La contribución de científicos españoles a la IUPAC

La pertenencia española en la IUPAC no se limita a cargos institucionales y representativos (Figura 9). Numerosos científicos y científicas de nuestro país participan activamente en sus divisiones y proyectos. Investigadoras e investigadores como Conchita Gimeno (CSIC-Universidad de Zaragoza), Ernesto de Jesús (Universidad de Alcalá) y María Montes (Universidad de Oviedo) son miembros muy activos de las Divisiones II, III, V y VIII. También participan, entre otros, Daniel Tordera, José Ramón Leiza, Moisés Canle López, Guillermo Orellana, María González Miguel y Jaume Puy entre otros, que participan en diferentes comités y subcomités. También cabe destacar que

Marita Vallet, Carmen Nájera, Conchita Gimeno y Otilia Mó han sido reconocidas como IUPAC Distinguished Women in Chemistry or Chemical Engineering Award, un reconocimiento internacional de máximo prestigio.

En la actualidad, 25 científicas y científicos españoles se encuentran vinculados a 24 proyectos patrocinados por la IUPAC que generan herramientas globales para el desarrollo de la química, de los cuales cabe citar: *Greenness of official standard sample preparation methods (2021-015-2-500)* donde participan Alberto Chisvert, Enrique Javier Carrasco-Correa y Juan Luis Benedé (Universidad de Valencia), María Llompart y María Celeiro (Universidad de Santiago de Compostela), Francisco Pena Pereira (Universidad de Vigo) y Miguel Ángel Aguirre (Universidad de Alicante); *Categorizing Interactions Involving Group 11 Elements (2021-006-2-100)* y *Categorizing Chalcogen, Pnictogen, and Tetrel Bonds, and Other Interactions Involving Groups 14-16 Elements (2016-001-2-300)* con Antonio Frontera (Universidad de las Islas Baleares); *Electroanalytical flow through systems for monitoring of biologically active species (2023-010-2-500)* que cuenta con Arben Merkoçi (ICN2) y Alberto Escarpa Miguel (Universidad de Alcalá) o *WorldFAIR Chemistry-2. Training Cookbook: Digital recipes for managing chemical data (2022-028-1-024)* y *InChI Open Education Resource (OER) (2018-012-3-024)* con Jordi Cuadros (IQS).



Figura 9. Las químicas Concepción Gimeno y Raquel P. Herrera, miembros de la delegación española de la Asamblea General de la IUPAC celebrada en Kuala Lumpur, Malasia, del 12 al 16 de julio de 2025. Fotografía del autor.

De la misma forma, son varios jóvenes españoles los que han recibido el IUPAC- Solvay International Award for Young Chemists: Eduardo Bolea (2018), Leonardo Scarabelli (2017) y Rubén Costa (2011). Nuestro país ha tenido asimismo un papel especialmente activo y visible en algunas de las iniciativas globales más emblemáticas impulsadas por la IUPAC para acercar la química a la sociedad y reforzar su dimensión cultural, educativa e inclusiva. Nuestro país participó de forma destacada en el Año Internacional de la Química 2011 y, de manera aún más intensa, en el Año Internacional de la Tabla Periódica de los Elementos Químicos 2019, con centenares de actividades organizadas por universidades, centros de investigación, sociedades científicas, museos y centros educativos en todo el territorio nacional. A estas iniciativas se suma una participación muy significativa en el Global Women's Breakfast, con numerosos encuentros celebrados cada año en España, que han contribuido a visibilizar el talento femenino en química y a fortalecer redes profesionales intergeneracionales. Asimismo, miles de estudiantes españoles, de todos los niveles educativos, han participado en el IUPAC Periodic Table Challenge, disponible en español,

una iniciativa global en línea que busca despertar el interés por la química, reforzar el aprendizaje y estimular nuevas vocaciones científicas desde edades tempranas. En esa misma apuesta por el talento joven, la IUPAC colabora estrechamente con la *International Chemistry Olympiad (IChO)*, una de las competiciones científicas más prestigiosas del mundo, en la que cada año participan jóvenes estudiantes de decenas de países, y que constituye una plataforma excepcional para promover la excelencia académica, el intercambio internacional y el entusiasmo por la química entre las nuevas generaciones (Figura 10).



Figura 10. Imagen de la fase internacional de las Olimpiadas de Química 2023, en cuya organización participa IUPAC, con el objetivo de fomentar vocaciones científicas tempranas y promover la excelencia en la educación química a nivel global. Reproducido con permiso de ETH Zurich. © ETH Zurich, 2023.

En nuestro país, la IUPAC ha estado presente en numerosos eventos y actividades de especial relevancia. Entre ellos, destaca su participación en octubre de 2022, en el 90º aniversario de la creación del Instituto de Química Física "Blas Cabrera", en cuyo marco se presentaron la tabla periódica de los elementos químicos y diversos documentos de la IUPAC (Figura 11).



Figura 11. Celebración de los 90 años de la creación del Instituto Nacional de Física y Química, actual Instituto de Química Física "Blas Cabrera", el 19 de octubre de 2022, con la presentación de una tabla periódica dedicada y algunos documentos históricos relacionados con la pertenencia de España en la IUPAC. Fotografía del autor.

Otro evento significativo para la relación entre la IUPAC y la química española fue la celebración del 90º aniversario de la primera reunión científica organizada por la Universidad Internacional de Verano de Santander, hoy Universidad Internacional Menéndez Pelayo (UIMP). Aquella histórica cita, celebrada del 9 al 20 de agosto de 1933 y dedicada a la Química, reunió a figuras de primer nivel internacional, incluidos premios Nobel como Fritz Haber, Hans von Euler-Chelpin y Richard Willstätter, y tuvo como objetivo fundamental la organización del Congreso

Internacional de Química de la IUPAC que se celebraría en Madrid en 1934. Para conmemorar dicho acontecimiento, científicos españoles y extranjeros volvieron a reunirse en el Palacio de la Magdalena 90 años después, como parte del curso de verano de la Universidad Internacional Menéndez Pelayo (UIMP) *Disruptive Advances in Chemistry for Societal Needs* (Figura 12).

La pertenencia de España a la IUPAC ha demostrado ser una inversión estratégica de largo plazo. Nos ha permitido influir, aprender, liderar y proyectar nuestra química en el escenario global. El establecimiento de una sede de la IUPAC en Málaga no es solo un reconocimiento del nivel alcanzado, sino una responsabilidad. Aprovechar plenamente esta oportunidad histórica exigirá coordinación institucional, ambición científica y una visión clara y compartida del papel que España quiere desempeñar en la química del futuro.

En este sentido, es muy importante que la suscripción de nuestro país a las Uniones Científicas Internacionales vuelva a ser asumida en los Presupuestos Generales del Estado, reconociendo su valor estratégico para el sistema científico y productivo. Es alentador constatar que el borrador presupuestario actual ya incorpora esta partida, abriendo una vía para garantizar su sostenibilidad a largo plazo. Hasta ahora, la continuidad de la pertenencia de España a la IUPAC ha sido posible gracias al firme compromiso de la Real Sociedad Española de Química.

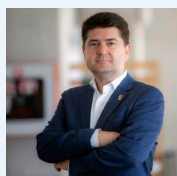
Este esfuerzo colectivo merece un reconocimiento explícito. Si sabemos consolidar el apoyo institucional y aprovechar la presencia de una sede de la IUPAC en Málaga, la química mundial no solo habrá elegido España como sede, sino también como uno de los lugares desde los que se piensa, se gobierna y se construye su futuro.

Bibliografía

- [1] Portillo, *La Libertad*, 29 mar. 1934.
- [2] A. Pérez Vitoria, *An. Fis. Quim.* 1934, tomo XXXII, vol. II, pp. 195-207.
- [3] "Málaga - Rectorado de la Universidad de Málaga", disponible en <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=9160731Z>, 2020 (consultado: 18/06/2026).
- [4] E. Reyes, P. Román, *Nomenclatura Química y Normas de la IUPAC en Español*, Universidad de La Rioja, 2022.



Figura 12. Fotografía de los participantes en la primera reunión científica celebrada en la Universidad Internacional de Verano de Santander, hoy Universidad Internacional Menéndez Pelayo (UIMP) del 9 al 20 de agosto de 1933, en la que se aprovechó para organizar el IX Congreso de la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada en Madrid al año siguiente (imagen superior) y foto del evento conmemorativo organizado 90 años después en julio de 2023 en el mismo lugar (imagen inferior). Ambas imágenes pertenecen al archivo fotográfico de la Universidad Internacional Menéndez Pelayo.



Javier García Martínez

Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Alicante, Carretera San Vicente s/n, CP 03690, Alicante (España)

C-e: j.garcia@ua.es

ORCID: 0000-0002-7089-4973

Javier García Martínez es catedrático de Química Inorgánica en la Universidad de Alicante y director del Laboratorio de Nanotecnología Molecular. Fue presidente de la IUPAC (2022–2023) y miembro de su Comité Ejecutivo (2019–2025). Es *Honorary Fellow* de la Royal Society of Chemistry y de la Chinese Chemical Society así como *Fellow* de la American Chemical Society. Es presidente del Comité Científico del EuChemS Chemistry Congress 2026 y miembro del Consejo Asesor de Ciencia, Tecnología e Innovación del Gobierno de España. Ha recibido el Premio Rey Jaime I (2014) y el Premio Nacional de Investigación (2023).

IA para los datos, Ciencia para el criterio: un modelo de trabajo para la investigación científica

AI for the data, Science for the insight: A working model for scientific research

Antonio M. Rodríguez-García^{1*} y Carlos E. Ynojosa Reyes²

¹ IRICA - Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas - Universidad de Castilla-La Mancha Ciudad Real.

² Dijo Soluciones Digitales, Murcia.

PALABRAS CLAVE:

Inteligencia artificial
Agentes de IA
Automatización de flujos de trabajo
Datos experimentales
Criterio científico

RESUMEN:

La integración de la inteligencia artificial (IA) en la ciencia exige definir qué automatizar y qué reservar al criterio humano. Este artículo propone transformar flujos de trabajo en tres pasos: esquematizar dependencias, programar scripts con IA y usar agentes orquestadores. Esta metodología ha acelerado el procesamiento de datos entre 25 y 70 veces en los escenarios de caracterización de materiales documentados. Se establece una distinción clave: el script automatiza y el agente orquesta, pero ninguno sustituye el indispensable juicio científico del investigador. Delegar la interpretación crítica a la IA genera conclusiones sin rigor físico-químico. Finalmente, se analizan las implicaciones de estas herramientas para la formación académica, la colaboración universidad-empresa y los límites de la autonomía tecnológica en la investigación empírica. El ensayo plantea posiciones concretas con el objetivo de estimular el debate en la comunidad científica y docente sobre los criterios de integración responsable de estas herramientas.

KEYWORDS:

Artificial intelligence
AI agents
Workflow automation
Experimental data
Scientific judgment

ABSTRACT:

Integrating artificial intelligence (AI) into science requires defining which tasks to automate and which demand human judgment. This article proposes transforming workflows in three steps: mapping dependencies, scripting with AI assistance, and using orchestrating agents. This methodology has accelerated data processing by 25 to 70 times in the documented materials characterization scenarios. A key distinction is emphasized: scripts automate and agents orchestrate, but neither replaces indispensable scientific judgment. Delegating critical data interpretation to AI often yields conclusions lacking physico-chemical rigor. The study concludes by analyzing the implications of these tools for academic training, university-industry collaboration, and the current limits of technological autonomy in experimental research. The essay advances concrete positions with the aim of stimulating debate within the scientific and teaching community on the criteria for the responsible integration of these tools.

Introducción: la pregunta que no podemos aplazar

En 2024, los Premios Nobel de Química y de Física reconocieron conjuntamente el impacto transformador de la inteligencia artificial en la ciencia. AlphaFold2 pasó de ser una herramienta computacional de nicho a convertirse en la referencia que cambió la bioquímica estructural en menos de tres años. A partir de ese momento, la pregunta dejó de ser si la IA afectaría a la investigación química —ya lo hace— para convertirse en cómo debemos integrarla sin perder lo que define el trabajo científico de calidad.

Este ensayo parte de una posición con base empírica propia. El primer autor ha transformado en los últimos meses un flujo de trabajo completamente manual —caracterización espectroscópica, análisis termogravimétrico, ensayos mecánicos, construcción de figuras para discusión previa a la publicación— en un sistema de agentes de IA que ejecuta las mismas tareas entre 25 y 70 veces más rápido, con coherencia perfecta y sin errores de codificación ni de nomenclatura. El proceso se ha verificado sobre datos científicos previamente tratados de forma manual,

lo que permite comparar resultados de ambos flujos sobre el mismo conjunto de muestras. Esa transformación siguió tres pasos que este ensayo describe con detalle: primero, esquematizar el flujo de trabajo y sus dependencias; segundo, automatizar los módulos susceptibles de ello mediante scripts desarrollados con ayuda de la IA; tercero, traducir el sistema automatizado a instrucciones en lenguaje natural para que un agente orquestador lo supervise. Una distinción que recorre todo el argumento: el script es la automatización —procesa, calcula y genera resultados aplicando criterios predefinidos por el investigador—; el agente es el orquestador —ejecuta scripts, verifica entradas y salidas, genera informes de sesión—. Ninguno de los dos sustituye el juicio científico sobre el significado de los datos. Este ensayo explica por qué esa distinción importa, qué ocurre cuando se ignora, y qué implica para la formación de investigadores y para la colaboración entre academia e industria.

Conviene señalar que el problema no se limita al procesamiento de datos experimentales. El profesor universitario de hoy dedica una fracción desproporcionada de su tiempo a tareas que, en cualquier análisis honesto del espacio de trabajo, son indistin-

CÓMO CITAR: A. M. Rodríguez-García, C. E. Ynojosa Reyes. *An. Quím. RSEQ* 2026, 122, 117-125, <https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2123>

* C-e: antoniom.rodriguez@uclm.es

guibles de trabajo administrativo: gestión de correspondencia institucional, redacción de certificados y actas, organización de registros de estudiantes, coordinación de convocatorias, preparación de documentación para agencias de evaluación. Estas tareas comparten exactamente las mismas características que hacen automatizable el procesado de datos: reciben un conjunto de información de entrada, aplican criterios predefinidos y producen un documento o acción de salida. No requieren juicio científico para ejecutarse; lo requieren para definir los criterios y validar el resultado. El espacio de trabajo del investigador académico está saturado de estas dependencias, y su peso acumulado —decenas de horas mensuales en algunos casos— es tiempo sustraído directamente a la investigación, a la docencia de calidad y a la reflexión que genera conocimiento nuevo. La misma lógica de transformación que se aplica al procesado de datos experimentales aplica aquí: esquematar qué hace cada tarea, identificar cuáles son automatizables, y construir el módulo correspondiente. La IA no va a resolver la burocracia universitaria. Pero sí puede reducir drásticamente el coste cognitivo de gestionarla, devolviendo al investigador el tiempo y la energía para las tareas que ningún sistema puede hacer por él. Conviene precisar, sin embargo, que este potencial tiene límites concretos. Tareas como la revisión de exámenes, los procesos de contratación de personal, la evaluación de convocatorias competitivas o la revisión por pares de artículos científicos exigen juicio experto y responsabilidad que no son delegables en ningún sistema automatizado actual. La IA alivia la carga cognitiva de las tareas más estructuradas y de criterio predefinido; no sustituye la supervisión humana en los procesos que lo requieren.

Lo que la IA hace mejor que cualquier investigador: datos a escala

La ventaja comparativa de la IA en el laboratorio de química es inequívoca en una categoría de tareas: el procesado sistemático, rápido y reproducible de grandes volúmenes de datos de alta dimensionalidad. Este es el cuello de botella que ha ralentizado la ciencia experimental durante décadas y donde la IA produce un beneficio real e inmediato. Sin embargo, como se documenta en la sección 4, ese beneficio tiene un coste creativo cuya magnitud depende críticamente del modo de integración: la IA que asume el procesado de datos libera al investigador; la IA que invade la generación de hipótesis lo reemplaza. La distinción no es cosmética; es la que separa un modelo de trabajo sostenible de uno que degrada la calidad científica a largo plazo.

En espectroscopía, el impacto es particularmente directo. Técnicas como —MS, NMR, IR, Raman, UV-Vis— generan volúmenes crecientes de datos que crean una necesidad urgente de análisis automatizado más allá del sistema tradicional de trabajo.^[1] Una revisión en *Chem. Rev.* de 2025 cubre el estado del arte en IA generativa y técnicas de aumento de datos para espectroscopía abarcando más de 100 revistas en 32 editoriales.^[2] En espectroscopía vibracional, 2025 ha consolidado herramientas automatizadas para limpiar y procesar datos —eliminación de ruido, corrección de línea de base, identificación de picos— antes de cualquier interpretación.^[3]

En síntesis química, la expansión del espacio explorable es igualmente rotunda. Si antes un grupo de investigación podía explorar decenas o centenares de sistemas, con IA se pueden explorar decenas de miles o incluso espacios con billones de combinaciones. Wang y colaboradores documentaron en *Nature* cómo la IA está siendo integrada para ayudar a los científicos a interpretar grandes conjuntos de datos y obtener

conocimientos que no habrían sido posibles con métodos tradicionales.^[4] Lo crítico es que esta integración en el flujo de datos no es lo mismo que la sustitución del científico: es la liberación del científico de las tareas que la máquina puede hacer mejor.

Lo que la IA no puede hacer: creatividad, hipótesis y serendipia

La capacidad de la IA para generar hipótesis genuinamente nuevas —no interpolaciones o recombinaciones del espacio conocido— sigue siendo el límite más robusto de la tecnología actual. Demis Hassabis, inventor de AlphaFold2 y Premio Nobel de Química 2024, lo expresó sin ambigüedad en una entrevista reciente: preguntándose si la IA puede proponer una nueva hipótesis o idea sobre cómo funciona el mundo, respondió su propia pregunta afirmando que, hasta ahora, estos sistemas no pueden hacer eso, y sitúa la verdadera innovación y creatividad en la IA a cinco o diez años vista.^[5]

Los resultados del *benchmark* ChemBench, desarrollado por Mirza, Schwaller, Jablonka y colaboradores y publicado en *Nat. Chem.* en 2025, confirman esta imagen asimétrica: los mejores modelos de lenguaje superan en promedio a los mejores químicos humanos en pruebas de conocimiento y razonamiento químico, pero fallan en tareas que requieren conocimiento espacial-molecular o razonamiento de seguridad, y producen predicciones con una confianza que no correlaciona con su precisión real.^[6] Los LLMs (*Large Language Model*, modelos de lenguaje de gran tamaño) responden con aparente seguridad incluso cuando se equivocan, un rasgo que amplifica directamente el riesgo de aceptación acrítica de resultados generados por IA.

Esta limitación no es sorprendente si se examina la arquitectura conceptual de los modelos actuales: aprenden de los datos que les han dado para entrenarse. Por definición, no pueden predecir algo muy innovador. En síntesis orgánica, por ejemplo, los algoritmos actuales dan la retrosíntesis lógica —la que se puede calcular—, pero no la retrosíntesis creativa e innovadora que surge de una intuición sobre un mecanismo no descrito. La síntesis química avanza históricamente en esas fronteras.

La serendipia —el hallazgo de algo inesperado y valioso mientras se busca otra cosa— es uno de los mecanismos de avance científico más documentados en química. El grupo de MacMillan en Princeton la convirtió en estrategia sistemática: empleando un flujo automatizado de alto rendimiento y evaluando miles de reacciones diarias entre moléculas nunca combinadas, descubrieron reacciones fotocatalíticas de funcionalización C–H que no existían en la literatura.^[6] El elemento decisivo no fue la máquina: fue el diseño del espacio de búsqueda (decisión creativa del científico), la interpretación del resultado inesperado (juicio científico humano) y la capacidad de reconocer la relevancia de lo encontrado. La automatización multiplicó las posibilidades de que ocurriera la serendipia; el químico fue quien la reconoció y la convirtió en conocimiento.

Conviene, sin embargo, no simplificar este argumento. En el dominio del aprendizaje automático aplicado a sí mismo, la frontera de la autonomía está avanzando más rápido de lo que la mayoría de los investigadores experimentales percibe. Lu y colaboradores publicaron recientemente en *Nature* un sistema —denominado *The AI Scientist*— capaz de generar ideas de investigación, escribir código, ejecutar experimentos, analizar resultados y redactar el manuscrito completo, con calidad suficiente para superar la primera ronda de revisión por pares de un taller de una conferencia de primer nivel.^[7] Esto no es ciencia ficción: es un resultado publicado y replicable. Lo que no es, todavía, es química experimental. El dominio de la IA aplicada a sí misma opera sobre datos perfectamente homogéneos, métri-

cas de evaluación computables y criterios de éxito unívocos. La química experimental tiene datos heterogéneos, irreproducibilidad parcial inherente, y depende del juicio sobre qué resultado es «interesante» —un criterio que no está en los datos.

El coste oculto del modelo equivocado: producir más, comprender menos

La evidencia empírica más incómoda del panorama actual no proviene de reflexiones filosóficas, sino de un experimento controlado con mil investigadores reales. Toner-Rodgers (MIT, 2024) estudió la introducción aleatoria de una herramienta de IA para descubrimiento de materiales en el laboratorio de I+D de una gran empresa estadounidense con 1.018 científicos.^[7] Los resultados de productividad son notables: los investigadores asistidos por IA descubrieron un 44 % más de materiales, con un 39 % más de patentes y un 17 % más de innovación en productos. Pero el mismo estudio revela el precio: la IA automatizó el 57 % de las tareas de «generación de ideas», reasignando a los investigadores a evaluar candidatos producidos por el modelo. Resultado: el 82 % reportó reducción en la satisfacción con su trabajo, citando subutilización de habilidades y reducción de la creatividad. De forma reveladora, el tercio inferior de científicos —los menos experimentados— vio poco beneficio; el tercio superior casi duplicó su producción. La IA amplifica el criterio experto; no lo crea ni lo sustituye.

Este hallazgo conecta con un problema conceptual más profundo: las herramientas de IA pueden explotar nuestras limitaciones cognitivas haciéndonos vulnerables a «ilusiones de comprensión» en las que creemos entender el mundo mejor de lo que realmente lo hacemos.^[8] Messeri y Crockett, en *Nature* 2024, identifican el riesgo específico que llaman «ilusión de amplitud exploratoria»: la percepción falsa de que se está explorando todo el espacio de hipótesis posibles, cuando en realidad solo se explora el subconjunto accesible al modelo. Que el ajuste espectral se realice automáticamente no implica que el químico haya interpretado lo que el espectro le está diciendo sobre la estructura o dinámica del sistema. La velocidad sin criterio no es progreso científico; es eficiencia vacía.

Este fenómeno tiene ahora una base empírica cuantificada. Cuando un modelo de lenguaje produce una respuesta sobreconfiada sobre la toxicidad de un compuesto o la viabilidad de una ruta sintética, el investigador que no tiene criterio de dominio independiente no puede detectar el error, precisamente porque el formato de la respuesta es indistinguible del de una respuesta correcta. Bran y colaboradores documentaron este efecto con precisión al evaluar ChemCrow, un agente de IA descrito en la sección siguiente: cuando un LLM evaluador (sin herramientas) intentó juzgar la calidad de las respuestas de GPT-4 frente a las de ChemCrow, fue incapaz de distinguir las respuestas correctas de las alucinaciones. Solo los evaluadores humanos expertos lo consiguieron de forma consistente.^[9] La implicación es directa: la evaluación automatizada de resultados científicos generados por IA no puede sustituir al criterio experto, al menos en el estadio actual de desarrollo.

El modelo correcto: IA como procesador, científico como árbitro

La respuesta a la dicotomía no es el rechazo de la IA ni su adopción acrítica. Es una arquitectura de colaboración con división de tareas explícita. Los laboratorios que encuentran el equilibrio más productivo son los que han definido con precisión qué procesa la IA y qué decide el científico, como ilustra la Figura 1.

Un ejemplo reciente en *Nat. Chem. Eng.* ilustra el modelo con precisión. Dai y colaboradores desarrollaron una platafor-

ma de experimentación autónoma con un «asesor de IA» que realiza análisis de datos en tiempo real y monitorea el progreso del laboratorio. La IA proporciona análisis cuantitativo continuo; las decisiones sobre qué experimentos realizar y cómo interpretar los resultados permanecen en manos del investigador. Con esta arquitectura, el sistema

alcanzó una mejora del 150 % en el rendimiento de conducción mixta de polímeros electrónicos e identificó un polimorfo no conocido.^[10] El resultado clave no fue la autonomía del sistema sino la complementariedad entre procesamiento automatizado y juicio humano.

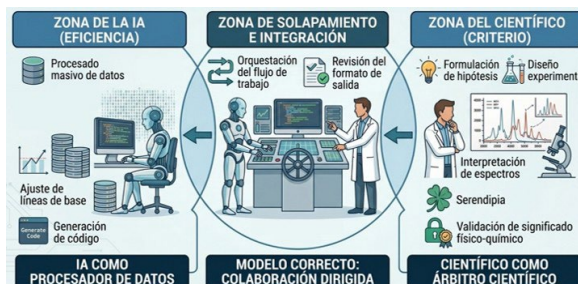


Figura 1. División de roles en el modelo de colaboración propuesto. La zona izquierda (IA como procesador) concentra las tareas de alta escala y baja ambigüedad; la zona derecha (científico como árbitro) agrupa las tareas que requieren criterio de dominio. La zona central de solapamiento e integración es donde se orquesta el flujo y se revisa el formato de salida antes de la validación científica.

Conviene explicar un concepto técnico antes de continuar, porque aparecerá en la comparativa que sigue y puede resultar opaco para el lector no familiarizado con herramientas de IA. Por defecto, un modelo de lenguaje no recuerda nada entre conversaciones: cada sesión comienza desde cero, como si el interlocutor fuera un desconocido. Esto es una limitación severa para un flujo de trabajo científico donde el proyecto se extiende durante semanas o meses. La tecnología denominada MCP (*Model Context Protocol*, protocolo de contexto del modelo) permite conectar al agente con fuentes de información externas (archivos del proyecto, registros de sesiones anteriores, bases de datos del grupo) mediante un protocolo estandarizado, de modo que el agente puede consultar el estado del proyecto al inicio de cada sesión sin que el investigador tenga que re-describir todo el contexto. En la práctica, esto significa que el agente puede saber que ayer procesó 15 de las 20 muestras del proyecto y hoy debe continuar con las 5 restantes, sin que nadie se lo indique manualmente. Esto no es inteligencia ni juicio: es una agenda automatizada con estado persistente, análoga a un cuaderno de laboratorio digital que el agente consulta antes de empezar cada sesión de trabajo.

El riesgo silencioso: datos experimentales en servidores de terceros

Existe un riesgo asociado al modelo de trabajo con agentes de IA que el debate actual sobre creatividad y automatización rara vez aborda, pero que tiene implicaciones inmediatas para cualquier grupo de investigación: la confidencialidad de los datos experimentales no publicados. Cuando un investigador utiliza un agente basado en servicios externos (GPT-4, Claude u otros modelos comerciales) para procesar datos de un proyecto en curso, esos datos transitan por servidores de terceros. En un contexto de competencia internacional por prioridad científica y patentes, esto constituye un riesgo real de exposición de

propiedad intelectual que la mayoría de los investigadores no evalúa explícitamente antes de usar la herramienta.

El problema tiene tres dimensiones concretas. Primera: los datos previos a publicación (composiciones de materiales, espectros de compuestos nuevos, rendimientos de síntesis no optimizadas) pueden quedar almacenados en los registros del proveedor del servicio de IA, con políticas de retención de datos que varían entre proveedores y que el usuario rara vez lee con detenimiento. Segunda: los modelos de lenguaje entrenados sobre grandes corpus pueden memorizar fragmentos de los datos que procesan; investigadores en seguridad informática han demostrado que es posible extraer datos de entrenamiento de modelos comerciales mediante técnicas de ataque dirigidas. Shanmugarasa y colaboradores documentaron en CHI 2025 que los científicos frecuentemente introducen datos confidenciales en sus interacciones con LLMs sin ser conscientes de los riesgos asociados, y que la naturaleza conversacional de estas herramientas fomenta la revelación de más información de la inicialmente prevista.^[11] Tercera: la mayoría de universidades y agencias de financiación carecen de políticas explícitas sobre qué datos experimentales pueden procesarse mediante APIs de IA externas. El investigador opera en un vacío normativo que la velocidad de adopción de estas herramientas ha dejado atrás.

La arquitectura de trabajo descrita en la sección anterior ofrece una respuesta estructural parcial a este problema. En el modelo de scripts locales orquestados por un agente, los datos experimentales se procesan localmente: el script de TGA, el de IR, el de Raman, todos operan sobre archivos en el sistema del investigador. El agente orquestador solo necesita saber si el script se ejecutó correctamente, cuántos archivos procesó y si hubo errores. Los datos crudos y los resultados procesados nunca necesitan salir del sistema local. Lo que sí transita por el servidor externo son las instrucciones en lenguaje natural y los informes de sesión, que contienen metadatos del proyecto, pero no los datos experimentales en sí. Esta separación entre el plano de datos (local) y el plano de orquestación (potencialmente remoto) no es un efecto colateral del diseño: es una ventaja arquitectónica que debe preservarse de forma deliberada. El investigador que envía un espectro completo como prompt a un chatbot comercial para que lo interprete está cediendo datos innecesariamente; el que ejecuta un script local sobre ese espectro y le pide al agente que verifique la ejecución está protegiendo su propiedad intelectual sin perder ninguna capacidad de procesado. La Figura 2 contrasta ambos modelos.

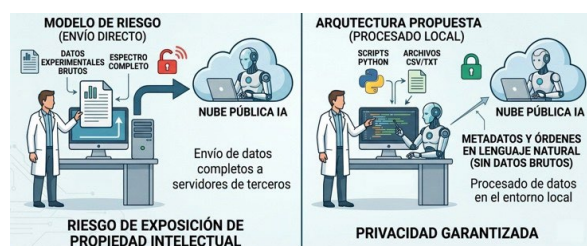


Figura 2. Contraste entre el modelo de riesgo (izquierda), donde los datos experimentales brutos se envían íntegramente a servicios externos de IA, y la arquitectura propuesta (derecha), donde el procesado ocurre localmente y solo transitan hacia el servidor remoto instrucciones en lenguaje natural y metadatos, sin datos brutos.

La recomendación operativa es directa: antes de incorporar cualquier herramienta de IA al flujo de trabajo del grupo, el investigador debe responder tres preguntas. ¿Qué datos van a

transitar por servidores externos? ¿Cuál es la política de retención de datos del proveedor? ¿Existe una alternativa arquitectónica que mantenga los datos sensibles en el sistema local? Si la respuesta a la tercera pregunta es afirmativa, la arquitectura de scripts locales con orquestación remota descrita en este ensayo proporciona exactamente esa alternativa.

Esta misma lógica de herramientas especializadas orquestadas por un modelo de lenguaje ha sido implementada con éxito en síntesis orgánica por Bran y colaboradores con ChemCrow, que ya habíamos comentado anteriormente,^[9] un agente basado en GPT-4 que integra 18 herramientas diseñadas por expertos en química, incluyendo planificación retrosintética, predicción de reacciones, verificación de seguridad y ejecución robótica. El agente planificó y ejecutó de forma autónoma la síntesis de un repelente de insectos y tres organocatalizadores, y guió el descubrimiento de un nuevo cromóforo. La arquitectura de ChemCrow es conceptualmente idéntica a la que este ensayo describe para el procesado de datos experimentales: el LLM no sabe química; razona sobre qué herramienta usar y en qué orden, exactamente como el agente orquestador de nuestro sistema no analiza espectros sino que ejecuta scripts que sí lo hacen. La diferencia entre ambos sistemas no es de principio sino de escala y dominio.

Scheurer y Reuter, en una perspectiva en *Nat. Catal. 2025*, sintetizan la conclusión operativa desde los laboratorios autónomos de catálisis: el pleno potencial de los laboratorios autodirigidos requiere supervisión humana sostenida para garantizar la curación rigurosa de datos, validar hipótesis generadas por las máquinas y establecer referencias para mitigar errores de la IA.^[12] No es una posición defensiva; es la conclusión de quienes están construyendo los sistemas más avanzados del campo.

La posición más directa quizás sea la de Dadfar y colaboradores en *Macromol. Rapid Commun.*: la verdadera innovación no provendrá de la plena autonomía, sino de una colaboración simbiótica humano-IA donde la intuición, los conocimientos creativos y la experiencia en el dominio científico se armonizan con el poder algorítmico.^[13] El químico de materiales que usa IA para procesar sus datos de Raman no está siendo sustituido; está siendo liberado para pensar en qué significa la firma espectral que la IA acaba de representar.

El ensayo estaría sin embargo en deuda intelectual si no nombrara con rigor las posiciones que cuestionan esta arquitectura de complementariedad. Hay voces científicas serias que abogan por una automatización más amplia, no como escenario futuro sino como trayectoria activa. Boiko y colaboradores demostraron en *Nature 2023* que sistemas basados en grandes modelos de lenguaje son capaces de realizar investigación química autónoma de extremo a extremo: proponer síntesis, planificar experimentos, ejecutarlos físicamente mediante robótica integrada e interpretar resultados sin intervención humana continua.^[14] Su sistema sintetizó con éxito compuestos no previstos en el diseño original. Kitano, por su parte, planteó en 2021 el Nobel Turing Challenge: la hipótesis de que un sistema de IA podría, antes de 2050, realizar una contribución científica de calidad Nobel en biología de sistemas —no como herramienta de un científico humano, sino como agente independiente.^[15] Estas posiciones no son especulación marginal; representan la dirección en la que una parte del campo está invirtiendo recursos y talento. El debate sobre dónde situar la frontera entre autonomía de la IA y criterio humano no está cerrado. Este ensayo defiende una posición concreta —el criterio humano es necesario en el estadio actual de desarrollo— pero reconoce que esa posición tiene una vigencia temporal: lo que es indelegable hoy puede dejar de serlo en un horizonte de diez o veinte años. La

discusión debe permanecer abierta, no porque la respuesta sea incierta, sino porque la respuesta cambiará.

Transformar el espacio de trabajo: del flujo de dependencias al sistema de agentes

La mejor forma de ilustrar el modelo correcto no es con ejemplos de laboratorios de vanguardia tecnológica, sino con la transformación concreta de un espacio de trabajo real. Todo investigador opera dentro de lo que en ingeniería de sistemas se denomina Sistema de Trabajo: el conjunto de entornos, herramientas, personas y procesos de los que depende para hacer avanzar su trabajo. En un laboratorio de caracterización de materiales, ese entorno de trabajo incluye los instrumentos de medida, los estudiantes de doctorado que procesan datos, el software de análisis, las plantillas de figura y los flujos de comunicación con colaboradores. Cada uno de esos elementos constituye una dependencia crítica, donde cualquier falla o ineficiencia se traduce en un cuello de botella para el avance científico.

La transformación de ese Sistema de trabajo no es un proceso único sino una secuencia de tres pasos distintos que conviene no mezclar, porque cada uno tiene su propia lógica y sus propias herramientas (Figura 3).

El primero es esquematizar. Antes de tocar ninguna herramienta, el investigador debe dibujar el flujo: definir las entradas (inputs) de cada módulo, la lógica de transformación y las salidas (outputs) resultantes. Para cada proceso o persona involucrada en el tratamiento de datos hay que responder esa pregunta concreta. Si la respuesta es «recibe un archivo bruto del instrumento, aplica estos criterios de procesado y devuelve una gráfica formateada», estamos ante una tarea que es susceptible de automatizarse. No requiere juicio científico para ejecutarse; requiere juicio científico para definir los criterios y para evaluar el resultado. Esa distinción —entre ejecutar y juzgar— es exactamente la que determina qué puede delegarse y qué no.

El segundo paso es automatizar. Una vez esquematizado el flujo, se identifican los módulos que pueden convertirse en software: scripts Python, aplicaciones de escritorio, canalizaciones (pipelines) de línea de comandos. Aquí es donde la IA puede ayudar de forma muy concreta: el investigador le describe en lenguaje natural qué debe hacer cada módulo —qué columnas leer, qué transformaciones aplicar, qué criterio estadístico usar para eliminar valores atípicos, qué aspecto debe tener la figura de salida— y el agente genera el script correspondiente en una o dos horas de trabajo conjunto, partiendo de los archivos reales del instrumento. Conviene subrayar lo que ocurre en este paso: la IA ayuda a construir la automatización, pero no es ella quien automatiza. Lo que resulta de este paso son scripts deterministas que aplican criterios predefinidos de forma reproducible. El script es la automatización; la IA fue la herramienta para construirla.

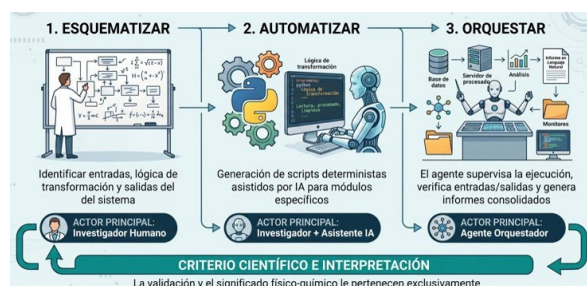


Figura 3. Ciclo de transformación del flujo de trabajo experimental mediante sistemas de agentes de IA. Los pasos 1–3 constituyen el flujo automatizable; la validación científica permanece íntegramente en manos del investigador.

El tercer paso es la orquestación. Traducir ese sistema automatizado a instrucciones en lenguaje natural para que un agente de IA pueda orquestarlo. Aquí es donde entra en juego el agente propiamente dicho: no como analizador de datos, sino como supervisor del flujo automatizado. El agente recibe instrucciones del tipo «hay una carpeta con archivos de esta técnica; ejecuta este script sobre cada uno de ellos; guarda los resultados en esta subcarpeta; verifica que el número de archivos de salida coincide con el de entrada; genera un informe de sesión». El agente no decide qué datos son válidos científicamente: aplica los criterios que el investigador ya definió en el paso anterior e informa si la ejecución fue correcta. Es la diferencia entre pedirle a un asistente que procese cien muestras siguiendo un protocolo escrito —tarea perfectamente delegable— y pedirle que decida cuál de las muestras tiene el comportamiento más interesante —tarea que requiere criterio de dominio que no está en el protocolo.

Esta arquitectura aplica del mismo modo a cada técnica del sistema. El caso del análisis termogravimétrico (TGA) ilustra con precisión qué significa esto en la práctica. El instrumento —un TA Instruments SDT Q600— exporta ficheros de texto con codificación UTF-16 LE y aproximadamente 8400 puntos por muestra: tiempo, temperatura y peso en mg. El script *tga_batch_all.py* lee cada fichero, localiza el marcador de inicio de datos, extrae las columnas relevantes, normaliza el peso respecto al valor inicial, genera el fichero formateado para visualización y exporta la figura en PNG. Un segundo script convierte en lote todos los ficheros de salida. El agente orquestador lanza ambos scripts sobre la carpeta del proyecto en el orden correcto, verifica que el número de ficheros de salida coincide con el de entrada, e informa si alguno produjo error. La misma lógica se reproduce en cada técnica del sistema: espectroscopía IR, Raman, mecánicas, reología, porosimetría, entre otras, cada una con su propio script especializado y sus propios criterios de procesado encapsulados. El agente no necesita saber de qué técnica se trata: sigue el protocolo documentado para cada módulo. Lo que no hace ningún script ni ningún agente es decidir si la pérdida de masa observada entre 200 y 400 °C corresponde a desorción de disolvente retenido, a degradación de cadenas poliméricas laterales o a una contaminación de la muestra: esa interpretación exige conocer la composición del material, el protocolo de síntesis y el contexto del experimento. El sistema gestiona el tratamiento de datos; la interpretación de los resultados permanece íntegramente en manos del investigador.

Hay un riesgo específico que conviene nombrar sin eufemismos. Si en lugar de darle al agente instrucciones concretas y criterios predefinidos se le pide que «analice los datos y determine cuándo la muestra tuvo el mayor impacto», el agente producirá una respuesta —siempre produce una respuesta— pero esa respuesta será una interpolación estadística sin fundamento físicoquímico. Es el escenario de alucinación aplicado a ciencia experimental: el resultado parece coherente, está redactado con seguridad, y puede estar completamente equivocado. La barrera contra ese escenario no es tecnológica; es procedimental. El investigador debe definir con precisión qué puede pedirle al agente y qué no puede pedirle, exactamente cómo define qué puede pedirle a un doctorando recién incorporado y qué aún no.

Una vez completados los tres pasos, el sistema resultante es modular y extensible. En el plano experimental, cada módulo corresponde a una técnica de caracterización instrumental: espectroscopía infrarroja, análisis termogravimétrico, ensayos mecánicos uniaxiales, difracción de rayos X, microscopía electrónica de barrido y transmisión, espectroscopía fotoelectrónica de rayos X, área superficial BET, análisis elemental. En el plano

computacional, los cálculos de estructura electrónica —DFT y métodos derivados— operan en una capa diferente, con archivos de salida de códigos de simulación y criterios de validación propios. Cuando aparece un nuevo instrumento o técnica, el proceso de incorporación es siempre el mismo: esquematizar el nuevo módulo, desarrollar el script con ayuda del agente y añadirlo a la cadena de procesado. La lógica científica no cambia; solo cambia el adaptador de formato.

Este último punto tiene una implicación práctica inmediata para cualquier investigador que haya cambiado de laboratorio. Cuando los instrumentos son diferentes o más nuevos, los archivos que exportan pueden tener un separador de columnas distinto, una codificación diferente (UTF-16 en lugar de ASCII) o un encabezado con dos líneas más. En el flujo manual, eso significa días de adaptación. En el sistema de agentes, significa actualizar el módulo de lectura del script correspondiente sin tocar el resto de la cadena de procesado. El conocimiento científico de cómo procesar esos datos —los criterios, las correcciones, los umbrales— está encapsulado en la lógica del módulo y se preserva íntegro.

También conviene señalar que el esquema del flujo —la descripción de qué hace cada módulo y por qué— no es únicamente un insumo para el agente. Es en sí mismo un activo científico del grupo: convierte el conocimiento tácito del investigador en un documento auditable, transferible a nuevos miembros del equipo y reutilizable en futuros proyectos. La automatización del procesado tiene como subproducto la explicitación del criterio científico que lo sustenta. Eso tiene valor más allá de la eficiencia.

La tabla siguiente recoge las comparativas de tiempo de un caso de estudio real en un único grupo de investigación de materiales (hidrogeles funcionales y nanomateriales de carbono). Los datos son estimaciones propias del grupo, no validadas de forma independiente, y se presentan como caso ilustrativo, no como evidencia cuantitativa generalizable. El argumento de fondo no es la velocidad: es que el flujo manual no escala y no garantiza coherencia entre figuras ni trazabilidad del procesado. El sistema de agentes procesa cien muestras con el mismo esfuerzo que diez:

Tabla 1. Caso de estudio ilustrativo: comparativa de tiempo manual frente a flujo con agente de IA en proyectos de caracterización de materiales. Estimaciones propias del grupo; no validadas de forma independiente.

Tarea / escenario	Tiempo manual	Con agente IA	Factor x
FTIR proyecto completo (20 muestras)	10–14 h	20–30 min	25–40x
TGA proyecto completo (20 curvas)	10–14 h	20–30 min	25–40x
Mecánicas (4 muestras x 5 réplicas)	4–6 h	5–10 min	40–70x
Proyecto completo hidrogeles (~60 archivos)	~31 h – 4 días	~45 min	~40x
Proyecto nanomateriales (~200 archivos)	10–15 días	3–5 h	~50x

Es relevante distinguir entre tener scripts y tener agentes, porque la diferencia no es cosmética. Un script falla con un error crítico cuando encuentra un formato de archivo inespera-

do; el agente diagnostica el problema, identifica la causa y propone la solución en la misma sesión. Un script no tiene memoria entre ejecuciones; el agente mantiene el estado del proyecto entre sesiones y sabe qué muestras ya fueron procesadas y cuáles no. Pero la distinción más importante no está en ninguna de estas capacidades: está en la fila final de la tabla siguiente.

Que ambas columnas muestren X en la validación científica no es un fallo del sistema: es su característica más importante. Revisar visualmente que una figura tiene buena pinta —que la curva no tiene artefactos obvios, que los ejes están bien escalados— no es validación científica. Es control de calidad formal, necesario pero insuficiente.

La validación científica real ocurre cuando el investigador se pregunta:

- ¿son correctas las asignaciones espectrales a la vista de la composición esperada del material?
- ¿La temperatura de degradación térmica es coherente con lo que sé de este sistema?
- ¿El módulo elástico calculado tiene sentido para este tipo de hidrogel a esta concentración?

Esas preguntas no las puede formular el script ni el agente porque requieren conocimiento de dominio que no está en los datos del proyecto actual. Sin esa validación de segundo nivel, los resultados generados en cuarenta minutos son datos con buena presentación, no ciencia. Con ella, son el punto de partida para la interpretación.

Tabla 2. Diferencias funcionales entre un script Python standalone y un agente de IA que orquesta esos scripts. La fila de validación científica es la única que muestra X en ambas columnas: ni el script ni el agente pueden reemplazar el juicio del investigador.

Capacidad	Solo con script	Con agente IA
Detectar formato inesperado de archivo	X Falla con error	✓ Diagnostica y sugiere solución
Adaptar código a nueva variante de muestra	X No	✓ Modifica bajo supervisión
Crear script para técnica nueva	X No	✓ ~1–2 h incluyendo tests
Detectar valores atípicos en los datos	X No	✓ Implementa criterio estadístico
Identificar artefactos visuales en la figura de salida (escala de ejes, superposición de curvas, truncado de etiquetas)	X No	✓ Lee el fichero .agr e identifica el problema
Aplicar el mismo modelo a cada técnica (TGA, IR, Raman...) con sus criterios propios	△ Sólo el script activo	✓ Orquesta todos los módulos
Mantener memoria entre sesiones	X No	✓ MCP + memoria automática
Validación científica del resultado	X No	X Siempre requiere al investigador

La brecha de formación: el problema empieza en el profesorado

La discusión sobre cómo integrar la IA en la formación química se formula casi siempre en términos del alumno: ¿debe aprender Python en el grado? ¿En qué curso? ¿Reemplaza esto a la formación experimental clásica? Estas preguntas son legítimas, pero están mal ordenadas. El problema no empieza en el alumno. Empieza en el profesor.

Un docente que no ha transformado nunca su propio espacio de trabajo con herramientas de IA no puede enseñar a sus alumnos a evaluar si el resultado de esa transformación es científicamente correcto. No porque no sepa química —sabe más que suficiente—, sino porque no ha pasado por el proceso de mapear sus propias dependencias, documentar qué hace cada módulo de su flujo de trabajo, y comprobar empíricamente cuándo el agente se equivoca y por qué. Ese proceso es exactamente el que genera el criterio específico que no se puede transmitir de ninguna otra manera: saber cuándo la corrección automática de línea de base ha eliminado la señal junto con el ruido, reconocer que el módulo de ajuste ha sobreajustado sobre un artefacto experimental, identificar que el valor atípico descartado es, en realidad, la muestra con el comportamiento más interesante. Ese criterio no se lee en un artículo; se construye procesando datos reales y cometiendo errores reales con las herramientas.

El desafío es, por lo tanto, de capacitación docente antes que de reforma curricular. Y es más urgente, porque el desfase está ocurriendo ahora mismo. Los estudiantes tienen acceso a herramientas de IA que sus profesores no dominan en la práctica. Esto genera dos patologías simétricas. La primera es la prohibición reactiva: el docente que desconfía de la herramienta porque no entiende qué hace, y prohíbe su uso por precaución, privando a los alumnos de aprender a usarla con criterio. La segunda, más peligrosa, es la permisividad acrítica: el alumno que automatiza el procesamiento de sus datos, obtiene figuras perfectas, y no tiene a nadie en el aula que le enseñe a preguntarse si esas figuras son correctas. En ambos casos el resultado es el mismo: se produce más y se comprende menos.

La capacitación del profesorado no requiere que los docentes se conviertan en ingenieros de software. Requiere exactamente lo contrario: que recorran los tres pasos descritos en la sección anterior —esquematizar su propio flujo de trabajo, automatizar los módulos susceptibles de ello, y traducir el resultado a instrucciones que un agente pueda orquestar— desde su conocimiento de dominio y con sus propios datos reales. Aquí aparece una objeción legítima que conviene afrontar directamente: ¿cómo hace esa transición un investigador con treinta años de experiencia cuyo criterio científico se ha construido íntegramente en un flujo de trabajo manual? La respuesta es que ese investigador tiene precisamente la ventaja que el proceso necesita. Su valor no está en aprender a programar; está en ser la referencia contra la que se valida el sistema. El proceso concreto es el siguiente: tomar un conjunto de datos ya procesado manualmente —uno sobre el que el investigador tiene criterio formado y conoce el resultado correcto— y comprobar si el sistema automatizado produce el mismo resultado con los mismos criterios. Las discrepancias revelan exactamente dónde la esquematización del flujo no capturó el juicio implícito del experto. Ese ejercicio —procesar datos conocidos con el sistema y comparar— es la forma más eficiente de desarrollar criterio sobre los límites de la herramienta sin necesidad de abandonar la base de conocimiento propia.

La distinción pedagógica clave es la misma que estructura todo el argumento de este ensayo: enseñar a usar IA como herramienta de procesamiento de datos dentro de su propio espacio

de trabajo es fundamentalmente diferente de enseñar a desarrollar modelos de IA. Un investigador que usa un agente para procesar sus datos espectrales no necesita entender la arquitectura del modelo subyacente, del mismo modo que no necesita entender la electrónica del espectrómetro para interpretar el espectro. Lo que sí necesita —y esto no es opcional— es el criterio para evaluar si el resultado que el agente produce es físicamente razonable. Y ese criterio solo lo puede transmitir quien haya aprendido a ejercerlo. Esta posición no desestima otras vías de formación que se están abriendo paso en distintas universidades: la incorporación de cursos de Python aplicado a química, ciencia de datos o introducción al aprendizaje automático en los grados de química, frecuentemente en colaboración con departamentos de ingeniería química o informática, responde a una necesidad real y complementaria. Algunas universidades internacionales —MIT, ETH Zürich o Stanford entre las más citadas— llevan años integrando estas competencias de forma sistemática en sus programas de ciencias, lo que ha generado un desfase formativo que en el contexto español aún está lejos de resolverse sistemáticamente. El argumento de este ensayo opera en una capa diferente: la del docente como árbitro de criterio científico ante los resultados que esas herramientas producen.

La industria ya ha decidido: universidad y empresa ante el mismo problema

La discusión sobre IA en investigación química se ha desarrollado mayoritariamente en el contexto académico, pero la mayoría de los graduados en química no acaban en universidades ni en centros de investigación públicos. Acaban en empresas farmacéuticas, de materiales, de control de calidad y de desarrollo de producto. Y esas empresas ya han decidido, o están a punto de hacerlo: la IA se implementa. El concepto de transformación del espacio de trabajo que este ensayo describe desde el laboratorio académico es exactamente el mismo proceso que los equipos de ingeniería de sistemas están ejecutando en entornos industriales, con la diferencia de que en la industria la presión temporal es mayor y el debate filosófico sobre la creatividad científica no existe. Lo que existe es presión por reducir tiempos de ciclo, eliminar errores en control de calidad y acelerar la validación. La IA responde a esas necesidades de forma directa.

El problema no es que la industria carezca de químicos con criterio de dominio —las grandes empresas farmacéuticas y de materiales emplean investigadores con doctorado y décadas de experiencia—. El problema es más sutil y más extendido: la ausencia de un proceso sistemático de documentación del criterio científico antes de automatizar. En muchos entornos industriales, el conocimiento de dominio existe pero está en la cabeza del experto, no en un documento de especificación que el sistema de automatización pueda ejecutar y el equipo pueda auditar. Cuando ese experto no está en el bucle de validación de cada resultado —porque el sistema ya corre de forma autónoma— y nadie ha documentado explícitamente qué criterios aplica y por qué, la coherencia interna de la cadena de procesamiento no garantiza la corrección científica del resultado. Es exactamente el mismo riesgo que en la academia, pero a mayor escala y con consecuencias más directas sobre producto o decisión regulatoria. El proceso de transformación del espacio de trabajo descrito en la sección anterior —mapear, documentar, implementar, validar— no es solo una metodología académica; es el proceso que la industria necesita para que la automatización produzca resultados en los que se puede confiar.

El criterio científico no documentado es el eslabón débil de cualquier cadena de automatización, en la academia y en la

industria. Si no está escrito y validado, no puede auditarse. Si no puede auditarse, el sistema es coherente pero no necesariamente correcto.

La colaboración estructural entre universidad e industria tiene aquí su argumento más sólido, y es uno que va más allá del intercambio tecnológico habitual. No se trata de que la academia transfiera herramientas a la industria; se trata de que la academia forme profesionales capaces de actuar como árbitros de criterio dentro de los equipos industriales que implementan IA. El investigador académico que ha transformado su espacio de trabajo aporta exactamente lo que el equipo de ingeniería no tiene: la capacidad de especificar qué hace cada módulo desde el punto de vista del dominio, de validar que el resultado es científicamente correcto, y de identificar cuándo el sistema se equivoca. El ingeniero aporta lo que el investigador no tiene: la infraestructura para escalar esa lógica a miles de muestras, la integración con sistemas de producción y la gestión de la arquitectura de datos. Juntos cierran el ciclo. Por separado, cada uno tiene la mitad del sistema.

Conclusiones

El investigador de hoy opera en un espacio de trabajo lleno de dependencias: personas que procesan datos, instrumentos que exportan archivos en formatos propietarios, software que aplica correcciones, plantillas que dan coherencia visual a los resultados. Muchas de esas dependencias son software puro: reciben unos datos de entrada, aplican una lógica determinada y devuelven un resultado. Pueden —y deben— automatizarse. El proceso para hacerlo no empieza con código; empieza con el mapeo preciso de qué hace cada módulo del espacio de trabajo, documentado desde el conocimiento de dominio del investigador. Una vez documentado ese conocimiento, el agente puede implementarlo, adaptarlo y mantenerlo con una fracción del tiempo que requería el flujo manual.

Lo que ese proceso libera no es tiempo libre. Es capacidad cognitiva redirigida hacia las únicas tareas que no pueden automatizarse: diseñar los experimentos que tienen sentido, formular las hipótesis que el espacio de datos conocido no puede generar, y evaluar si lo que el agente produjo tiene significado científico real. La evidencia empírica, tanto propia como de la literatura, es consistente: cuando la IA ocupa ese segundo dominio sin criterio humano detrás, la calidad se degrada y los errores se propagan sin detección. Cuando se le asigna el primero, el investigador recupera el tiempo para ejercer el segundo.

Las implicaciones son concretas en tres frentes simultáneos. En el laboratorio: transformar el espacio de trabajo identificando qué dependencias son automatizables y construyendo los módulos correspondientes, empezando por las técnicas de mayor carga repetitiva. En la formación: capacitar primero al profesorado en la transformación de sus propios flujos de trabajo, porque el criterio de evaluación de los resultados de la IA no puede enseñarse sin haberlo ejercido. En la colaboración universidad-empresa: construir equipos donde el experto de dominio especifica y valida, y el ingeniero implementa y escala, reconociendo que ninguno de los dos puede hacer bien el trabajo del otro.

Lo que no puede delegarse —en ningún contexto, académico o industrial— es el criterio para saber cuándo el sistema se equivoca. La IA procesa; el investigador decide. La IA aplica los criterios que le hemos documentado; el científico evalúa si esos criterios siguen siendo válidos cuando el resultado aparece. Ese

criterio no lo da el agente. Lo da años de trabajo con datos reales, errores reales y conocimiento de dominio que ningún modelo puede aprender porque nunca ha estado en el laboratorio.

Agradecimientos

Los autores agradecen al Dr. Antonio de la Hoz (UCLM) su lectura crítica de versiones previas del manuscrito y sus sugerencias sobre precisión terminológica.

Bibliografía

- [1] K. Guo, Y. Shen, G. A. Gonzalez-Montiel, Y. Huang, Y. Zhou, M. Surve, Z. Guo, P. Das, N. V. Chawla, O. Wiest, X. Zhang, *arXiv* **2025**, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2502.09897>.
- [2] A. R. Flanagan, D. Dalal, F. G. Glavin, *Chem. Rev.* **2025**, *125*, 6130-6155, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.4c00815>.
- [3] J. Workman Jr., *Spectroscopy* **2026**, *41*, 8-11.
- [4] H. Wang, T. Fu, Y. Du, W. Gao, K. Huang, Z. Liu, P. Chandak, S. Liu, P. Van Katwyk, A. Deac, A. Anandkumar, K. Bergen, C. P. Gomes, S. Ho, P. Kohli, J. Lasenby, J. Leskovec, T.-Y. Liu, A. Manrai, D. Marks, B. Ramsundar, L. Song, J. Sun, J. Tang, P. Veličković, M. Welling, L. Zhang, C. W. Coley, Y. Bengio, M. Zitnik, *Nature* **2023**, *620*, 47-60, <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06221-2>.
- [5] K. Hulick, *Science News*, disponible en <https://www.science-news.org/article/ai-enabled-science-discovery-insight>, 18 feb. **2026** (consultado 17/06/2026).
- [6] A. Mirza, N. Alampara, S. Kunchapu, M. Ríos-García, B. Emoekabu, A. Krishnan, T. Gupta, M. Schilling-Wilhelmi, M. Okereke, A. Aneesh, M. Asgari, J. Eberhardt, A. M. Elahi, H. M. Elbeheiry, M. V. Gil, C. Glaubit, M. Greiner, C. T. Holick, T. Hoffmann, A. Ibrahim, L. C. Klepsch, Y. Köster, F. A. Kreth, J. Meyer, S. Mirot, J. M. Peschel, M. Ringleb, N. C. Roesner, J. Schreiber, U. S. Schubert, L. M. Stafast, A. D. D. Wonanke, M. Pieler, P. Schwaller, K. M. Jablonka, *Nat. Chem.* **2025**, *17*, 1027-1034, <https://doi.org/10.1038/s41557-025-01815-x>.
- [7] C. Lu, C. Lu, R. T. Lange, Y. Yamada, S. Hu, J. Foerster, D. Ha, J. Clune, *Nature* **2026**, *651*, 914-919, <https://doi.org/10.1038/s41586-026-10265-5>.
- [8] L. Messeri, M. J. Crockett, *Nature* **2024**, *627*, 49-58, <https://doi.org/10.1038/s41586-024-07146-0>.
- [9] A. M. Bran, S. Cox, O. Schilter, C. Baldassari, A. D. White, P. Schwaller, *Nat. Mach. Intell.* **2024**, *6*, 525-535, <https://doi.org/10.1038/s42256-024-00832-8>.
- [10] Y. Dai, H. Chan, A. Vriza, J. Fan, F. Kim, Y. Wang, W. Liu, N. Shan, J. Xu, M. Weires, Y. Wu, Z. Cao, C. S. Miller, R. Divan, X. Gu, C. Zhu, S. Wang, J. Xu, *Nat. Chem. Eng.* **2025**, *2*, 760-770, <https://doi.org/10.1038/s44286-025-00318-3>.
- [11] Y. Shanmugarasa, S. Pan, M. Ding, D. Zhao, T. Rakotoarivelo, en *Proceedings of the 2025 CHI Conference on Human Factors in Computing Systems*, (Eds.: N. Yamashita, V. Evers), ACM, New York, NY, 2025, pp. 1-8, <https://doi.org/10.1145/3706599.3720099>.
- [12] C. Scheurer, K. Reuter, *Nat. Catal.* **2025**, *8*, 13-19, <https://doi.org/10.1038/s41929-024-01275-5>.
- [13] B. Dadfar, B. Alemdag, G. Kabay, *Macromol. Rapid Commun.* **2025**, *46*, e00380, <https://doi.org/10.1002/marc.202500380>.
- [14] D. A. Boiko, R. MacKnight, B. Kline, G. Gomes, *Nature* **2023**, *624*, 570-578, <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06792-0>.
- [15] H. Kitano, *npj Syst. Biol. Appl.* **2021**, *7*, 29, <https://doi.org/10.1038/s41540-021-00189-3>.



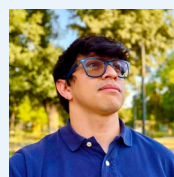
Antonio M. Rodríguez-García

IRICA-FCTQ, MSOC NanoChemistry, Universidad de Castilla-La Mancha, Ciudad Real, España

C-e: antoniom.rodriguez@uclm.es

ORCID: 0000-0002-4405-2406

Profesor Titular en la Universidad de Castilla-La Mancha. Desarrolla su investigación en el grupo MSOC NanoChemistry (IRICA) en la síntesis mecanoquímica de nanomateriales 2D funcionalizados y su aplicación en electrocatalisis. Investiga con un creciente interés en la integración de procesos de machine-learning y automatización de sistemas en el flujo de trabajo experimental del laboratorio académico.



Carlos E. Ynojosa Reyes

Digio Soluciones Digitales, Murcia, España

C-e: ce.ynojosa@gmail.com

ORCID: 0009-0002-1954-6057

Ingeniero de sistemas con más de una década y media involucrado en la digitalización de procesos B2B. Especializado en la arquitectura de plataformas web, la automatización de flujos de trabajo y sus últimos proyectos basados en el diseño y desarrollo de soluciones impulsadas por inteligencia artificial (agentes IA). Su enfoque técnico prioriza la creación de orquestadores de datos (científicos y empresariales) robustos, garantizando la transparencia, trazabilidad y la traducción exacta de los criterios de dominio a código auditable.

¿Quieres formar parte de una de las sociedades científicas más importantes de España?

Si tienes menos de 28 años hazte miembro por 20 €



 Real Sociedad Española de Química

www.rseq.org



Estructuras imidazolato zeolíticas (ZIFs): de materiales cristalinos porosos a vidrios híbridos funcionales

Zeolitic imidazolate frameworks (ZIFs): from porous crystalline materials to functional hybrid glasses

Luis León Alcaide¹ y Guillermo Mínguez Espallargas^{2,*}

¹ Departamento de Ciencia de Materiales y Metalurgia, Universidad de Cambridge.

² Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), Universidad de Valencia.

PALABRAS CLAVE:

ZIFs
MOFs
Vidrios híbridos
Materiales porosos
Amorfización

RESUMEN:

Las estructuras imidazolato zeolíticas, cuyas siglas son ZIFs (por su nombre en inglés, *zeolitic imidazolate frameworks*), constituyen una de las familias más versátiles dentro de los materiales metal-orgánicos. Su éxito se debe a la combinación de una elevada estabilidad química y térmica, una gran diversidad estructural y la posibilidad de modular sus propiedades mediante la selección del metal, del ligando y del método de síntesis. En los últimos años, el interés por los ZIFs ha crecido todavía más debido al descubrimiento de sus fases amorfas, líquidas y vítreas, que abren una nueva dimensión en la química de materiales híbridos. En este trabajo se revisan los fundamentos estructurales de los ZIFs, su polimorfismo, sus principales rutas de síntesis y su capacidad para amorfizar, fundirse y formar vidrios. También se discuten sus técnicas de caracterización y sus aplicaciones emergentes en separación de gases, almacenamiento de energía, óptica y materiales funcionales.

KEYWORDS:

ZIFs
MOFs
Hybrid glasses
Porous materials
Amorphization

ABSTRACT:

Zeolitic imidazolate frameworks (ZIFs) are one of the most versatile families within metal-organic materials. Their success arises from the combination of high chemical and thermal stability, broad structural diversity, and the possibility of tuning their properties through the choice of metal, linker, and synthetic route. In recent years, interest in ZIFs has increased even further due to the discovery of their amorphous, liquid, and glassy phases, which open a new dimension in the chemistry of hybrid materials. This article reviews the structural foundations of ZIFs, their polymorphism, their main synthetic approaches, and their ability to amorphize, melt, and form glasses. Their characterization and emerging applications in gas separation, energy storage, optics, and functional materials are also discussed.

Introducción

La química de materiales porosos ha experimentado una transformación profunda en las últimas décadas. Durante mucho tiempo, el protagonismo en este campo estuvo dominado por materiales inorgánicos como las zeolitas, las sílices mesoporosas y los carbones activados. Sin embargo, el desarrollo de los materiales metal-orgánicos, conocidos como MOFs por sus siglas en inglés (*metal organic frameworks*), abrió nuevas posibilidades al permitir construir redes cristalinas a partir de la combinación racional de nodos metálicos y ligandos orgánicos.^[1-3] Esta estrategia modular permitió acceder a una enorme diversidad de arquitecturas, porosidades y funcionalidades químicas, hasta el punto de llevar a la concesión del Premio Nobel de Química de 2025 a Susumu Kitagawa, Richard Robson y Omar Yaghi por sus contribuciones pioneras al desarrollo de este campo.

Dentro de esta gran familia, las estructuras imidazolato zeolíticas, o ZIFs,^[4] ocupan una posición especialmente destacada. Desde su aparición, estos materiales, con topologías similares a las de las zeolitas inorgánicas, han atraído un enorme interés no solo por su porosidad, sino por reunir una serie de características poco comunes en el ámbito de los MOFs: elevada

estabilidad química, buena resistencia térmica, gran variedad topológica y una notable flexibilidad sintética.^[5] Todo ello ha convertido a los ZIFs en una plataforma de referencia para estudiar desde fenómenos de adsorción y separación de gases hasta aplicaciones en catálisis, biomedicina, membranas, películas delgadas y materiales compuestos.^[6]

No obstante, una de las aportaciones más sorprendentes de esta familia ha surgido en años recientes, cuando se observó que algunos ZIFs son capaces de ir más allá del estado cristalino convencional. En determinados casos, estos materiales pueden amorfizar, fundirse y, tras un enfriamiento controlado, generar vidrios híbridos, en un proceso conceptualmente análogo al observado en la sílice y otros vidrios inorgánicos clásicos.^[7] Este descubrimiento ha modificado de forma significativa la manera en la que entendemos los MOFs, tradicionalmente asociados a estructuras cristalinas rígidas y ordenadas. La posibilidad de obtener líquidos y vidrios a partir de redes metal-orgánicas ha abierto una nueva línea de investigación en la intersección entre química reticular, física del estado vítreo y ciencia de materiales funcionales.^[8]

En este contexto, los ZIFs representan un caso especialmente interesante. Por un lado, conservan la química de coordi-

CÓMO CITAR: L. León Alcaide, G. Mínguez Espallargas. *An. Quím. RSEQ* 2026, 122, 126-133, <https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2134>

* C-e: guillermo.minguez@uv.es

nación que caracteriza a los MOFs; por otro, muestran paralelismos estructurales con las zeolitas inorgánicas y, además, presentan analogías conceptuales con los vidrios de sílice. Esta combinación los convierte en un sistema ideal para explorar cómo la estructura, el desorden y la dinámica afectan a las propiedades de los materiales.^[9]

El objetivo de este artículo es ofrecer una visión general y divulgativa sobre los ZIFs, desde sus fundamentos estructurales y sintéticos hasta su evolución hacia fases amorfas y vítreas. Se discutirán su relación con las zeolitas, la importancia del polimorfismo, la variedad de métodos de síntesis y, de forma especial, su comportamiento térmico y la formación de vidrios. Finalmente, se presentarán las técnicas más utilizadas para su caracterización y algunas de las aplicaciones más prometedoras de estos materiales híbridos.

ZIFs: una familia singular dentro de los MOFs

Los ZIFs son redes tridimensionales construidas a partir de cationes metálicos, normalmente divalentes, enlazados por ligandos imidazolato o por derivados de este.^[10] La característica que los distingue de otros MOFs es que el ángulo formado entre dos centros metálicos unidos por un imidazolato es muy similar al ángulo Si–O–Si presente en las zeolitas (Figura 1).^[11] Esta coincidencia geométrica favorece la aparición de topologías análogas a las de las zeolitas inorgánicas y explica el origen de su nombre.

Este parentesco estructural no implica que ZIFs y zeolitas sean materiales equivalentes. Las zeolitas son redes puramente inorgánicas muy robustas, formadas por tetraedros de silicio y aluminio enlazados por oxígeno. Los ZIFs, en cambio, son materiales híbridos en los que la parte orgánica desempeña un papel decisivo. Esa naturaleza híbrida les confiere una mayor capacidad de ajuste químico, ya que es posible modificar tanto el metal como el ligando, introducir grupos funcionales o incluso mezclar distintos componentes dentro de una misma red.^[12] En otras palabras, los ZIFs combinan la regularidad topológica propia de una zeolita con la flexibilidad composicional típica de la química de coordinación y, en concreto, del campo de los MOFs.

El ejemplo más conocido dentro de la familia de los ZIFs es ZIF-8,^[5,13] una estructura formada por Zn^{2+} y 2-metilimidazolato, con topología tipo sodalita (Figura 2). ZIF-8 se ha convertido en uno de los materiales de referencia de toda la química de MOFs debido a su síntesis relativamente sencilla, al bajo coste de sus precursores, a su gran área superficial y a su notable estabilidad. Su estructura presenta cavidades nanométricas conectadas por ventanas estrechas, lo que le confiere un comportamiento muy interesante en procesos de separación molecular.^[14] Además, la facilidad con la que puede prepararse en diferentes tamaños de partícula, recubrimientos o membranas ha favorecido enormemente su expansión en múltiples campos.^[15]

La química de los ZIFs, sin embargo, va mucho más allá de ZIF-8. El uso de otros metales como Co,^[10] Fe,^[16] Mn,^[17] Cd^[18] o Mg,^[19] así como la incorporación de diferentes derivados del imidazol, permite acceder a toda una familia de redes con propiedades muy diversas. En muchos casos, pequeños cambios en la composición dan lugar a modificaciones importantes en la adsorción, en la respuesta mecánica, en la flexibilidad del esqueleto o en la estabilidad frente al aire y la humedad.^[20] De este modo, los ZIFs ilustran muy bien una idea central en ciencia de materiales: una ligera modificación local en la química de enlace puede producir un cambio macroscópico notable en las propiedades.

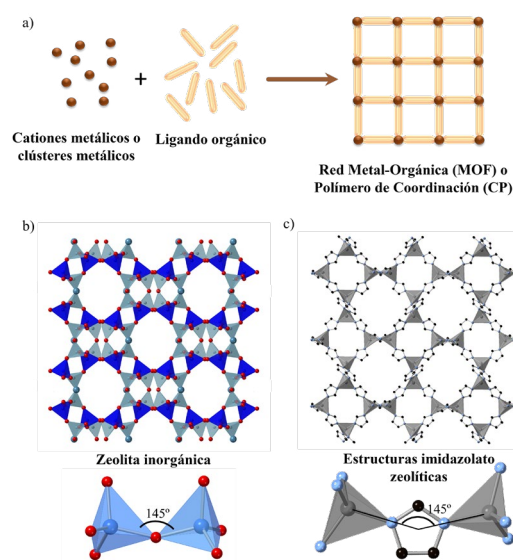


Figura 1. a. Representación esquemática de la formación de un MOF a partir de cationes metálicos, o clústeres metálicos, y ligandos orgánicos. b. Analogía estructural entre las zeolitas inorgánicas y las estructuras imidazolato zeolíticas (ZIFs).

Polimorfismo y diversidad estructural

Una de las razones por las que los ZIFs son tan interesantes es su marcado carácter polimórfico.^[21] El polimorfismo implica que una misma combinación de metal y ligando puede organizarse de varias maneras distintas, dando lugar a topologías diferentes. En el caso de los ZIFs, esta posibilidad es especialmente amplia debido a la flexibilidad angular de los enlaces metal–imidazolato y a la naturaleza relativamente rotacional del ligando.

Este fenómeno tiene consecuencias importantes. En primer lugar, significa que la química de ZIFs no puede entenderse únicamente en términos de composición, sino también de estructura.^[22] Dos materiales con la misma fórmula pueden presentar distinta porosidad, diferente densidad, distinta estabilidad térmica y comportamientos muy diferentes frente a la adsorción o los cambios de temperatura. En segundo lugar, el polimorfismo desempeña un papel crucial en la aparición del estado líquido y del estado vítreo en estos materiales, ya que la relación entre fases metaestables y fases más densas influye directamente en la capacidad del material para amorfizar o fundirse.^[23]

La topología accesible depende en gran medida de la naturaleza del ligando. Los ligandos pequeños, como el imidazolato, tienden a permitir una mayor variedad de redes, mientras que el aumento de volumen reduce el número de topologías posibles. En términos sencillos, cuanto más voluminoso o más rígido es el ligando, más condicionada queda la forma en la que los nodos metálicos pueden organizarse en el espacio. De este modo, la funcionalización del anillo imidazólico no solo modifica la química del material, sino también su estructura.^[24]

A todo esto se suma la posibilidad de emplear mezclas de ligandos. Los llamados ZIFs heterolépticos permiten incorporar en una misma red dos o más imidazolatos distintos, generando estructuras imposibles de alcanzar con un solo ligando puro.^[25] Esta estrategia amplía todavía más la diversidad estructural y abre la puerta a un nivel más de diseño de propiedades.^[26] Además, pone de manifiesto que los ZIFs no deben entenderse como estructuras fijas y aisladas, sino como una familia dinámica de materiales en la que composición, topología y función están estrechamente interconectadas.

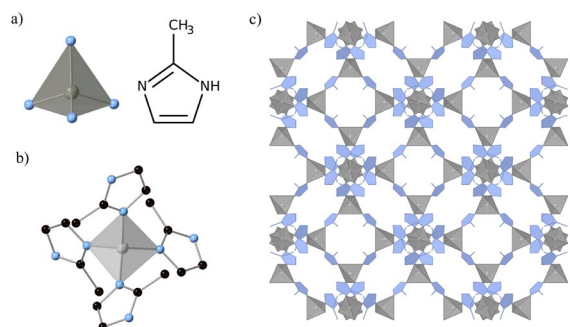


Figura 2. a) Componentes estructurales de ZIF-8: centro tetraédrico de Zn^{2+} y metilimidazol. b) Estructura básica de ZIF-8, con un centro de Zn^{2+} coordinado a cuatro imidazolatos. c) Estructura cristalina de ZIF-8, con topología sodalita.

Versatilidad sintética: de métodos convencionales en disolución a rutas sin disolvente

Otro de los grandes atractivos de los ZIFs es la enorme variedad de métodos disponibles para su síntesis. En sus primeros años, la mayoría de estos materiales se preparaban mediante procedimientos solvotermales en disolventes orgánicos, como metanol, dimetilformamida o N-metilpirrolidona.^[27] Estas rutas fueron esenciales para demostrar la viabilidad del campo y permitieron obtener muchas de las estructuras fundacionales de la familia.^[28] Sin embargo, con el tiempo se hizo evidente que la química de los ZIFs ofrecía posibilidades mucho más amplias.

Una de las grandes ventajas de los imidazoles como ligandos es su elevada reactividad frente a distintos precursores metálicos. Esto ha permitido desarrollar rutas de síntesis más sencillas, rápidas y sostenibles, incluyendo métodos acuosos a temperatura ambiente.^[29] En el caso de ZIF-8, por ejemplo, la síntesis en agua ha tenido un impacto muy importante, especialmente en aplicaciones biomédicas, donde se valora la compatibilidad con medios suaves y la ausencia de disolventes agresivos.^[30] Aunque inicialmente estas rutas requerían grandes excesos de ligando, la optimización progresiva del proceso ha permitido mejorar el rendimiento y acercarse a condiciones más estequiométricas.

Además de los métodos en solución, se han explorado otras formas de aportar energía al sistema, como la sonicación o la irradiación por microondas, que reducen drásticamente los tiempos de síntesis.^[31] También se han desarrollado rutas ionotermales.^[32] Sin embargo, probablemente uno de los desarrollos más interesantes en este campo ha sido el avance de las metodologías con minimización o ausencia de disolvente.

La mecanoquímica es uno de los ejemplos más representativos.^[33] En ella, la energía mecánica inducida por molienda favorece la reacción entre sólidos, permitiendo obtener ZIFs de manera rápida, limpia y con escaso consumo de disolvente. Más allá de su interés práctico, la mecanoquímica ha mostrado que los ZIFs pueden formarse a través de caminos muy distintos de los tradicionales, y que incluso es posible controlar la topología mediante la elección de pequeñas cantidades de líquido o aditivos.

Junto a estas rutas, existen procedimientos estáticos inspirados en procesos naturales de envejecimiento mineral, así como métodos de conversión por vapor.^[34] Pero quizás la metodología más singular, y particularmente relevante para el desarrollo de materiales vítreos, es la síntesis en medio fundido.^[35] En este caso, el propio ligando imidazólico, al fundir, actúa como medio de reacción. Esta estrategia permite acceder a materiales que a menudo no se obtienen por vías convencionales, como

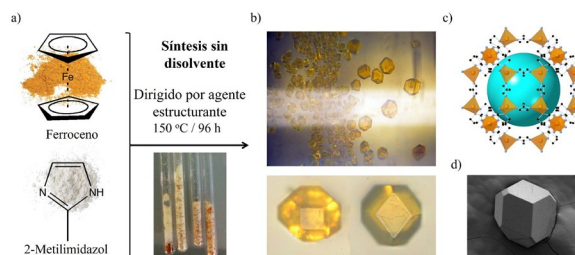


Figura 3. Esquema de reacción de la formación de MUV-3, el análogo de hierro (II) del ZIF-8. a) Condiciones de síntesis. b) Imágenes de los cristales formados. c) Estructura cristalina. d) Imagen de SEM de un cristal de MUV-3.

ciertos ZIFs de hierro (II) (Figura 3),^[16,36] y conecta directamente con la química del estado fundido y con el estudio posterior de líquidos y vidrios derivados de ZIFs.

También merece atención la deposición química en fase vapor, que aprovecha la reactividad de ligandos imidazólicos volátiles para transformar precursores sólidos en capas delgadas de ZIF.^[37] Este tipo de técnicas ha resultado especialmente prometedor para la integración de ZIFs en dispositivos, películas funcionales y arquitecturas bidimensionales.

En conjunto, la diversidad sintética de los ZIFs ilustra muy bien hasta qué punto esta familia de materiales se adapta a distintos objetivos: desde la obtención de polvos porosos hasta películas, membranas, nanocristales o materiales amorfos. Esta amplitud metodológica es, sin duda, uno de los factores clave de su éxito.

De la cristalinidad al desorden: ZIFs amorfos

Aunque los ZIFs se desarrollaron inicialmente como materiales cristalinos, pronto se observó que también podían existir en estados desordenados.^[38] Esto supuso un cambio conceptual importante. En lugar de considerar la pérdida de cristalinidad como un simple deterioro estructural, empezó a verse como una vía alternativa para generar nuevos materiales con propiedades distintas.

La amorfización puede producirse de varias formas. Una de las más conocidas es la inducida por molienda, donde la acción mecánica rompe progresivamente el orden a largo alcance sin necesariamente destruir las unidades locales de coordinación.^[39] También puede producirse por calentamiento o por presión, cuando ciertas estructuras experimentan colapso antes de recrystalizar o fundirse.^[40] Estos procesos han mostrado que el paso del estado cristalino al amorfo no siempre es abrupto ni irreversible, y que pueden existir fases intermedias con distintos grados de orden local.^[41]

Desde el punto de vista estructural, los ZIFs amorfos resultan particularmente interesantes, ya que conservan parte de la conectividad química del material original. Es decir, aunque se pierde el orden a largo alcance, y con ello los característicos picos de difracción asociados a los planos cristalográficos que satisfacen la ley de Bragg, permanecen definidos los entornos locales en torno al metal y a los ligandos. En este contexto, el desorden no implica una ausencia total de estructura, sino la pérdida de periodicidad a larga distancia.

Este comportamiento conecta a los ZIFs con otras familias de materiales amorfos, como los vidrios inorgánicos o los polímeros desordenados, pero con una diferencia importante: en los ZIFs, el enlace de coordinación y la naturaleza híbrida del

esqueleto introducen mecanismos de transformación y relajación distintos. Por ello, el estudio de las fases amorfas de ZIFs no solo tiene interés aplicado, sino también fundamental, ya que ayuda a comprender cómo se reorganizan las redes metal-orgánicas bajo estímulos térmicos o mecánicos.

ZIFs líquidos y vítreos: una nueva frontera

La posibilidad de fundir un MOF parecía, hasta hace relativamente poco, una idea casi contradictoria. La mayoría de estos materiales se descomponen al calentarse antes de alcanzar una fase líquida. Sin embargo, en el caso de algunos ZIFs se ha demostrado que la red puede reconfigurarse dinámicamente sin desintegrarse por completo, permitiendo la aparición de un líquido de naturaleza metal-orgánica.^[42]

Este hallazgo fue revolucionario porque amplió el concepto mismo de MOF. Ya no se trataba únicamente de un sólido cristalino poroso, sino de una red híbrida que, bajo ciertas condiciones, podía entrar en un estado líquido y, tras enfriamiento, vitrificar (Figura 4). Así surgieron los llamados vidrios de ZIF, una nueva clase de materiales que combinan elementos de la química reticular con las propiedades del estado vítreo.^[43]

El caso paradigmático es ZIF-4.^[23] Al calentarse, este material pasa por distintas transformaciones: primero puede amorfizar, después recrystalizar en una fase más densa y, finalmente, fundir a alta temperatura. Si ese líquido se enfría con la suficiente rapidez antes de descomponerse, se obtiene un vidrio. En esta fase vítreo se conserva la coordinación tetraédrica del metal, pero desaparece la periodicidad cristalina. El resultado es una red desordenada continua, análoga en cierto sentido a la de los vidrios de silicato, aunque construida a partir de enlaces metal-imidazolato.

Uno de los aspectos más interesantes es que la capacidad de fundir no es universal en todos los ZIFs. Parece depender de un equilibrio delicado entre estabilidad térmica, topología, densidad estructural y naturaleza de los ligandos.^[44] En general, las redes más densas y con ligandos con libertad de rotación tienen mayor probabilidad de alcanzar el estado líquido antes de descomponerse. Por el contrario, las estructuras muy porosas, como ZIF-8, suelen descomponerse antes de fundir.^[45]

Para superar esta limitación, se han desarrollado diferentes estrategias. Una de ellas consiste en introducir un segundo ligando más voluminoso, como el benzimidazolato, para generar estructuras del tipo ZIF-62,^[46] cuya fusión ocurre a temperaturas significativamente menores. Otra estrategia emplea intercambio de ligandos o infiltración de especies externas para modificar la estabilidad del material y facilitar la aparición del estado líquido. En todos los casos, el objetivo es el mismo: redu-

cir la barrera energética hacia la fusión y estabilizar el líquido resultante.

La existencia de ZIFs vítreos es importante no solo por curiosidad científica, sino porque el estado vítreo aporta propiedades nuevas. Un vidrio carece de bordes de grano, puede moldearse con mayor facilidad y presenta una isotropía que a menudo no está presente en el cristal policristalino. Esto abre nuevas oportunidades para procesado, conformado y fabricación de materiales funcionales.^[47]

Caracterización de ZIFs vítreos

La caracterización de los ZIFs vítreos y amorfos requiere combinar distintas técnicas, ya que ninguna por sí sola permite describir completamente estos sistemas (Figura 5). Una de las primeras herramientas es el análisis térmico. La termogravimetría permite identificar la descomposición y la posible pérdida de disolvente o especies adsorbidas, mientras que la calorimetría diferencial de barrido resulta esencial para detectar transiciones como amorfización, recrystalización, fusión o transición vítreo. En estos materiales, la identificación de la temperatura de transición vítreo es especialmente importante, ya que confirma la naturaleza vítreo del sólido enfriado.^[48]

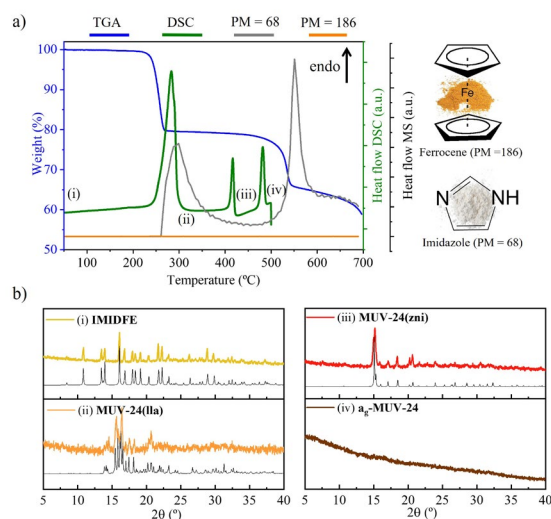


Figura 5. a. Análisis térmico de un ZIF de Fe, $[\text{Fe}_3(\text{im})_6(\text{Him})_2]$ (IMIDFE), mostrando la termogravimetría (en azul) y la calorimetría diferencial de barrido (en verde). b. Difractogramas de rayos X de muestras policristalinas de las diferentes fases que se obtienen al calentar $[\text{Fe}_3(\text{im})_6(\text{Him})_2]$ a las temperaturas indicadas en la Figura 5a.

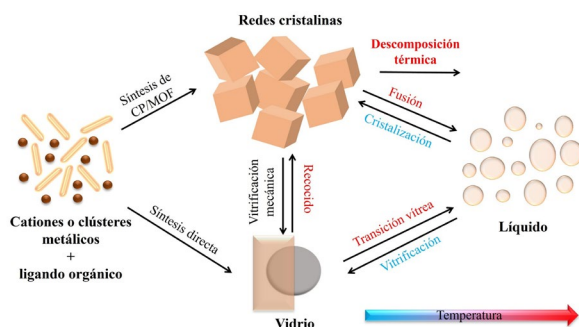


Figura 4. Representación esquemática de las posibles transformaciones que tienen lugar con la temperatura, desde la formación de un MOF cristalino a partir de los precursores, a la obtención de un líquido.

La difracción de rayos X en polvo sigue siendo una técnica básica para diferenciar entre fases cristalinas y amorfas. Cuando el material pierde su orden a larga distancia, desaparecen los picos de Bragg y el patrón se vuelve difuso. Sin embargo, esto no basta para conocer la estructura local. Para ello se emplean técnicas de dispersión total de rayos X o de neutrones, a partir de las cuales se obtiene la función de distribución de pares (Figura 6).^[49] Esta función permite acceder a distancias interatómicas incluso en ausencia de cristalinidad y ha sido clave para demostrar que, en muchos vidrios de ZIF, persisten las unidades locales de coordinación del cristal de partida.^[50] Las técnicas espectroscópicas también aportan información fundamental. La espectroscopía vibracional permite seguir cambios en el enlace metal-ligando, en la integridad del ligando

orgánico y en los mecanismos de amortización. La resonancia magnética nuclear de estado sólido ha proporcionado datos muy valiosos sobre el entorno local de los centros metálicos y sobre el grado de distorsión estructural tras la vitrificación,^[51] al igual que la espectroscopia Mössbauer en el caso de sistemas de hierro^[52] (Figura 7). Del mismo modo, diferentes microscopías electrónicas y técnicas asociadas de análisis elemental permiten estudiar homogeneidad, interfaces y distribución de componentes, especialmente en vidrios mezclados o en composites.^[53,54]

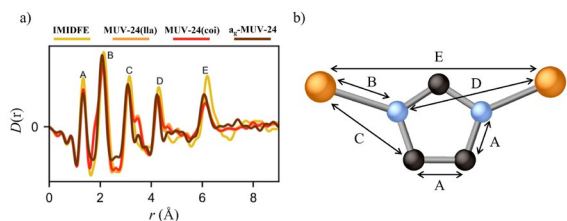


Figura 6. a. Función de distribución de pares de rayos X en forma de $D(r)$ de IMIDFE, MUV-24(IIa), MUV-24(coi) y ag-MUV-24 (ver Figura 5). b. Representación estructural del orden de corto alcance que hace coincidir los enlaces y las distancias de pares con los picos mostrados en a. Los átomos de Fe, C y N se muestran en marrón, negro y azul, respectivamente.

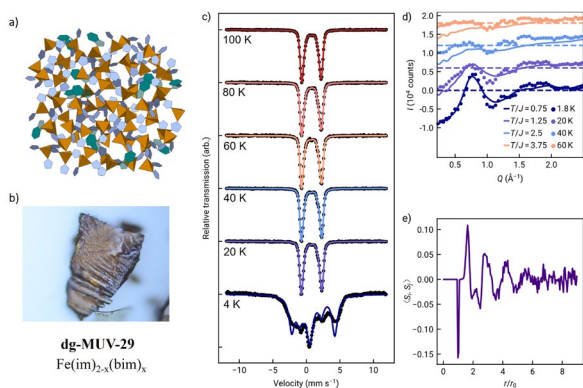


Figura 7. a. Representación esquemática de la estructura amorfa de dg-MUV-29. b. Imagen óptica de dg-MUV-29. c. Espectros Mössbauer a diferentes temperaturas de dg-MUV-29. Las líneas sobre los puntos experimentales representan las distribuciones estimadas de desdoblamiento cuadrupolares. d. Difracción de neutrones de MUV-29: los puntos representan los datos experimentales de dg-MUV-29, y la línea representa la simulación de Monte Carlo (MC). e. Función de correlación de espín en el espacio real derivada de simulaciones MC.

Finalmente, la modelización computacional desempeña un papel cada vez más importante. Simulaciones de dinámica molecular, cálculos basados en teoría del funcional de la densidad y modelos de Monte Carlo han permitido visualizar mecanismos de fusión, intercambio de ligandos, deformación local y conectividad topológica en los líquidos y vidrios de ZIF.^[44] Estas aproximaciones son especialmente útiles porque ayudan a interpretar estructuras que, por definición, no pueden describirse mediante una celda unidad periódica convencional.

Propiedades y aplicaciones emergentes de los ZIFs vítreos

El interés por los ZIFs vítreos no se limita a su singularidad estructural. Una parte esencial de la investigación actual se

centra en sus propiedades y en las aplicaciones que podrían derivarse de ellas. En muchos casos, el paso del estado cristalino al vítreo genera una combinación poco habitual de procesabilidad, desorden controlado y funcionalidad química.

Una de las cuestiones más relevantes es la porosidad. Tradicionalmente se asumía que la pérdida de cristalinidad implicaría una pérdida casi completa de porosidad accesible. Sin embargo, diversos estudios han demostrado que algunos vidrios de ZIF mantienen microporosidad e incluso capacidad de adsorción de gases.^[55] Aunque su volumen de poro suele ser menor que el del cristal precursor, esta porosidad residual puede ser suficiente para aplicaciones de separación o captura molecular.^[56] Además, en ciertos casos se ha mostrado que la estructura del vidrio puede ajustarse para optimizar canales de difusión o generar espumas vítreas con mayor accesibilidad.^[57]

Esta característica es especialmente prometedora en membranas. Los materiales policristalinos presentan a menudo defectos asociados a los límites de grano, que perjudican la selectividad. En cambio, un vidrio de ZIF puede conformarse como un monolito continuo, sin fronteras de grano, lo que reduce trayectorias de difusión no deseadas. Esta propiedad ha impulsado el estudio de membranas vítreas para separación de gases, donde el equilibrio entre difusión, selectividad y estabilidad resulta crítico.^[58]

Desde el punto de vista mecánico, los vidrios de ZIF ocupan una posición intermedia entre los vidrios inorgánicos clásicos y los materiales poliméricos. Presentan dureza y módulo elástico relativamente moderados, pero a la vez una capacidad de procesado y una respuesta al esfuerzo muy atractivas.^[59] La ausencia de bordes de grano, junto con la posibilidad de moldeado térmico, los convierte en candidatos interesantes para recubrimientos, conformado de piezas y materiales híbridos estructurales.

También sus propiedades térmicas son reseñables. En general, estos materiales muestran conductividades térmicas bajas, lo que sugiere aplicaciones potenciales como materiales aislantes ligeros.^[60] De forma similar, la combinación de desorden estructural y química de coordinación abre oportunidades en transporte iónico. Algunos vidrios derivados de ZIFs han mostrado conductividades mejoradas frente a sus homólogos cristalinos, particularmente en sistemas diseñados como electrolitos sólidos o quasi-sólidos.^[61]

Otro ámbito muy activo es el almacenamiento y conversión de energía. Se han descrito aplicaciones en baterías de litio, tanto como matrices anfitrionas para iones como en composites con nanopartículas activas. La flexibilidad del estado vítreo, la posible generación de sitios accesibles y la ausencia de defectos intergranulares hacen que estos materiales sean especialmente atractivos para arquitecturas electroquímicas avanzadas.^[62]

Las propiedades ópticas constituyen otra faceta de gran interés. Algunos vidrios de ZIF pueden alcanzar altas transmitancias en el visible y en el infrarrojo cercano cuando se procesan adecuadamente y se evita la formación de burbujas durante la fusión. Esta transparencia, unida a la posibilidad de incorporar centros luminiscentes o de formar composites con materiales semiconductores, abre oportunidades en fotónica y optoelectrónica.^[63,64] En este sentido, los compuestos híbridos formados por perovskitas y vidrios de ZIF son un ejemplo especialmente llamativo, ya que combinan la emisión de luz de la perovskita con la estabilidad y el encapsulado que ofrece la matriz vítreo.^[65]

En el ámbito magnético, aunque históricamente ha recibido menor atención que otras propiedades, comienzan a aparecer resultados relevantes en sistemas que incorporan metales de transición. Estos estudios ponen de manifiesto que el desorden topológico, junto con la conservación del orden local, puede

dar lugar a estados magnéticos colectivos poco convencionales, como interacciones antiferromagnéticas en redes desordenadas (Figura 7).^[52] Este comportamiento sugiere que los vidrios de ZIF pueden actuar como plataformas modelo para estudiar magnetismo en redes amorfas con un alto grado de control químico, lo que constituye una oportunidad especialmente atractiva para el futuro desarrollo del campo.

Conclusiones

Los ZIFs constituyen una de las familias más ricas y versátiles dentro de los materiales metal-orgánicos. Su semejanza topológica con las zeolitas, unida a la flexibilidad que proporciona la química de coordinación, ha permitido desarrollar una enorme variedad de estructuras, métodos de síntesis y aplicaciones. A diferencia de las zeolitas inorgánicas clásicas, los ZIFs presentan una versatilidad química mucho mayor, ya que es posible modificar tanto el metal como el ligando orgánico para ajustar de forma precisa sus propiedades. Esta flexibilidad sintética ha permitido acceder a un número muy amplio de topologías y a propiedades difícilmente alcanzables en zeolitas convencionales, incluyendo flexibilidad estructural, respuesta dinámica frente a estímulos externos o incluso comportamiento magnético.

La química de los ZIFs ha evolucionado en pocos años desde el estudio de sólidos porosos cristalinos hasta el desarrollo de líquidos, vidrios y composites híbridos avanzados. Más allá de su importancia como materiales cristalinos porosos, los ZIFs han revelado una faceta todavía más sorprendente: su capacidad para acceder a estados amorfos, líquidos y vítreos. Este cambio no ha sido simplemente cuantitativo, en el sentido de ampliar el número de materiales conocidos, sino cualitativo, porque ha transformado la manera en que concebimos los MOFs y su relación con otros estados de la materia. Este comportamiento ha dado lugar a una nueva clase de materiales híbridos que conservan parte de la química local de los MOFs, pero incorporan propiedades propias del estado vítreo, como la ausencia de bordes de grano, la isotropía y una mayor procesabilidad.

El campo se encuentra todavía en una fase temprana. El número de ZIFs realmente fundibles sigue siendo reducido, y muchas de las estrategias actuales para generar vidrios dependen de familias estructurales concretas o de un control composicional fino. Por ello, uno de los grandes retos es ampliar el repertorio de materiales capaces de alcanzar el estado líquido sin descomponerse. Este objetivo no solo incrementaría el abanico de propiedades disponibles, sino que también permitiría adaptar estos materiales a aplicaciones mucho más específicas.

Otro desafío importante es mejorar el control del procesamiento. La formación de burbujas, la descomposición parcial de ligandos o la aparición de heterogeneidades locales siguen siendo limitaciones relevantes en la obtención de vidrios de ZIF de alta calidad. Del mismo modo, será esencial profundizar en la relación entre estructura local, dinámica de fusión y propiedades macroscópicas. En este punto, la combinación de técnicas avanzadas de caracterización y modelización teórica seguirá siendo imprescindible.

Asimismo, el futuro del campo probablemente pasará por la integración de ZIFs vítreos con otras familias de materiales. Los composites con MOFs cristalinos, perovskitas, polímeros, vidrios inorgánicos o nanopartículas funcionales apuntan hacia una ciencia de materiales híbridos en la que el vidrio de ZIF actúe simultáneamente como matriz procesable y componente funcional. Esta capacidad de combinar química reticular, desorden controlado y procesabilidad puede convertir a los ZIFs vítreos en una plataforma especialmente valiosa para el diseño de materiales a medida.

En esta evolución, resulta cada vez más evidente que el futuro del campo podría no limitarse a la vitrificación mediante enfriamiento de un fundido. Los avances más recientes muestran que también es posible acceder directamente a fases vítreas a partir de precursores moleculares, utilizando el propio ligando como medio de reacción y evitando así la necesidad de un precursor cristalino fundible. Este cambio de enfoque amplía de forma notable el espacio composicional accesible, facilita la incorporación de centros metálicos especialmente sensibles, como Fe(II), y reduce los problemas de oxidación y degradación parcial asociados a las rutas térmicas convencionales. Además, abre la puerta al estudio de propiedades hasta ahora prácticamente inexploradas en los vidrios de MOFs, como el antiferromagnetismo en redes topológicamente desordenadas, al tiempo que refuerza sus posibilidades de procesado e integración en dispositivos. Todo ello sugiere que los ZIFs vítreos no deben entenderse únicamente como una extensión de los MOFs cristalinos, sino como una plataforma emergente con identidad propia dentro de la ciencia de materiales híbridos.

En resumen, el estudio de los ZIFs está redefiniendo el papel del desorden en química de materiales y abriendo nuevas oportunidades en separación de gases, energía, óptica y dispositivos funcionales. Aunque todavía existen desafíos importantes, especialmente en la ampliación del número de ZIFs fundibles y en el control del procesado, todo apunta a que los vidrios de ZIF seguirán ocupando un lugar central en la próxima generación de materiales híbridos avanzados.

Agradecimientos

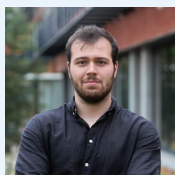
Luis León Alcaide agradece la financiación recibida de la Generalitat Valenciana a través de la ayuda CIAPOS/2024/031.

Bibliografía

- [1] H. C. J. Zhou, S. Kitagawa, *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 5415–5418, <https://doi.org/10.1039/C4CS90059F>.
- [2] H. C. Zhou, J. R. Long, O. M. Yaghi, *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 673–674, <https://doi.org/10.1021/CR300014X>.
- [3] R. Robson, P. Account, *The Chemical Record* **2024**, *24*, e202400038, <https://doi.org/10.1002/TCR.202400038>.
- [4] Z. Zheng, Z. Rong, H. L. Nguyen, O. M. Yaghi, *Inorg. Chem.* **2023**, *62*, 20861–20873, <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.3c02322>.
- [5] K. S. Park, Z. Ni, A. P. Côté, J. Y. Choi, R. Huang, F. J. Uribe-Romo, H. K. Chae, M. O’Keeffe, O. M. Yaghi, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **2006**, *103*, 10186–10191, <https://doi.org/10.1073/pnas.0602439103>.
- [6] B. Chen, Z. Yang, Y. Zhu, Y. Xia, *J. Mater. Chem. A Mater.* **2014**, *2*, 16811–16831, <https://doi.org/10.1039/C4TA02984D>.
- [7] R. Gaillac, P. Pullumbi, K. A. Beyer, K. Chapman, D. A. Keen, T. D. Bennett, F. X. Coudert, *Nat. Mater.* **2017**, *16*, 1149–1155, <https://doi.org/10.1038/NMAT4998>.
- [8] N. Ma, S. Horike, *Chem. Rev.* **2022**, *122*, 4163–4203, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00826>.
- [9] Z. Yu, L. Tang, N. Ma, S. Horike, W. Chen, *Coord. Chem. Rev.* **2022**, *469*, 214646, <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2022.214646>.
- [10] R. Banerjee, A. Phan, B. Wang, C. Knobler, H. Furukawa, M. O’Keeffe, O. M. Yaghi, *Science* **2008**, *319*, 939–943, <https://doi.org/10.1126/science.1152516>.
- [11] A. Corma, *Chem. Rev.* **1997**, *97*, 2373–2419, <https://doi.org/10.1021/cr960406n>.
- [12] A. Phan, C. J. Doonan, F. J. Uribe-Romo, C. B. Knobler, M. O’Keeffe, O. M. Yaghi, *Acc. Chem. Res.* **2010**, *43*, 58–67, <https://doi.org/10.1021/ar900116g>.

- [13] X. C. Huang, Y. Y. Lin, J. P. Zhang, X. M. Chen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2006**, *45*, 1557–1559, <https://doi.org/10.1002/ANIE.200503778>.
- [14] D. Fairen-Jimenez, S. A. Moggach, M. T. Wharmby, P. A. Wright, S. Parsons, T. Düren, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 8900–8902, <https://doi.org/10.1021/ja202154j>
- [15] J. Troyano, A. Carné-Sánchez, C. Avci, I. Imaz, D. MasPOCH, *Chem. Soc. Rev.* **2019**, *48*, 5534–5546, <https://doi.org/10.1039/C9CS00472F>.
- [16] J. López-Cabrelles, J. Romero, G. Abellán, M. Giménez-Marqués, M. Palomino, S. Valencia, F. Rey, G. Mínguez Espallargas, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 7173–7180, <https://doi.org/10.1021/jacs.9b02686>
- [17] K. Kadota, E. Sivaniyah, S. Bureekaew, S. Kitagawa, S. Horike, *Inorg. Chem.* **2017**, *56*, 8744–8747, <https://doi.org/10.1021/ACS.INORGCHEM.7B01322>.
- [18] Y.-Q. Tian, S.-Y. Yao, D. Gu, K.-H. Cui, D.-W. Guo, G. Zhang, Z.-X. Chen, D.-Y. Zhao, Y.-Q. Tian, S.-Y. Yao, K.-H. Cui, D.-W. Guo, G. Zhang,] D Gu, Z.-X. Chen, D.-Y. Zhao, *Chemistry – A European Journal* **2010**, *16*, 1137–1141, <https://doi.org/10.1002/CHEM.200902729>.
- [19] S. Horike, K. Kadota, T. Itakura, M. Inukai, S. Kitagawa, *Dalton Transactions* **2015**, *44*, 15107–15110, <https://doi.org/10.1039/C5DT01183C>.
- [20] E. Andres-Garcia, J. López-Cabrelles, L. Oar-Arteta, B. Roldan-Martinez, M. Cano-Padilla, J. Gascon, G. Mínguez Espallargas, F. Kapteijn, *Chemical Engineering Journal* **2019**, *371*, 848–856, <https://doi.org/10.1016/J.CEJ.2019.04.094>.
- [21] K. Noh, J. Lee, J. Kim, *Isr. J. Chem.* **2018**, *58*, 1075–1088, <https://doi.org/10.1002/IJCH.201800107>.
- [22] W. Morris, C. J. Doonan, H. Furukawa, R. Banerjee, O. M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 12626–12627, <https://doi.org/10.1021/ja805222x>
- [23] T. D. Bennett, J. C. Tan, Y. Yue, E. Baxter, C. Ducati, N. J. Terrill, H. H. M. Yeung, Z. Zhou, W. Chen, S. Henke, A. K. Cheetham, G. N. Greaves, *Nat. Commun.* **2015**, *6*, <https://doi.org/10.1038/NCOMMS9079>.
- [24] D. W. Lewis, A. R. Ruiz-Salvador, A. Gómez, L. M. Rodríguez-Albelo, F. X. Coudert, B. Slater, A. K. Cheetham, C. Mellot-Draznieks, *CrystEngComm* **2009**, *11*, 2272–2276, <https://doi.org/10.1039/B912997A>.
- [25] J. López-Cabrelles, E. Miguel-Casañ, M. Esteve-Rochina, E. Andres-Garcia, I. J. Vitorica-Yrezabal, J. Calbo, G. Mínguez Espallargas, *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 842–847, <https://doi.org/10.1039/D1SC04779E>.
- [26] N. Novendra, J. M. Marrett, A. D. Katsenis, H. M. Titi, M. Arhangel'skis, T. Frišćić, A. Navrotsky, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 21720–21729, <https://doi.org/10.1021/jacs.0c09284>.
- [27] H. Hayashi, A. P. Côté, H. Furukawa, M. O'Keeffe, O. M. Yaghi, *Nat. Mat.* **2007**, *6*, 501–506, <https://doi.org/10.1038/nmat1927>.
- [28] S. K. Nune, P. K. Thallapally, A. Dohnalkova, C. Wang, J. Liu, G. J. Exarhos, *Chemical Communications* **2010**, *46*, 4878–4880, <https://doi.org/10.1039/C002088E>.
- [29] J. Cravillon, S. Münzer, S. J. Lohmeier, A. Feldhoff, K. Huber, M. Wiebcke, *Chem. Mater.* **2009**, *21*, 1410–1412, <https://doi.org/10.1021/cm900166h>.
- [30] J. Yao, M. He, K. Wang, R. Chen, Z. Zhong, H. Wang, *CrystEngComm* **2013**, *15*, 3601–3606, <https://doi.org/10.1039/C3CE27093A>.
- [31] H. Bux, F. Liang, Y. Li, J. Cravillon, M. Wiebcke, J. Caro, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 16000–16001, <https://doi.org/10.1021/ja907359t>.
- [32] R. E. Morris, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 442–444, <https://doi.org/10.1002/ANIE.200704888>.
- [33] P. J. Beldon, L. Fábrián, R. S. Stein, A. Thirumurugan, A. K. Cheetham, T. Frišćić, *Angew. Chem. Int. Ed Engl.* **2010**, *49*, 9640–9643, <https://doi.org/10.1002/ANIE.201005547>.
- [34] M. J. Cliffe, C. Mottillo, R. S. Stein, D. K. Bučar, T. Frišćić, *Chem. Sci.* **2012**, *3*, 2495–2500, <https://doi.org/10.1039/c2sc20344h>.
- [35] S. J. Rettig, A. Storr, D. A. Summers, R. C. Thompson, J. Trotter, *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, *119*, 8675–8680, <https://doi.org/10.1021/ja971558i>.
- [36] S. J. Rettig, A. Storr, D. A. Summers, R. C. Thompson, J. Trotter, *Can. J. Chem.* **1999**, *77*, 425–433, <https://doi.org/10.1139/v99-063>
- [37] I. Stassen, M. Styles, G. Greci, H. Van Gorp, W. Vanderlinden, S. De Feyter, P. Falcaro, D. De Vos, P. Vereecken, R. Ameloot, *Nat. Mat.* **2016**, *15*, 304–310, <https://doi.org/10.1038/nmat4509>.
- [38] T. D. Bennett, A. K. Cheetham, *Acc. Chem. Res.* **2014**, *47*, <https://doi.org/10.1021/ar5000314>.
- [39] T. D. Bennett, S. Cao, J. C. Tan, D. A. Keen, E. G. Bithell, P. J. Beldon, T. Friscic, A. K. Cheetham, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 14546–14549, <https://doi.org/10.1021/ja206082s>
- [40] T. D. Bennett, P. Simoncic, S. A. Moggach, F. Gozzo, P. MacChi, D. A. Keen, J. C. Tan, A. K. Cheetham, *Chemical Communications* **2011**, *47*, 7983–7985, <https://doi.org/10.1039/C1CC11985K>.
- [41] S. A. Moggach, T. D. Bennett, A. K. Cheetham, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 7087–7089, <https://doi.org/10.1002/ANIE.200902643>.
- [42] T. D. Bennett, F. X. Coudert, S. L. James, A. I. Cooper, *Nat. Mat.* **2021**, *20*, 1179–1187, <https://doi.org/10.1038/s41563-021-00957-w>.
- [43] J. Fonseca, T. Gong, L. Jiao, H. L. Jiang, *J. Mater. Chem. A Mater.* **2021**, *9*, 10562–10611, <https://doi.org/10.1039/D1TA01043C>.
- [44] R. Gaillac, P. Pullumbi, T. D. Bennett, F. X. Coudert, *Chem Mater* **2020**, *32*, 8004–8011, <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.0c02950>.
- [45] R. Gaillac, P. Pullumbi, F. O.-X. Coudert, *J. Phys. Chem. C* **2018**, *122*, *30*, <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b00385>.
- [46] T. D. Bennett, Y. Yue, P. Li, A. Qiao, H. Tao, N. G. Greaves, T. Richards, G. I. Lampronti, S. A. T. Redfern, F. Blanc, O. K. Farha, J. T. Hupp, A. K. Cheetham, D. A. Keen, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 3484–3492, <https://doi.org/10.1021/JACS.5B13220>.
- [47] T. D. Bennett, S. Horike, J. C. Mauro, M. M. Smedskjaer, L. Wondraczek, *Nat. Mat.* **2024**, *16*, 1755–1766, <https://doi.org/10.1038/s41557-024-01616-8>.
- [48] C. Zhou, M. Stepniewska, L. Longley, C. W. Ashling, P. A. Chater, D. A. Keen, T. D. Bennett, Y. Yue, *Physical Chemistry Chemical Physics* **2018**, *20*, 18291–18296, <https://doi.org/10.1039/C8CP02340A>.
- [49] Z. Shi, A. Arramel, T. D. Bennett, Y. Yue, N. Li, *iScience* **2022**, *25*, <https://doi.org/10.1016/J.ISCI.2022.104351>.
- [50] L. León-Alcaide, C. Castillo-Blas, V. Martin-Diaconescu, I. da Silva, D. A. Keen, T. D. Bennett, G. Mínguez Espallargas, *Chem. Sci.* **2025**, *16*, 7946–7955, <https://doi.org/10.1039/d5sc00767d>.
- [51] R. S. K. Madsen, A. Qiao, J. Sen, I. Hung, K. Chen, Z. Gan, S. Sen, Y. Yue, *Science* **2020**, *367*, 1473–1476, <https://doi.org/10.1126/science.az0251>.
- [52] L. León-Alcaide, L. Martínez-Goyeneche, M. Sessolo, B. J. C. Vieira, J. C. Waerenborgh, J. A. Rodríguez-Velamazán, O. Fabelo, M. J. Cliffe, D. A. Keen, G. Mínguez Espallargas, *Nat. Comm.* **2025**, *16*, 8783, <https://doi.org/10.1038/s41467-025-63837-w>.
- [53] J. M. Tuffnell, C. W. Ashling, J. Hou, S. Li, L. Longley, M. L.

- Ríos Gómez, T. D. Bennett, *Chemical Communications* **2019**, 55, 8705–8715, <https://doi.org/10.1039/c9cc01468c>.
- [54] C. W. Ashling, D. N. Johnstone, R. N. Widmer, J. Hou, S. M. Collins, A. F. Sapnik, A. M. Bumstead, P. A. Midgley, P. A. Chater, D. A. Keen, T. D. Bennett, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 15641–15648, <https://doi.org/10.1021/jacs.9b07557>.
- [55] C. Zhou, L. Longley, A. Krajnc, G. J. Smales, A. Qiao, I. Erucar, C. M. Doherty, A. W. Thornton, A. J. Hill, C. W. Ashling, O. T. Qazvini, S. J. Lee, P. A. Chater, N. J. Terrill, A. J. Smith, Y. Yue, G. Mali, D. A. Keen, S. G. Telfer, T. D. Bennett, *Nat. Comm.* **2018**, 9, 1–9, <https://doi.org/10.1038/s41467-018-07532-z>.
- [56] Y. Wang, H. Jin, Q. Ma, K. Mo, H. Mao, A. Feldhoff, X. Cao, Y. Li, F. Pan, Z. Jiang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 4365–4369, <https://doi.org/10.1002/anie.201915807>.
- [57] Z. Yang, Y. Belmabkhout, L. N. McHugh, D. Ao, Y. Sun, S. Li, Z. Qiao, T. D. Bennett, M. D. Guiver, C. Zhong, *Nat. Mater.* **2023**, 22, 888–894, <https://doi.org/10.1038/s41563-023-01545-W>.
- [58] O. Smirnova, S. Hwang, R. Sajzew, L. Ge, A. Reupert, V. Nozari, S. Savani, C. Chmelik, M. R. Reithofer, L. Wondraczek, J. Kärger, A. Knebel, *Nat. Mat.* **2023**, 23, 262–270, <https://doi.org/10.1038/s41563-023-01738-3>.
- [59] S. Li, R. Limbach, L. Longley, A. A. Shirzadi, J. C. Walmsley, D. N. Johnstone, P. A. Midgley, L. Wondraczek, T. D. Bennett, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 1027–1034, <https://doi.org/10.1021/JACS.8B11357>.
- [60] S. S. Sørensen, M. B. Østergaard, M. Stepniewska, H. Johra, Y. Yue, M. M. Smedskjaer, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2020**, 12, 18893–18903, <https://doi.org/10.1021/acsaami.0c02310>.
- [61] R. Lin, X. Li, A. Krajnc, Z. Li, M. Li, W. Wang, L. Zhuang, S. Smart, Z. Zhu, D. Appadoo, J. R. Harmer, Z. Wang, A. G. Buzanich, S. Beyer, L. Wang, G. Mali, T. D. Bennett, V. Chen, J. Hou, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, 61, e202112880, <https://doi.org/10.1002/anie.202112880>.
- [62] X. X. Wang, D. H. Guan, C. L. Miao, J. X. Li, J. Y. Li, X. Y. Yuan, X. Y. Ma, J. J. Xu, *Adv. Energy Mater.* **2024**, 14, 2303829, <https://doi.org/10.1002/aenm.202303829>.
- [63] A. Qiao, H. Tao, M. P. Carson, S. W. Aldrich, L. M. Thirion, T. D. Bennett, J. C. Mauro, Y. Yue, *Opt. Lett.* **2019**, 44, 1623–1625, <https://doi.org/10.1364/OL.44.001623>.
- [64] M. A. Ali, X. Liu, Y. Li, J. Ren, J. Qiu, *Inorg. Chem.* **2020**, 59, 8380–8386, <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c00806>.
- [65] J. Hou, P. Chen, A. Shukla, A. Krajnc, T. Wang, X. Li, R. Doasa, L. H. G. Tizei, B. Chan, D. N. Johnstone, R. Lin, T. U. Schüll, I. Martens, D. Appadoo, M. S. Ari, Z. Wang, T. Wei, S. C. Lo, M. Lu, S. Li, E. B. Nandas, G. Mali, A. K. Cheetham, S. M. Collins, V. Chen, L. Wang, T. D. Bennett, *Science*. **2021**, 374, 621–625, <https://doi.org/10.1126/science.abf4460>.



Luis León Alcaide

Departamento de Ciencia de Materiales y Metalurgia, Universidad de Cambridge

E-mail: l1824@cam.ac.uk

ORCID: 0000-0003-1667-0618

Luis León Alcaide es investigador postdoctoral en el Department of Materials Science and Metallurgy de la Universidad de Cambridge. Obtuvo su doctorado en el Instituto de Ciencia Molecular (ICMol) de la Universidad de Valencia, donde investigó materiales híbridos metal-orgánicos en diferentes estados, incluyendo fases cristalinas, líquidas y vítreas. Actualmente, su investigación se centra en el desarrollo de nuevas plataformas metal-orgánicas para el estudio de fenómenos cuánticos.



Guillermo Mínguez Espallargas

Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), Universidad de Valencia

E-mail: guillermo.minguez@uv.es

ORCID: 0000-0001-7855-1003

Guillermo Mínguez Espallargas es Profesor Titular de Química Inorgánica en la Universidad de Valencia y director del grupo “Crystal Engineering Lab” en el Instituto de Ciencia Molecular (ICMol). Su actividad investigadora se centra en el desarrollo de nuevos materiales de naturaleza híbrida orgánica e inorgánica desde un enfoque de “*crystal engineering*”, para estudiar propiedades fundamentales y sus posibles usos en almacenamiento y separación de gases, como sensores, y en catálisis.

Nanomedicinas basadas en redes metal-orgánicas y nanopartículas plasmónicas

Nanomedicines based on metal-organic frameworks and plasmonic nano-particles

Catalina Biglione¹, Yolanda Pérez^{1,2} y Patricia Horcajada^{1,*}

¹ Unidad de Materiales Porosos Avanzados (UMPA), Fundación IMDEA Energía.

² Grupo COMET-Nano, Departamento de Geología, Física y Química Inorgánica, ESCET, Universidad Rey Juan Carlos.

PALABRAS CLAVE:

Redes metal-orgánicas
Nanopartículas plasmónicas
Nanomedicina
Teranóstica

RESUMEN:

Los sistemas compuestos basados en nanopartículas plasmónicas (PNPs) y en redes metal-orgánicas (MOFs, por sus siglas en inglés *Metal-Organic Frameworks*) presentan un gran potencial en diversos campos (ej. biomedicina, detección, (foto)catálisis). En biomedicina, estos nanocompuestos se han posicionado como plataformas muy prometedoras para terapias oncológicas. La combinación de elevada porosidad y versatilidad química y estructural de los MOFs con las excelentes propiedades ópticas de las PNPs ha permitido obtener nanomateriales multifuncionales capaces de integrar una eficiente terapia y diagnóstico en una única nanomedicina, resultando en herramientas teranósticas.

Esta revisión bibliográfica presenta los avances más recientes en el desarrollo de nanoplataformas PNP@MOF, abordando las diferentes estrategias de preparación y analizando sus aplicaciones más relevantes en biomedicina, con especial atención a los sistemas multimodales capaces de integrar funciones terapéuticas y técnicas de bioimagen.

KEYWORDS:

Metal-organic frameworks
Plasmonic nanoparticles
Nanomedicine
Theranostic

ABSTRACT:

Plasmonic nanoparticle (PNP)-based metal-organic framework (MOF) composites have attracted significant attention across diverse fields, including biomedicine, sensing, and (photo)catalysis. In the biomedical arena, these nanocomposites have emerged as highly promising platforms for cancer therapy applications. The combination of the high porosity, structural and chemical tunability of MOFs with the outstanding optical properties of plasmonic nanoparticles has enabled the development of multifunctional nanomaterials capable of integrating efficient therapeutic and diagnostic functions within a single nanomedicine (theragnostic).

This review summarizes recent advances in the development of PNP@MOF nanoplatforms, discussing the main synthetic strategies employed for their preparation and highlighting their most relevant biomedical applications. Particular emphasis is placed on multimodal systems that combine therapeutic functionalities with advanced bioimaging techniques.

Introducción

Las redes metal-orgánicas (MOFs por sus siglas en inglés *Metal-Organic Frameworks*), recientemente reconocidas con el premio Nobel de Química 2025, son materiales híbridos cristalinos formados por nodos inorgánicos (iones, clústeres, etc.) interconectados mediante ligandos orgánicos multidentados. Gracias a su excepcional porosidad (hasta 7000 m²/g; superficie de un campo de fútbol) y versatilidad estructural y química (*a priori* toda la tabla periódica),^[1,2] presentan un extraordinario potencial en numerosos campos de aplicación (ej. energía, medioambiente, salud).^[3,4] En biomedicina, cabe destacar que desde 2006 donde se demostró por primera vez su potencial en liberación controlada de fármacos y bioimagen.^[5,6] Desde entonces han habido grandes avances^[7]: 1) biocompatibilidad y efecto teranóstico combinado de MOFs nanométricos (nano-

MOFs) basados en hierro,^[8] 2) MOFs intrínsecamente bioactivos,^[9] 3) MOFs en terapia fototérmica (TFT),^[10] 4) combinación sinérgica de terapia fotodinámica (TFD) y TFT,^[11] 5) asociación de fototerapia e inmunoterapia,^[12,13] o 6) primer ensayo clínico con MOFs para radioterapia,^[14,15] constituyendo las bases de un nuevo campo de investigación.

Muchos de estos avances no habrían sido posibles sin demostrar la biocompatibilidad de MOFs y combinarlos con otras especies orgánicas (ej. fármacos, gases biológicos, macromoléculas, polímeros) o inorgánicas (ej. complejos, óxidos, nanopartículas metálicas).^[16-21] En esta revisión, nos centraremos en la asociación de MOFs con nanopartículas plasmónicas (PNPs) por su gran interés para terapias combinadas, principalmente en oncología. Mientras los MOFs permiten la encapsulación y liberación controlada de numerosos principios activos, actividad intrínseca y gran versatilidad, las PNPs son valiosas he-

ramientas para bioimagen, fototerapia y como sensores.^[22,23] Generalmente basadas en metales nobles como Au y Ag, la resonancia de plasmón superficial localizado (LSPR, por sus siglas en inglés *Localized Surface Plasmon Resonance*) de las PNP les otorga propiedades ópticas singulares, incluyendo una intensa absorción y dispersión de la luz, la amplificación local de campos electromagnéticos y una elevada eficiencia en la conversión fototérmica. Sin embargo, su aplicación práctica suele verse limitada por su baja estabilidad coloidal, ya que su frecuente agregación o sinterización pueden alterar de manera significativa sus propiedades plasmónicas y comprometer su rendimiento óptico.^[20,24]

Para favorecer su estabilidad coloidal, se ha propuesto recientemente la integración de las PNP en MOFs.^[25,26] En particular, los MOFs a escala nanométrica (nanoMOFs) favorecen una interacción eficiente con sistemas biológicos,^[5,27] permitiendo optimizar su bioseguridad y biodistribución, entre otros.

En este contexto, la integración de las PNP en nanoMOFs ha impulsado el desarrollo de nanomedicinas PNP@MOF, las cuales conservan las propiedades ópticas de las PNP y, al mismo tiempo, se benefician del entorno protector y funcional proporcionado por el nanoMOF. Esta combinación proporciona una mayor estabilidad y multifuncionalidad favoreciendo su aplicación en diversos campos como la biomedicina, la detección y la (foto)catálisis.^[28-30] En el ámbito de la biomedicina, y particularmente en el tratamiento del cáncer, estos nanocomposites han demostrado un notable potencial como sistemas multiterapéuticos y teranósticos.^[31,32] Diferentes modalidades terapéuticas, como la terapia fototérmica (TFT, destrucción del tumor mediada por hipertermia inducida por luz), la terapia fotodinámica (TFD, generación localizada de especies reactivas de oxígeno), la quimioterapia (tratamiento convencional basado en fármacos citotóxicos) activada o no por estímulos externos (ej. temperatura, pH, luz), la inmunoterapia (activación o modulación del sistema inmunitario), la radioterapia (RT, daño del ADN inducido por radiación ionizante) y la cirugía (ablación del tumor) pueden combinarse con PNP@MOFs para generar efectos sinérgicos y mejorar la eficacia del tratamiento. De forma complementaria, las propiedades ópticas y electrónicas de estos materiales los hacen especialmente atractivos en diagnóstico e imagen biomédica, incluyendo técnicas como la imagen fotoacústica o la tomografía computarizada, lo que permite el seguimiento y la monitorización del tratamiento en tiempo real.^[33,34]

Estrategias sintéticas

La asociación de las PNP en nanoMOFs se basa en estrategias sintéticas diseñadas para preservar tanto la integridad estructural del MOF como la funcionalidad plasmónica de las PNP. En general, se han propuesto tres enfoques sintéticos: i) arquitecturas núcleo-corteza (*core-shell* o *bottle-around-a-ship*), en las que PNP preformadas actúan como núcleo para el crecimiento del MOF; ii) encapsulación, donde las PNP deben difundir en la porosidad del MOF; y iii) reducción *in situ*, también conocida como estrategia *ship-in-a-bottle*, en la que los precursores metálicos de las PNP se introducen y reducen dentro del MOF previamente formado.

Más recientemente, han surgido enfoques híbridos que combinan estas metodologías o incorporan nanopartículas multimetálicas, dando lugar a nanomedicinas más avanzadas.

Encapsulación

Esta estrategia implica la difusión de PNP, previamente sintetizadas, en la porosidad de un MOF preformado (Figura 1).^[35,36]

Este enfoque es experimentalmente sencillo, pero depende en gran medida de la relación entre el tamaño de las PNP y las dimensiones de los poros del MOF. En la práctica, se favorece el uso de PNP esféricas, ya que las morfologías anisotrópicas pueden presentar limitaciones estéricas y orientaciones desfavorables dentro de la red porosa.^[37]

En esta estrategia de síntesis, se emplean principalmente dos métodos de encapsulación: la molienda mecánica y la impregnación. Aunque la molienda mecánica puede forzar la entrada de PNP en la estructura porosa, su uso es limitado debido a la posible agregación de las PNP y al deterioro de la cristalinidad y la porosidad del MOF bajo esfuerzo mecánico. Por el contrario, la impregnación, basada en la mezcla de dispersiones coloidales de ambos componentes (PNP y MOF), constituye una alternativa más suave, aunque requiere una cuidadosa selección de disolventes y condiciones experimentales para evitar su degradación. La eficiencia de la encapsulación depende de factores como el tiempo, la temperatura y el área superficial disponible, siendo generalmente favorecida por tiempos de contacto prolongados y temperaturas más elevadas.^[37-39] Por ello, el uso de MOFs estables química y térmicamente resulta crucial para el éxito de esta estrategia.

La encapsulación se utiliza menos que las vías *core-shell* y de reducción *in situ*, probablemente debido a la dificultad intrínseca de sintetizar PNP lo suficientemente pequeñas como para difundir en los poros del MOF sin recurrir al uso de una plantilla (*template*). Como ejemplo, Xu *et al.* encapsularon nanoestrellas de oro (AuNS) con carga positiva en nanohojas 2D de Zn-MOF mediante autoensamblaje electrostático.^[40] La caracterización confirmó que las AuNS se distribuían uniformemente sobre la superficie del Zn-MOF en forma de partículas individuales.

En conjunto, aunque la encapsulación constituye una vía sintética sencilla y versátil, está fuertemente limitada por el tamaño de las nanopartículas, las restricciones difusionales y las dificultades asociadas a la determinación precisa de su localización dentro de la estructura del MOF.

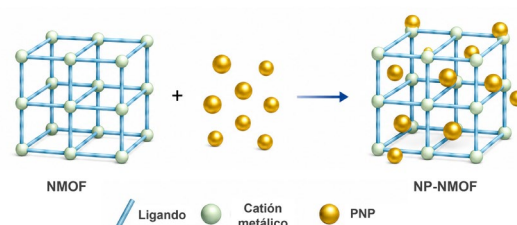


Figura 1. Esquema sintético de encapsulación de PNP en el MOF.

Core-shell

Los nanocomposites PNP@MOF *core-shell* consisten en una PNP central recubierta por una capa de MOF formando una arquitectura que proporciona una estabilización eficaz y, al mismo tiempo, preserva las propiedades ópticas de las PNP (Figura 2). Sin embargo, la síntesis de estos composites representa un gran reto debido a la frecuente incompatibilidad entre los requisitos fisicoquímicos necesarios para la cristalización del MOF y la estabilidad de las PNP. En este sentido, los MOFs suelen sintetizarse bajo condiciones agresivas (ej. temperatura, presión, pH) que pueden inducir la degradación, agregación o sinterización de las PNP, mientras que la presencia de estas PNP puede alterar las rutas de nucleación y los equilibrios termodinámicos implicados en la formación del MOF.

La formación de este tipo de composites depende de varios factores: i) la superficie de la PNP debe proporcionar centros de anclaje adecuados para favorecer la nucleación del MOF, lo que depende de la afinidad entre los precursores del MOF y dicha superficie;^[41,42] ii) la falta de compatibilidad cristalográfica entre la PNP y el MOF puede dificultar la nucleación y reducir la probabilidad de un crecimiento uniforme de la corteza;^[41] y iii) las condiciones sintéticas deben ajustarse cuidadosamente para preservar la estabilidad coloidal de las PNP, especialmente en aquellas con alta relación superficie/volumen.^[43] En este sentido, es frecuente encontrar varias PNP rodeadas por el MOF. Por tanto, la obtención de composites PNP@MOF *core-shell* bien definidos suele requerir un delicado equilibrio entre estos parámetros.^[41]

Por estas razones, generalmente se ha utilizado el imidazolato de Zn, ZIF-8, como MOF ya que permite su formación bajo una amplia variedad de condiciones suaves (disolvente, temperatura y método de síntesis) compatibles con la estabilidad de las PNP.^[44,45]

Otros ejemplos incluyen MOFs robustos y altamente porosos ($\sim 2600 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$) basados en zirconio, como NU-1000 y PCN-222, que presentan además fotoactividad intrínseca,^[46-48] contribuyendo con funcionalidades adicionales (ej. fluorescencia, sensorización). En conjunto, el uso de MOFs estructuralmente robustos y versátiles resulta clave para garantizar la estabilidad, funcionalidad y efectividad de los composites plasmónicos en entornos biológicos, especialmente en terapias oncológicas.

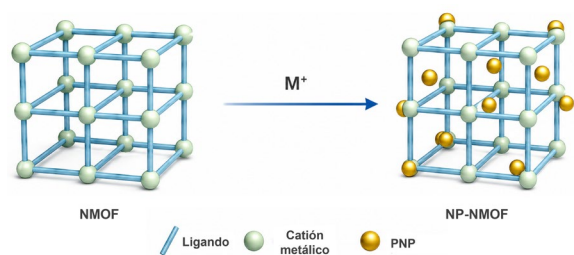


Figura 2. Esquema sintético de la estrategia core-shell para la obtención de los composites de MOF.

Reducción *in situ*

La formación de composites PNP@MOF mediante reducción *in situ* consiste en la formación de PNP en los poros o en la matriz del MOF mediante la reducción química, sonoquímica o fotoquímica de un precursor metálico (Figura 3). A diferencia de la estrategia de encapsulación, este enfoque no está limitado por el tamaño de los poros del MOF y permite un mayor control sobre el confinamiento de las PNP dentro de la estructura. Sin embargo, un crecimiento no controlado puede provocar daños estructurales en el MOF (ej. generación de defectos, colapso de porosidad), por lo que resulta esencial controlar con precisión los procesos de nucleación y la cinética de crecimiento de las PNP.

La estrategia de reducción *in situ* se ha utilizado ampliamente debido a la posibilidad de generar PNP ultrapequeñas (incluso clústeres metálicos) y a su elevada versatilidad, pudiendo aplicarse a una amplia variedad de MOFs. Por ejemplo, se han incorporado nanopartículas de oro (AuNP) en la matriz de UiO-66, UiO-66-NH₂ o IRMOF-3 mediante reducción química *in situ* (usando NaBH₄ como reductor), dando lugar a composites (AuNP@MOF) útiles en detección y catálisis. Es importante señalar que la localización de las AuNP dentro de los poros sigue siendo difícil de confirmar.^[49,50] Otros ejemplos se basan en

la formación de composites basados en AuNP o AgNP y diversos MOFs (ZIF-7(Zn), ZIF-11(Zn), MIL-101(Cr) MIL-88B-NH₂(Fe)), lo que demuestra la amplia aplicabilidad de esta estrategia en diferentes topologías y composiciones del MOF.^[51-54]

Otros métodos incluyen la reducción fotoquímica *in situ*, que permite un control fino sobre el tamaño y la distribución de las PNP. Como ejemplo, nuestro grupo desarrolló una metodología para la formación de nanoclústeres de plata (AgNCs) mediante fotorreducción, confirmando mediante técnicas microscópicas avanzadas su localización en los poros del MOF fotoactivo de Ti, MIL-125-NH₂.^[55]

Si bien persisten desafíos relacionados con el control preciso del crecimiento de las PNP y su localización dentro de la matriz porosa, los ejemplos descritos evidencian la gran flexibilidad y versatilidad de la estrategia de reducción *in situ* para la obtención de nanocomposites plasmónicos avanzados.

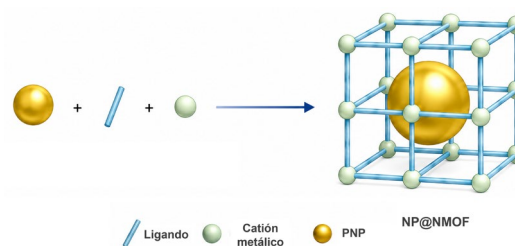


Figura 3. Esquema sintético de formación *in situ* de PNP en presencia del MOF.

Nanoplataformas avanzadas

Aparte de las arquitecturas más convencionales descritas anteriormente, en los últimos años se han intensificado los esfuerzos dirigidos al desarrollo de nanocomposites PNP@MOF más avanzados,^[56] como i) sistemas con nanopartículas multimetálicas; ii) estructuras huecas y arquitecturas *yolk-shell*; iii) sistemas multicapa; y iv) arquitecturas híbridas. Estas arquitecturas complejas permiten ajustar con mayor precisión las propiedades fisicoquímicas, ópticas y catalíticas del composite resultante, mediante el control de la composición, la distribución espacial y el confinamiento de las nanopartículas dentro de la matriz del MOF.

Como ejemplo, Guo *et al.* desarrollaron una nanoplataforma híbrida,^[57] DOX@AuNRs-MSN-MOF, basada en nanovarillas de Au (AuNRs) recubiertos de sílice mesoporosa y una cubierta del MOF crecida *in situ*, integrando liberación controlada del fármaco antitumoral doxorubicina (DOX), fototerapia e imagen multimodal para aplicaciones teranósticas. También, Chen *et al.* fabricaron una nanoplataforma,^[58] DOX-Pt-tipped Au@ZIF-8, basada en nanorods de Au decorados selectivamente con Pt y, posteriormente, encapsulados junto con DOX en ZIF-8. Este nanocomposite combina propiedades plasmónicas y propiedades en tomografía/fototerapia, permitiendo la terapia quimio-fototérmica combinada bajo irradiación en el infrarrojo cercano (NIR-II). De forma similar, MOFs basados en Zr decorados con Pt y recubiertos posteriormente con una corteza (*nanoshell*) de oro demostraron multifuncionalidad fototérmica, catalítica y de imagen multimodal.^[59] Más recientemente, nuestro grupo de investigación ha demostrado que los MOFs también constituyen excelentes soportes para la formación controlada de PNP bimetalicas. En este sentido, nanopartículas de aleación Au/Ag confinadas en la porosidad de MIL-125-NH₂(Ti) fueron obtenidas mediante reemplazo galvánico, preservando la estructura cristalina y la estabilidad coloidal del MOF.^[60] La combinación de ambas especies metálicas permitió potenciar la interacción con radiación ionizante respecto al MOF inicial.

Aunque la determinación precisa de la naturaleza, localización y distribución de las PNP continúa requiriendo técnicas de caracterización de alta resolución, los avances alcanzados han abierto nuevas posibilidades para el diseño de nanocomposites PNP@MOF con niveles de complejidad y funcionalidad sin precedentes.

Nanoplataformas multifuncionales para terapia combinada y teranóstica

Las nanoplataformas PNP@MOF han impulsado su aplicación en terapias combinadas y teranóstica gracias a sus propiedades plasmónicas, su elevada versatilidad estructural y la naturaleza porosa del MOF (Figura 4).^[33] En particular, se han estudiado ampliamente en las terapias oncológicas TFT y TFD. Bajo irradiación lumínica, las PNP convierten eficazmente la energía electromagnética en calor a través de su LSPR, permitiendo la generación de hipertermia localizada y la ablación tumoral. De manera complementaria, la matriz del MOF puede contener fotosensibilizadores y/o generar especies reactivas de oxígeno (ROS, sus siglas en inglés *reactive oxygen species*) a través de sus centros metálicos activos, facilitando la TFD.^[61] Más recientemente, la combinación de ambas terapias (TFT y TFD) en una misma plataforma ha demostrado efectos terapéuticos sinérgicos, mejorando la eficacia del tratamiento, reduciendo las dosis necesarias y minimizando los efectos secundarios.^[62] Asimismo, numerosos estudios *in vivo* han validado estas plataformas en modelos animales, donde se han observado importantes reducciones del volumen tumoral junto con una alta biocompatibilidad. Aunque persisten desafíos relacionados con la escalabilidad, reproducibilidad y evaluación toxicológica a largo plazo, estos resultados posicionan a los composites plasmónicos-MOF como candidatos prometedores para aplicaciones teranósticas.

Aparte de las terapias activadas por luz, las nanoplataformas PNP@MOF también se han propuesto recientemente como potenciadores de radioterapia, especialmente mediante la incorporación de elementos plasmónicos de alto número atómico, como el oro.^[23,63] Estas PNP pueden amplificar el daño inducido por la radiación al aumentar la deposición local de energía y la generación de electrones secundarios, mientras que el MOF contribuye a su estabilización y adecuada distribución espacial. Esta estrategia resulta particularmente atractiva cuando se combina con otras modalidades terapéuticas, lo que permite mejorar aún más los resultados terapéuticos.

Por otro lado, este tipo de nanoplataformas facilitan el desarrollo de sistemas teranósticos, en los que diagnóstico y terapia se integran en un mismo material. Sus propiedades ópticas permiten aplicaciones en imagen fotoacústica, mientras que la incorporación de elementos de alto número atómico puede proporcionar contraste en tomografía computarizada (TC). Esta funcionalidad dual permite el seguimiento en tiempo real del tratamiento, mejorando su precisión y favoreciendo estrategias terapéuticas personalizadas.^[34,64]

Considerando el rápido crecimiento de este campo, en esta sección se han seleccionado ejemplos representativos publicados en los últimos años, priorizando aquellos con estudios *in vivo* para ilustrar las principales estrategias terapéuticas y teranósticas de los nanocomposites PNP@MOF.

La mayoría de los sistemas reportados combinan las propiedades fototérmicas de las PNP y la elevada porosidad, capacidad de carga y respuesta a estímulos del MOF. En este contexto, la quimioterapia combinada con TFT constituye una de las estrategias más exploradas. Como ejemplo representativo, las nanoestructuras tipo *yolk-shell* Au@ZIF-8 y los nanocomposites de ZIF-8 con AuNPs o AuNRs mostraron una liberación eficiente

de fármacos con respuesta a un estímulo externo (pH) junto con una elevada conversión fototérmica bajo NIR, dando lugar a notables efectos antitumorales sinérgicos e incluso a la eliminación completa del tumor *in vivo* empleando menores dosis de fármaco.^[65-67] Gao *et al.* desarrollaron nanocomposites basados en AuNRs y un Fe-MOF, AuNR@MIL-101(Fe)-NH₂.^[68] Estos composites, funcionalizados con nanoválvulas supramoleculares de carboxilatopillar[5]areno, permitieron una liberación controlada de fármacos activada por múltiples estímulos (pH, temperatura y Ca²⁺), combinada con TFT e imagen por TC. Los estudios tanto *in vitro* como *in vivo* demostraron una eficacia antitumoral superior a la obtenida mediante quimioterapia o TFT aislada. Otros sistemas más complejos, basados en arquitecturas *core-shell* que integran AuNRs, nanopartículas de sílica mesoporosa y DOX integraron quimioterapia, TFT e imagen multimodal, incluyendo resonancia magnética (RM), CT e imagen fotoacústica en una única nanoplataforma dirigida mediante la funcionalización superficial con ácido hialurónico, aprovechando su afinidad por receptores CD44 sobre-expresados en células tumorales. La acción sinérgica entre la liberación dirigida del fármaco y la TFT dio lugar a una elevada eficacia antitumoral en estudios *in vitro* e *in vivo*, demostrando además capacidades de imagen trimodal para terapia guiada por imagen.^[57]

Otros ejemplos más recientes han explorado estrategias relacionadas con la radioterapia, como las heterouniones bimetalicas, AuNR@Mn/Ru-MOF, donde los AuNRs potencian la generación de ROS inducida por rayos X y la terapia radiodinámica, mientras que la liberación simultánea de Mn²⁺ activa respuestas inmunitarias antitumorales.^[69] Gracias a la combinación de ambos mecanismos, estos nanocomposites mostraron una notable inhibición del crecimiento tumoral *in vivo*, evidenciando el interés de los nanocomposites PNP@MOF para integrar radioterapia e inmunoterapia en una misma plataforma.

Es importante destacar que diversos estudios han puesto de manifiesto el potencial teranóstico de PNP@MOF mediante la integración de imagen y terapia. Como muestra, las nanoestructuras AuNS@MIL-101-NH₂(Fe) funcionalizadas con el péptido ZD2 como molécula diana permitieron el reconocimiento selectivo de células de cáncer de mama triple negativo (TNBC), integrando direccionamiento molecular, contraste MRI y TFT en una única plataforma teranóstica. Los estudios *in vivo* demostraron una elevada biocompatibilidad, un eficiente contraste T₁ y una marcada eficacia fototérmica frente a células TNBC, evidenciando su potencial para el diagnóstico y tratamiento.^[70] De manera similar, las nanoestructuras Au@MIL-88(Fe) mostraron una eficiente capacidad de imagen trimodal, TC/RM/fotoacústica, para la visualización precisa y no invasiva de gliomas.^[71] Tanto los estudios *in vitro* como *in vivo* evidenciaron una baja citotoxicidad y un elevado contraste en las tres modalidades de imagen, proporcionando una alta sensibilidad, penetración y resolución espacial en el diagnóstico de tumores cerebrales.

Más allá de las estrategias quimio-fototérmicas, se han intensificado los esfuerzos dirigidos a incorporar mecanismos terapéuticos adicionales para superar la resistencia tumoral y la hipoxia. Podemos citar aquí el trabajo de Li *et al.* desarrollando sistemas basados en MOFs porfirínicos que incorporan AuNSs, los cuales combinan TFT, TFD y quimioterapia, contribuyendo a aliviar la hipoxia tumoral.^[72] También, sistemas Au@ZIF-8 con nanocristales de Pt,^[58] así como nanoshells octaédricos de Au crecidos sobre un MOF basado en Zr decorados con Pt,^[59] utilizan la generación de O₂ mediada por nanoenzimas para mejorar la eficacia de la TFD en condiciones hipóxicas. Estas nanoplataformas proporcionan además funcionalidades de imagen multimodal, incluyendo TC, RM, fluorescencia e imagen fotoacústica con prometedores resultados *in vivo*.

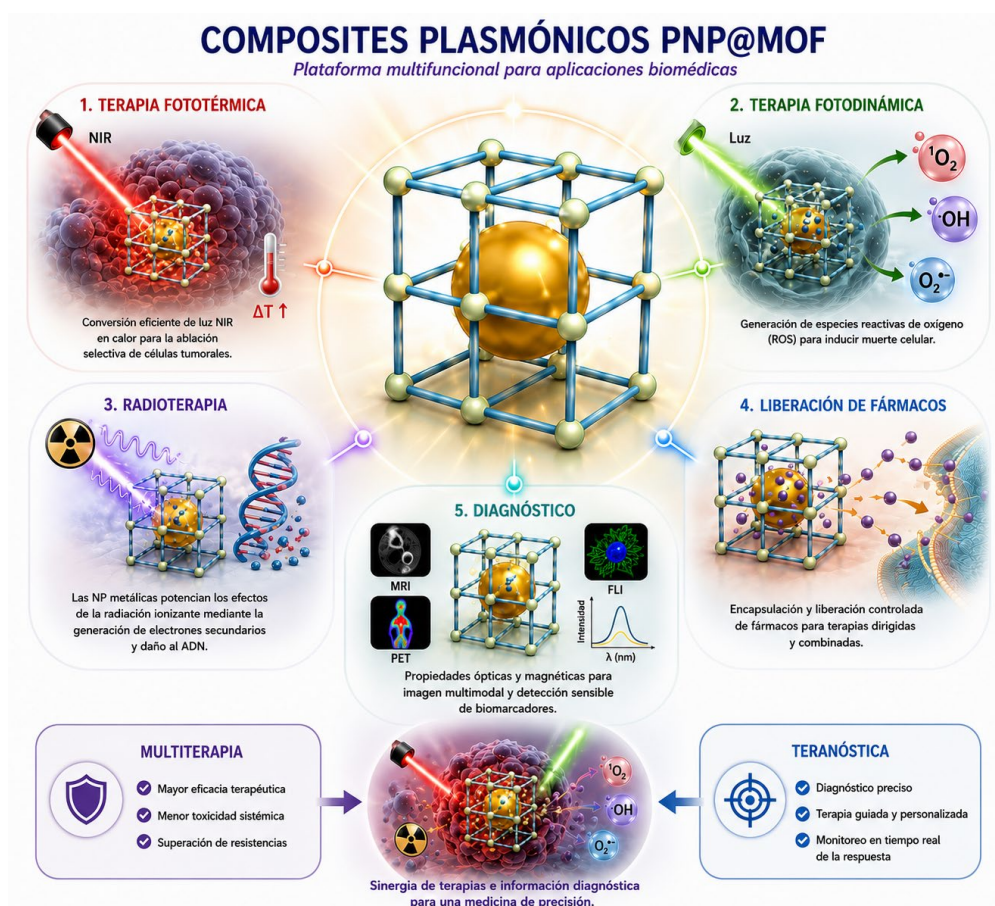


Figura 4. Esquema ilustrativo de las principales aplicaciones biomédicas de los nanocompuestos plasmónicos, incluyendo terapia fototérmica, terapia fotodinámica, radioterapia, liberación controlada de fármacos y diagnóstico multimodal.

Fuera del ámbito oncológico, estos sistemas multifuncionales comienzan también a extenderse al tratamiento de enfermedades inflamatorias. En este sentido, Pan *et al.* desarrollaron una nanomedicina compuesta por un Zr-MOF integrado con nanopartículas de Au y Pt, puntos cuánticos y un recubrimiento de polidopamina.^[73] El MOF con las nanopartículas de Pt actúa como fotocatalizador para la generación de hidrógeno, las AuNPs mejoran la separación de cargas mediante resonancia plasmónica superficial, la polidopamina proporciona capacidad fototérmica y los puntos cuánticos de perovskita funcionan como sondas fluorescentes. La combinación sinérgica de TFT y terapia basada en hidrógeno permitió reducir significativamente la progresión de la artritis reumatoide en modelos animales, ampliando el campo de aplicación de los composites plasmónicos-MOF hacia enfermedades inflamatorias.

Conclusiones

Los nanocompuestos PNP-MOFs han evolucionado desde simples sistemas de liberación de fármacos o sistemas utilizados en aplicaciones (foto)catalíticas y detección, hacia nanoplataformas multifuncionales altamente integradas, capaces de combinar terapia, respuesta a estímulos específicos e imagen multimodal en un único sistema. No obstante, a pesar de los prometedores resultados de las primeras pruebas de concepto, persisten importantes desafíos relacionados con la complejidad sintética, la estabilidad coloidal/química en entornos biológicos, la reproducibilidad y/o la traslación clínica, aspectos que deberán abordarse en futuros desarrollos.

Agradecimientos

Las autoras agradecen el apoyo financiero de los proyectos regionales CMOFs4water-CM (TEC-2024/ECO-332, programa "Tecnologías2024") financiado por la Comunidad de Madrid y HUB MADRID+VUELA SOSTENIBLE (59/180948.9/23), financiado por la Comunidad de Madrid y cofinanciado por la Unión Europea a través de la convocatoria de "Ayudas para el impulso de la colaboración público-privada en I+D+i mediante proyectos en cooperación de impacto regional".

Bibliografía

- [1] C. Duan, K. Liang, Z. Zhang, J. Li, T. Chen, D. Lv, L. Li, L. Kang, K. Wang, H. Hu, H. Xi, *Nano Mater. Sci.* **2022**, *4*, <https://doi.org/10.1016/j.nanoms.2021.12.003>.
- [2] S. Mallakpour, E. Nikkhoo, C. M. Hussain, *Coord. Chem. Rev.* **2022**, *451*, 214262, <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2021.214262>.
- [3] L. Öhrström, F. M. Amombo Noa, *Metal-Organic Frameworks*, American Chemical Society, **2020**.
- [4] O. M. Yaghi, M. J. Kalmuzki, C. S. Diercks, *Introduction to Reticular Chemistry: Metal-Organic Frameworks and Covalent Organic Frameworks*, Wiley-Blackwell, **2019**.
- [5] P. Horcajada, C. Serre, M. Vallet-Regí, M. Sebba, F. Tauler, G. Férey, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2006**, *45*, 5974-5978, <https://doi.org/10.1002/anie.200601878>.
- [6] W. J. Rieter, K. M. L. Taylor, H. An, W. Lin, W. Lin, *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 9024-9025, <https://doi.org/10.1021/ja0627444>.
- [7] P. Gao, Y. Chen, W. Pan, N. Li, Z. Liu, B. Tang, *Angew. Chem.*

- Int. Ed.* **2021**, *60*, 16763-16776, <https://doi.org/10.1002/anie.202102574>.
- [8] P. Horcajada, T. Chalati, C. Serre, B. Gillet, C. Sebrie, T. Baati, J. F. Eubank, D. Heurtaux, P. Clayette, C. Kreuz, J. S. Chang, Y. K. Hwang, V. Marsaud, P. N. Bories, L. Cynober, S. Gil, G. Férey, P. Couvreur, R. Gref, *Nat. Mater.* **2010**, *9*, 172-178, <https://doi.org/10.1038/nmat2608>.
- [9] S. R. Miller, D. Heurtaux, T. Baati, P. Horcajada, J. M. Grenèche, C. Serre, *Chem. Commun.* **2010**, *46*, 4526-4528, <https://doi.org/10.1039/c001181a>.
- [10] K. Lu, T. Aung, N. Guo, R. Weichselbaum, W. Lin, *Adv. Mater.* **2018**, *30*, 1-20, <https://doi.org/10.1002/adma.201707634>.
- [11] Q. Zheng, X. Liu, Y. Zheng, K. W. K. Yeung, Z. Cui, Y. Liang, Z. Li, S. Zhu, X. Wang, S. Wu, *Chem. Soc. Rev.* **2021**, *50*, 5086-5125, <https://doi.org/10.1039/D1CS00056j>.
- [12] K. Ni, T. Luo, G. Lan, A. Culbert, Y. Song, T. Wu, X. Jiang, W. Lin, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2020**, *59*, 1108-1112, <https://doi.org/10.1002/anie.201911429>.
- [13] K. Ni, G. Lan, C. Chan, B. Quigley, K. Lu, T. Aung, N. Guo, P. La Riviere, R. R. Weichselbaum, W. Lin, *Nat. Commun.* **2018**, *9*, 2351-2363, <https://doi.org/10.1038/s41467-018-04703-w>.
- [14] K. Ni, G. Lan, S. S. Veroneau, X. Duan, Y. Song, W. Lin, *Nat. Commun.* **2018**, *9*, 4321-4334, <https://doi.org/10.1038/s41467-018-06655-7>.
- [15] Phase I Clinical Trial, NCT03444714, **2018**.
- [16] R. Ertlinger, U. Lächelt, R. Gref, P. Horcajada, T. Lammers, C. Serre, P. Couvreur, R. E. Morris, S. Wuttke, *Chem. Soc. Rev.* **2022**, *51*, 464-484, <https://doi.org/10.1039/D1CS00918D>.
- [17] S. Rojas, A. Arenas-Vivo, P. Horcajada, *Coord. Chem. Rev.* **2019**, *388*, 202-226, <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2019.02.032>.
- [18] C. He, D. Liu, W. Lin, *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 11079-11108, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.5b00125>.
- [19] D. F. Picchi, C. Biglione, P. Horcajada, *ACS Nanosci. Au* **2024**, *85*-114, <https://doi.org/10.1021/acsnanosciencenau.3c00041>.
- [20] S. N. K. Lelouche, C. Biglione, P. Horcajada, *Expert Opin. Drug Delivery* **2022**, *19*, 1417-1434, <https://doi.org/10.1080/17425247.2022.2130245>.
- [21] P. Falcaro, R. Ricco, A. Yazdi, I. Imaz, S. Furukawa, D. Maspoeh, R. Ameloot, J. D. Evans, C. J. Doonan, *Coord. Chem. Rev.* **2016**, *307*, 237-254, <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2015.08.002>.
- [22] L. Ricciardi, L. Sancey, G. Palermo, R. Termine, A. De Luca, E. I. Szerb, I. Aiello, M. Ghedini, G. Strangi, M. La Deda, *Nanoscale* **2017**, *9*, 19279-19289, <https://doi.org/10.1039/C7N1R05522F>.
- [23] Y. Wu, K. Zhu, X. Zhang, W. Du, J. Song, H. Yang, *Adv. Drug Deliv. Rev.* **2023**, *194*, 114710, <https://doi.org/10.1016/j.addr.2023.114710>.
- [24] S. Mourdikoudis, S. Dutta, S. Kamal, S. Gómez-Graña, I. Pastoriza-Santos, S. Wuttke, L. Polavarapu, *Adv. Mater.* **2025**, *37*, 2415399, <https://doi.org/10.1002/adma.202415399>.
- [25] W. Cai, C. C. Chu, G. Liu, Y. X. J. Wang, *Small* **2015**, *11*, 4806-4822, <https://doi.org/10.1002/sml.201500802>.
- [26] A. C. McKinlay, R. E. Morris, P. Horcajada, G. Férey, R. Gref, P. Couvreur, C. Serre, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2010**, *49*, 6260-6266, <https://doi.org/10.1002/anie.201000048>.
- [27] R. F. Mendes, F. Figueira, J. P. Leite, L. Gales, F. A. Almeida Paz, *Chem. Soc. Rev.* **2020**, *49*, 9121-9153, <https://doi.org/10.1039/D0CS00883D>.
- [28] M. Chalermnon, S. R. Thomas, J. M. Chin, M. R. Reithofer, *Inorg. Chem. Front.* **2025**, *12*, 6435-6459, <https://doi.org/10.1039/D5QI01201E>.
- [29] S. Huang, Q. Chen, Y. Li, L. Duan, X. Zhao, Y. Lu, Z. Chen, *Biosensors* **2026**, *16*, 53, <https://doi.org/10.3390/bios16010053>.
- [30] G. Zheng, I. Pastoriza-Santos, J. Pérez-Juste, L. M. Liz-Marzán, *SmartMat* **2021**, *2*, 446-465, <https://doi.org/10.1002/smm2.1047>.
- [31] Y. Wang, J. Yan, N. Wen, H. Xiong, S. Cai, Q. He, Y. Hu, D. Peng, Z. Liu, Y. Liu, *Biomaterials* **2020**, *230*, 119619, <https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2019.119619>.
- [32] W. Cai, J. Wang, C. Chu, W. Chen, C. Wu, G. Liu, *Adv. Sci.* **2019**, *6*, 1801526, <https://doi.org/10.1002/advs.201801526>.
- [33] Z. Zhang, W. Sang, L. Xie, Y. Dai, *Coord. Chem. Rev.* **2019**, *399*, 213022, <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2019.213022>.
- [34] J. Yang, D. Dai, X. Zhang, L. Teng, L. Ma, Y. W. Yang, *Theranostics* **2023**, *13*, 295-323, <https://doi.org/10.7150/thno.80687>.
- [35] D. G. Shchukin, J. H. Schattka, M. Antonietti, R. A. Caruso, *J. Phys. Chem. B* **2003**, *107*, 952-957, <https://doi.org/10.1021/jp026929i>.
- [36] P. P. Semyannikov, B. L. Moroz, S. V. Trubin, G. I. Zharkova, P. A. Pyryaev, M. Yu. Smirnov, V. I. Bukhtiyarov, *J. Struct. Chem.* **2006**, *47*, 473-479, <https://doi.org/10.1007/s10947-006-0323-7>.
- [37] E. E. Petersen, *AIChE J.* **1958**, *4*, 343-345, <https://doi.org/10.1002/aic.690040322>.
- [38] O. K. Dudko, A. M. Berezhevskii, G. H. Weiss, *J. Phys. Chem. B* **2005**, *109*, 21296-21299, <https://doi.org/10.1021/jp051172r>.
- [39] R. Krishna, *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 3099-3118, <https://doi.org/10.1039/c2cs15284c>.
- [40] Q. Xu, X. Liao, W. Hu, W. Liu, C. Wang, *J. Mater. Chem. B* **2021**, *9*, 9606-9614, <https://doi.org/10.1039/D1TB02141A>.
- [41] Y. Li, W. S. Lo, F. Zhang, X. Si, L. Y. Chou, X. Y. Liu, B. P. Williams, Y. H. Li, S. H. Jung, Y. S. Hsu, F. S. Liao, F. K. Shieh, M. N. Ismail, W. Huang, C. K. Tsung, *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 5182-5190, <https://doi.org/10.1021/jacs.1c01357>.
- [42] S. K. Ghosh, S. Nath, S. Kundu, K. Esumi, T. Pal, *J. Phys. Chem. B* **2004**, *108*, 13963-13971, <https://doi.org/10.1021/jp047021q>.
- [43] M. Q. He, Y. L. Yu, J. H. Wang, *Nano Today* **2020**, *35*, 101005, <https://doi.org/10.1016/j.nantod.2020.101005>.
- [44] R. Schürmann, E. Titov, K. Ebel, S. Kogikoski, A. Mostafa, P. Saalfrank, A. R. Milosavljević, I. Bald, *Nanoscale Adv.* **2022**, *4*, 1599-1607, <https://doi.org/10.1039/D1NA00737H>.
- [45] W. C. Ko, S. J. Wang, C. Y. Hsiao, C. T. Hung, Y. J. Hsu, D. C. Chang, C. F. Hung, *Molecules* **2022**, *27*, 1-12, <https://doi.org/10.3390/molecules27051551>.
- [46] J. W. M. Osterrieth, D. Wright, H. Noh, C. Kung, D. Vulpe, A. Li, J. E. Park, R. P. Van Duyne, P. Z. Moghadam, J. J. Baumberg, O. K. Farha, D. Fairen-Jimenez, *JACS* **2019**, *141*, 3893-3900, <https://doi.org/10.1021/jacs.8b11300>.
- [47] M. Cedrún-Morales, M. Ceballos, E. Soprano, G. Zampini, E. Polo, B. Pelaz, P. del Pino, *Small Sci.* **2024**, *4*, 2400088, <https://doi.org/10.1002/sssc.202400088>.
- [48] M. Ceballos, S. Funes-Hernando, G. Zampini, M. Cedrún-Morales, J. M. Vila-Fungueiriño, B. Pelaz, P. del Pino, *Small Struct.* **2024**, *5*, 2300464, <https://doi.org/10.1002/ssstr.202300464>.
- [49] A. Hashemzadeh, F. Amerizadeh, F. Asgharzadeh, M. Darrudi, A. Avan, S. M. Hassaniyan, M. Landarani, M. Khazaei, *Toxicol. Appl. Pharmacol.* **2021**, *423*, 115573, <https://doi.org/10.1016/j.taap.2021.115573>.
- [50] Yi Luan, Yue Qi, Hongyi Gao, N. Zheng, G. Wang *J. Mater. Chem. A*, **2014**, *2*, 20588-20596, <https://doi.org/10.1039/C4TA04311A>.
- [51] A. Malik, M. Nath, *J. Environ. Chem. Eng.* **2020**, *8*, 104547, <https://doi.org/10.1016/j.jece.2020.104547>.
- [52] A. Malik, M. Nath, *J. Water Process Eng.* **2021**, *44*, 102362, <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2021.102362>.
- [53] I. Gumus, A. Ruzgar, Y. Karatas, M. Gülcan, *Mol. Catal.* **2021**, *501*,

- 111363, <https://doi.org/10.1016/j.mcat.2020.111363>.
- [54] S. N. K. Lelouche, I. Lemir, C. Biglione, T. Craig, S. Bals, P. Horcajada, *Chem. - A Eur. J.* **2024**, *30*, 1-9, <https://doi.org/10.1002/chem.202400442>.
- [55] A. Arenas-Vivo, S. Rojas, I. Ocaña, A. Torres, M. Liras, F. Salles, D. Arenas-Esteban, S. Bals, D. Ávila, P. Horcajada, *J. Mater. Chem. A* **2021**, *9*, 15704-15713, <https://doi.org/10.1039/D1TA02251B>.
- [56] C.-X. Jing, F.-S. Liu, Y.-Z. Chen, Z. Li, *Coord. Chem. Rev.* **2025**, *540*, 216771, <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2025.216771>.
- [57] H. Guo, S. Yi, K. Feng, Y. Xia, X. Qu, F. Wan, L. Chen, C. Zhang, *Chem. Eng. J.* **2021**, *403*, 126432, <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.126432>.
- [58] M. M. Chen, H. L. Hao, W. Zhao, X. Zhao, H. Y. Chen, J. J. Xu, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 10848-10854, <https://doi.org/10.1039/D1SC01760H>.
- [59] Q. You, K. Zhang, J. Liu, C. Liu, H. Wang, M. Wang, S. Ye, H. Gao, L. Lv, C. Wang, L. Zhu, Y. Yang, *Adv. Sci.* **2020**, *7*, 1-19, <https://doi.org/10.1002/advs.201903341>.
- [60] C. Biglione, S. N. K. Lelouche, M. Cedrun-Morales, M. Ceballos, C. B. Huesa-Carballo, D. F. Picchi, T. M. Craig, S. Bals, J. Barbazan, P. del Pino, P. Horcajada, *Chem. Mater.* **2026**, *38*, 5058-5066, <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.6c00295>.
- [61] T. O. Abodunrin, G. O. Egharevba, F. D. Owoeye, J. A. Omojola, O. S. Adeyemi, *Mater. Adv.* **2025**, *6*, 1554-1577, <https://doi.org/10.1039/D4MA00425F>.
- [62] Z. Bao, K. Li, P. Hou, R. Xiao, Y. Yuan, Z. Sun, *Mater. Chem. Front.* **2021**, *5*, 1632-1654, <https://doi.org/10.1039/DOQM00786B>.
- [63] M. Laprise-Pelletier, T. Simão, M. A. Fortin, *Adv. Healthc. Mater.* **2018**, *7*, 1701460, <https://doi.org/10.1002/adhm.201701460>.
- [64] J. W. M. Osterrieth, D. Fairen-Jimenez, *Biotechnol. J.* **2021**, *16*, 2000005, <https://doi.org/10.1002/biot.202000005>.
- [65] X. Deng, S. Liang, X. Cai, S. Huang, Z. Cheng, Y. Shi, M. Pang, J. Ma, J. Lin, *Nano Lett.* **2019**, *19*, 6772-6780, <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.9b01716>.
- [66] L. Zeng, S. Ding, Y. Cao, C. Li, B. Zhao, Z. Ma, J. Zhou, Y. Hu, X. Zhang, Y. Yang, G. Duan, X. W. Bian, G. Tian, *ACS Nano* **2023**, *17*, 13195-13210, [https://doi.org/10.1021/acsnano.3c00048](https://doi.org/10.1021/acs.nano.3c00048).
- [67] H. Zhang, C. Hao, A. Qu, M. Sun, L. Xu, C. Xu, H. Kuang, *Adv. Funct. Mater.* **2018**, *28*, 1-9, <https://doi.org/10.1002/adfm.201805320>.
- [68] J. Gao, H. M. Yu, M. Wu, Q. Chen, Y. Yang, Y. Qu, M. Sun, J. C. Qin, L. Ma, Y. W. Yang, *Mater. Today Chem.* **2022**, *23*, 100716-100726, <https://doi.org/10.1016/j.mtchem.2021.100716>.
- [69] Z. Xiong, M. Yang, P. Liu, Z. Tang, Y. Yang, M. Zhan, T. Chen, X. Li, L. Lu, *Adv. Funct. Mater.* **2024**, *34*, 2312919, <https://doi.org/10.1002/adfm.202312919>.
- [70] L. Zhang, C. Liu, Y. Gao, Z. Li, J. Xing, W. Ren, L. Zhang, A. Li, G. Lu, A. Wu, L. Zeng, *Adv. Healthc. Mater.* **2018**, *7*, 1801144-1801152, <https://doi.org/10.1002/adhm.201801144>.
- [71] W. Shang, C. Zeng, Y. Du, H. Hui, X. Liang, C. Chi, K. Wang, Z. Wang, J. Tian, *Adv. Mater.* **2017**, *29*, 1604381-1604389, <https://doi.org/10.1002/adma.201604381>.
- [72] R. T. Li, Y. D. Zhu, W. Y. Li, Y. K. Hou, Y. M. Zou, Y. H. Zhao, Q. Zou, W. H. Zhang, J. X. Chen, *J. Nanobiotechnology* **2022**, *20*, 1-22, <https://doi.org/10.1186/s12951-022-01427-4>.
- [73] W. Pan, Z. Li, S. Qiu, C. Dai, S. Wu, X. Zheng, M. Guan, F. Gao, *Mater. Today Bio* **2022**, *13*, 100214, <https://doi.org/10.1016/j.mtbio.2022.100214>.



Catalina Biglione

Unidad de Materiales Porosos Avanzados,
Instituto IMDEA Energía

E: catalina.biglione@imdea.org
ORCID: 0000-0001-7361-7093

Catalina Biglione es Doctora en Ciencias Químicas por la Universidad Nacional de Córdoba (Argentina). Su investigación se ha centrado en el diseño de materiales funcionales avanzados, incluyendo nanopartículas, nanogeles y materiales porosos para aplicaciones en salud, energía y medioambiente. Tras realizar estancias posdoctorales en la Universidad Libre de Berlín (Alemania), se incorporó en 2021 a la Unidad de Materiales Porosos Avanzados de la Fundación IMDEA Energía (España). Su trabajo actual se enfoca en el desarrollo de redes metal-orgánicas y materiales híbridos multifuncionales. En 2022 obtuvo una beca Marie Skłodowska-Curie para desarrollar materiales composites de MOF para resistencia antimicrobiana.

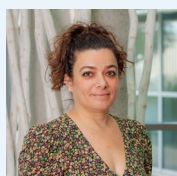


Yolanda Pérez

Grupo COMET-Nano, Departamento de
Geología, Física y Química Inorgánica,
ES CET, Universidad Rey Juan Carlos
Unidad de Materiales Porosos Avanzados,
Instituto IMDEA Energía

E: yolanda.cortes@urjc.es
ORCID: 0000-0001-9857-4472

Doctora por la Universidad Rey Juan Carlos, 2003. Actualmente, profesora Titular de Química Inorgánica en la Universidad Rey Juan Carlos e Investigadora Senior asociada en la Unidad de Materiales Porosos Avanzados en el Instituto IMDEA Energía. Su investigación está centrada en el desarrollo de materiales multifuncionales (perovskitas, MOFs y otros nanomateriales, y sus composites) para aplicaciones medioambientales y energéticas. En el ámbito de la divulgación, ha participado como ponente en conferencias de divulgación científica como: "Born Centre de Cultura I Memòria de Barcelona" (2022), "CaixaForum Zaragoza" (2019), "La Casa Encendida Madrid" (2017).



Patricia Horcajada

Unidad de Materiales Porosos Avanzados,
Instituto IMDEA Energía

E: patricia.horcajada@imdea.org
ORCID: 0000-0002-6544-5911

Patricia Horcajada es Doctora en Ciencia de Materiales (2005) por la Universidad Complutense de Madrid. Actualmente dirige la Unidad de Materiales Porosos Avanzados de la Fundación IMDEA Energía. Su actividad investigadora se centra en el diseño, síntesis, procesado y aplicación de materiales porosos multifuncionales, especialmente redes metal-orgánicas (MOFs), para abordar retos estratégicos en los ámbitos de la energía, el medioambiente y la salud. Su trabajo ha contribuido significativamente al desarrollo de materiales avanzados para aplicaciones industriales y biomédicas. Recientemente fue galardonada con el Premio a la Excelencia Investigadora de la Real Sociedad Española de Química 2026.

MOF vítreos: una nueva frontera en materiales híbridos funcionales

Glassy MOFs: a new frontier in functional hybrid materials

Celia Castillo Blas

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM-CSIC), Madrid.

PALABRAS CLAVE:

Redes metal-orgánicas
Vidrios de redes metal-orgánicas
Composites vidrio-MOF
Función de distribución de pares

RESUMEN:

Los vidrios de redes metal-orgánicas (MOFs) representan una nueva clase de materiales híbridos que combinan la funcionalidad química de los MOFs cristalinos con la buena procesabilidad de los vidrios. A través de tratamientos térmicos, tratamientos a diferentes presiones o síntesis directas, estos materiales pueden pasar de un estado cristalino ordenado a una fase amorfa con propiedades mecánicas, ópticas y químicas mejoradas. Estos materiales destacan por su estabilidad térmica, alta transparencia, resistencia mecánica y capacidad de adsorción, aunque reducida en comparación con el homólogo cristalino. Además, la formación de composites vidrio-MOF amplía aún más sus aplicaciones, permitiendo combinar fases cristalinas y amorfas de forma controlada. Su caracterización estructural, térmica y espectroscópica resulta clave para entender su comportamiento y diseñar nuevos materiales funcionales para aplicaciones en energía, catálisis, separación de gases y dispositivos optoelectrónicos.

KEYWORDS:

Metal-organic framework
Metal-organic framework glasses
Glass MOF-composites
Pair distribution function

ABSTRACT:

Glassy metal-organic frameworks (MOFs) represent a new class of hybrid materials that combine the chemical functionality of crystalline MOFs with the great processability of glasses. Through thermal treatments, applied pressure or direct synthesis, these materials can transition from an ordered crystalline state to an amorphous phase with enhanced mechanical, optical and chemical properties. They stand out for their thermal stability, high transparency, mechanical strength and adsorption capacity, despite it is reduced compared to its crystalline parent MOF. Moreover, the development of MOF-glass composites further broadens their range of applications, enabling the controlled combination of crystalline and amorphous phases. Structural, thermal and spectroscopic characterisation is essential to understanding their behaviour and to guiding the design of new functional materials for applications in energy, catalysis, gas separation and optoelectronic devices.

Introducción

Las redes metal-orgánicas, conocidas como MOFs por sus siglas en inglés (*metal-organic frameworks*), han revolucionado la ciencia de materiales gracias a su gran versatilidad. Tradicionalmente, estos compuestos forman estructuras cristalinas altamente porosas. Los MOFs se obtienen mediante autoensamblaje, a través de enlaces de coordinación entre ligandos orgánicos y cationes metálicos u oxo-clústeres. Generalmente, los ligandos contienen grupos carboxilato y presentan cierta rigidez estructural.^[1]

Gracias al control que se puede ejercer mediante la elección específica de metales y ligandos, los MOFs han demostrado ser muy prometedores en diversas aplicaciones, como el almacenamiento de gases, la captura de contaminantes, la catálisis heterogénea o la liberación controlada de fármacos. No obstante, en los últimos años se ha observado que estas estructuras, tradicionalmente rígidas y ordenadas, pueden presentar distintos grados de desorden y complejidad.^[2]

Este desorden no solo plantea desafíos desde el punto de vista estructural, sino que también ofrece nuevas oportunidades para modular sus propiedades y ampliar sus aplicaciones. Así, se abre la puerta a materiales más funcionales y adaptables.^[3]

Aunque los MOFs han sido ampliamente estudiados en su forma cristalina, recientemente los investigadores han explorado una nueva faceta: su capacidad para formar vidrios y compuestos híbridos con materiales vítreos.^[4] Esto ha dado lugar a una nueva clase de materiales con propiedades novedosas y aplicaciones emergentes.

El desorden en los MOFs ha sido objeto de estudio durante años, ya que influye notablemente en sus propiedades. La mayoría de los MOFs obtenidos como polvos microcristalinos presentan defectos estructurales. Cuando este desorden se lleva al extremo, llegando a formar materiales sin orden a largo alcance, se obtiene lo que se conoce como MOFs amorfos.^[5] Estos MOFs amorfos han despertado un creciente interés debido a su utilidad en aplicaciones como la liberación controlada de fármacos o la catálisis.^[6]

El grado de desorden y complejidad en este tipo de materiales puede lograrse mediante distintas metodologías, como tratamientos térmicos, aplicación de presión, uso de molino de bolas o síntesis directa, entre otros procedimientos.^[7] Sin embargo, la mayoría de estos métodos consiguen exclusivamente el colapso de la estructura cristalina.

Dentro de los MOFs amorfos, los denominados vidrios de MOF han surgido como una nueva familia de materiales que ha abierto una rama innovadora tanto en la química reticular como en el estudio de los MOFs. Estos materiales han despertado un gran interés dentro de los MOFs amorfos, al ser capaces de formar composites como membranas sin bordes de grano empleados en la separación de gases,^[6] también se han usado para estabilizar fases inestables al aire o a la temperatura o para mejorar la adhesión y compatibilidad de electrolitos sólidos o composites poliméricos.^[9-12]

Vidrios de redes metal-orgánicas: una nueva clase de vidrios

Un vidrio suele definirse como un líquido congelado, ya que se trata de una fase amorfa, es decir, sin orden estructural a largo alcance ni cristalinidad. Sin embargo, no todos los MOFs amorfos son vidrios. Estos se diferencian de otros materiales amorfos en que el vidrio, de forma general, ha pasado previamente por un estado líquido y muestra una transición vítrea reversible bien definida al aumentar la temperatura, donde el sólido pasa a un estado más blando y viscoso, conocido como estado viscoelástico, sin llegar a fundirse.

Al igual que los líquidos, los vidrios, carecen de límites de grano, lo que les confiere excelentes propiedades mecánicas. Además, presentan cierta movilidad atómica y son considerados como una fase metaestable. Otra característica destacada de los vidrios es su alta transparencia, lo que les otorga propiedades ópticas muy interesantes.^[13]

Gracias a estas características, los vidrios han sido ampliamente estudiados y se utilizan cotidianamente en diversos ámbitos de nuestra sociedad. Sin embargo, investigaciones recientes han demostrado que las redes metal-orgánicas también pueden formar vidrios mediante procesos térmicos controlados. Esto ha dado lugar a un nuevo tipo de material: los vidrios híbridos, distintos de los vidrios clásicos, ya sean orgánicos (poliméricos), inorgánicos o metálicos.

Estos nuevos vidrios híbridos han demostrado que, a pesar de perder la cristalinidad (orden a largo alcance), conservan su funcionalidad química y retienen parcialmente la porosidad de su homólogo cristalino.^[14] Además, presentan mejores propiedades mecánicas,^[15] lo que los convierte en materiales muy prometedores para aplicaciones industriales.

Formación de un MOF vítreo

Para obtener un vidrio a partir de un MOF, normalmente se somete el material cristalino a altas temperaturas (generalmente superiores a 300–400 °C) en presencia de un gas protector. Este tratamiento térmico provoca la fusión parcial o total de su estructura. Luego, mediante un enfriamiento rápido —por ejemplo, con un chorro de aire o inmersión en un medio refrigerante— se evita la reordenación en una estructura cristalina, lo que da lugar a un material amorfo (Figura 1.a).^[16] Hay que puntualizar que no todos los procedimientos térmicos o amorfización, ya sea por aplicación de presión o por molino de bolas, no conduce a la formación de un vidrio, aunque si lleve al colapso de su estructura cristalina.^[17]

Aunque este procedimiento es relativamente sencillo, presenta importantes limitaciones, ya que la mayoría de los MOFs se descomponen al superar los 350 °C, formando óxidos, carbones u otros materiales derivados.^[18] Sin embargo, algunos MOFs pueden fundirse sin descomponerse, conservando tanto su fórmula química como la integridad estructural de sus ligandos.

Entre los MOFs capaces de fundirse, destacan las estructuras zeolíticas basadas en imidazolatos, conocidas como ZIFs

(por sus siglas en inglés, *zeolitic imidazolate frameworks*). Estos materiales se construyen a partir de ligandos imidazolato coordinados a cationes divalentes, generalmente de metales de transición como el zinc o el cobalto. Algunos ZIFs han demostrado ser capaces de fundirse y formar vidrios al enfriarse. En particular, destacan aquellos con topología *cag*, que describe la forma en que se conectan los centros metálicos con los ligandos orgánicos en la red.

Un ejemplo representativo es el ZIF-62, $[Zn(im)_{1-x}(bim)_x]$ (con $0 < x < 0.35$; im^- = imidazolato, bim^- = benzimidazolato).^[19] Este MOF, que contiene una proporción variable de benzimidazolato, se convierte en un vidrio con relativa porosidad estable cuando se calienta a aproximadamente 420 °C en una atmósfera de argón o nitrógeno y se enfría rápidamente. El ZIF-62 ha sido ampliamente estudiado por su capacidad de conservar una fracción significativa de porosidad tras el proceso de vitrificación, aunque mucho más reducida que su homólogo cristalino. Esta misma topología ha sido explorada con otros ligandos en lugar del benzimidazolato, como purinato,^[20] benzimidazolatos con diferentes grupos funcionales u otros derivados del imidazolato.^[21-24]

Otros MOFs con capacidad de formar vidrios incluyen el ZIF-4 ($[Zn(im)_2]$) (Figura 1.b,c), TIF-4 y el ZIF-76. Además, se ha demostrado que también es posible preparar vidrios con metales distintos al zinc, como con cobalto,^[25] con hierro,^[26] con manganeso,^[27] o con cadmio,^[28] así como con composiciones multimetálicas.^[29] La selección del metal y el ligando permite ajustar tanto la temperatura de fusión como la temperatura de transición vítrea del material a preparar, lo que permite el diseño de estos materiales a la carta.^[19]

Aunque la mayoría de los vidrios de MOFs se han obtenido mediante fusión y posterior enfriamiento, existen otras metodologías. Una de ellas es la formación por estímulo mecánico, comúnmente mediante el uso de molinos de bolas.^[30] Esta técnica presenta ventajas como menor consumo de disolventes y energía, y mayor velocidad de síntesis.^[31] Sin embargo, este tipo de vidrios suelen tener peor estabilidad en aire y comúnmente recrystalizan.^[32] No obstante, los vidrios obtenidos así tienden a ser menos estables al aire y suelen recrystalizar. Además, re-

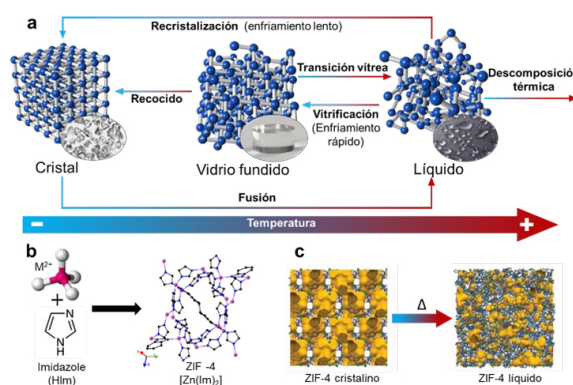


Figura 1. a. Esquema de los procesos térmicos relativos al fundido de los materiales. Reproducido de Ref. [18], Copyright con permiso de *Royal Society of Chemistry*. b. Esquema de la formación de un ZIF con topología *cag*, como el ZIF-4. Los átomos han sido representados de diferentes colores (nitrógeno en azul, carbono en negro y zinc en rosa) mientras que los átomos de hidrógeno se han omitido para facilitar el entendimiento de la estructura. c. Esquema de la estructura cristalina del ZIF-4 y que, al aplicar un tratamiento térmico, se ha fundido produciendo la estructura del líquido. Reproducido de Ref. [34], Copyright con permiso de *Nature*.

quieren un tratamiento térmico adicional para obtener piezas mecanizables.^[33]

Otra estrategia es la síntesis directa del vidrio, que evita la necesidad de preparar previamente un precursor cristalino. Este método reduce significativamente el consumo energético, pero al generar materiales amorfos con transición vítrea, requiere una caracterización estructural detallada y simulaciones para determinar su composición y estructura exactas.^[35] Esta metodología sería equivalente a la síntesis sol-gel convencional que se emplea para preparar vidrios de sílice.^[36]

Recientemente, también se ha observado la formación de fases vítreas en MOFs mediante la descoordinación de moléculas de agua en el entorno del metal dentro del MOF cristalino.^[37] En general la descoordinación de moléculas de agua de MOFs cristalino puede inducir a la formación de fases amorfas.^[38] Este método ha permitido por primera vez la formación de vidrios de MOFs que contienen ligandos carboxilato.^[39]

Propiedades y ventajas de un MOF vítreo

Los vidrios de MOFs combinan las ventajas estructurales de los materiales amorfos con las propiedades funcionales de los MOFs cristalinos, lo que les confiere una serie de características únicas.

En primer lugar, los vidrios de MOF presentan una mayor estabilidad mecánica (Figura 2.a) al no poseer bordes de grano en comparación con los MOFs cristalinos, lo que facilita mucho su conformado para obtener piezas con tamaños deseables. En general, se sabe que en los vidrios de óxidos (como el vidrio común), la estructura alrededor de los iones metálicos es parecida a la del material cristalino. Sin embargo, en el caso del vidrio de ZIF-4, la estructura de coordinación alrededor del ion Zn^{2+} es mucho más distorsionada que en su forma cristalina. Esto se ha comprobado mediante estudios de RMN de estado sólido con ^{67}Zn , que muestran que la coordinación química cambia respecto a la estructura original. Esta estructura única también influye en el comportamiento mecánico especial de los vidrios basados en ZIF. Por ejemplo, el vidrio de ZIF-62 no sigue el comportamiento típico de otros materiales en la transición de frágil a dúctil.

También se han hecho estudios de dinámica molecular para entender mejor estos vidrios. Estas simulaciones muestran que tanto la naturaleza química del ligando imidazolato como la topología de la red influyen en propiedades clave del vidrio: su estructura, coordinación promedio y espacio poroso.

Por ejemplo, los vidrios de ZIF-4 tienen un módulo de compresibilidad (rigidez frente a la compresión) mayor que su forma cristalina, y también son más densos.^[40] Se ha demostrado que para predecir correctamente las propiedades físicas de estos vidrios, es muy importante usar modelos que reflejen con precisión su densidad. Además, debido a la relativamente baja temperatura de fusión y transición vítrea que poseen, comparado con los vidrios obtenidos de materiales inorgánicos, se requiere una menor energía para su formación.

Los vidrios de MOFs, al igual que ocurre con los vidrios de materiales inorgánicos, poseen alta transparencia, lo que hace que estos materiales tengan excelentes propiedades ópticas. Estos materiales suelen obtenerse como monolitos o pastillas de 13 mm de diámetro preparados aplicando presión a alta temperatura para evitar la formación de burbujas. En este caso, muchos de estos materiales son capaces de tener una transparencia superior al 80% en la región de $500\text{-}1600\text{ cm}^{-1}$ con un grosor de 0.44 mm, lo que da una respuesta óptica en la macroescala, lo que es complicado de obtener con cristales.^[41] Los valores de índice de refracción de estos materiales puede

modularse ajustando el ratio de los ligandos empleados y suele estar por encima del valor de los polímeros orgánicos vítreos.^[42]

Estos vidrios, reducen su porosidad durante la fusión del material cristalino, dado que la estructura se colapsa parcialmente (Figura 2.b).^[43] No obstante, esta reducción parcial de la porosidad, puede aumentarse modificando ligeramente el procedimiento de la preparación del vidrio. Por ejemplo, puede aumentarse ligeramente su capacidad de adsorción a través de la preparación de espumas del vidrio usando un material que va a descomponerse *in situ*, como un polímero.^[44] Además este tipo de materiales pueden emplearse para la separación de diferentes mezclas de gases, como dióxido de carbono y metano.

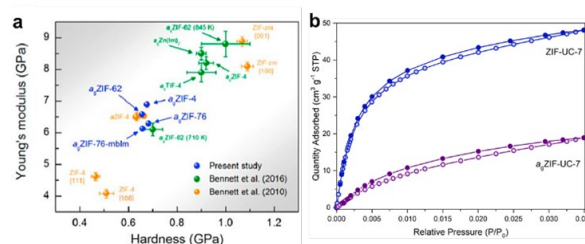


Figura 2. a. Correlación entre el módulo de Young y dureza para vidrios de MOFs. Múltiples estudios son comparados en este gráfico. Reproducido de Ref. [40] Copyright con permiso de American Chemical Society. b. Comparación entre dos isotermas de dióxido de carbono de un ZIF cristalino y su versión vítrea. Reproducido de Ref.[20] Copyright con permiso de Royal Society of Chemistry.

Composites de vidrios de MOF

Debido a las prometedoras propiedades de los vidrios de MOF, los composites usando vidrios de MOFs como matriz han experimentado un gran auge en los últimos años.^[45] Estos composites vidrio-MOF combinan vidrios de MOFs con otros materiales, generando materiales híbridos que aprovechan la robustez del vidrio y la funcionalidad porosa de los MOFs. Estos materiales se han convertido en una de las áreas más prometedoras de la ciencia de los materiales debido a su alta estabilidad química y mecánica, junto con propiedades ajustables.

Según cómo se combinen, los composites de vidrios de MOF pueden clasificarse en tres grandes grupos: (i) el vidrio de MOF se comporta como una matriz que aloja a otros materiales, que también pueden ser MOFs; (ii) el vidrio se dispersa dentro otras matrices, como polímeros; (iii) el vidrio de MOF se usa como recubrimiento sobre superficies sólidas. Esta flexibilidad estructural ha permitido explorar nuevas funciones en campos como la electrónica, la energía o la separación de gases.

La estrategia sintética en prácticamente todos los casos consiste en formar una mezcla física usando molino de bolas para mezclar los dos componentes del composite, seguido de la formación de una pastilla que se va a someter a un tratamiento térmico a cierta temperatura que estará optimizada para producir la fusión del material vítreo pero evitando la descomposición del otro material.

Una de las estrategias más comunes consiste en combinar distintos MOFs capaces de fundir para formar un solo vidrio. En estos compuestos, las propiedades de ambos MOFs se mezclan de forma controlada, pudiendo ajustar características como la temperatura de transición vítrea en función de la proporción utilizada. Este tipo de mezcla, además, conserva ciertos rasgos estructurales de las fases originales, lo que sugiere que las pro-

propiedades resultantes dependen de la interacción entre dominios interconectados a nivel microscópico.

En los casos en los que un MOF no se puede fundir directamente porque se descompone antes de alcanzar su punto de fusión, se recurre a una técnica conocida como fusión asistida por flujo (*flux melting*). En este proceso, se utiliza un MOF fundible como medio para ayudar al otro a alcanzar el estado líquido sin descomponerse. Al enfriar la mezcla, se obtiene un vidrio en el que los distintos componentes se han mezclado de forma más intensa, con una mayor difusión entre las fases. Esto permite obtener materiales más homogéneos y con propiedades mejoradas, como una mayor porosidad útil para la captura de gases como el hidrógeno.

Otra modalidad es la creación de compuestos híbridos en los que coexisten una fase vítrea y otra cristalina. Estos se conocen como compuestos cristal-vidrio. En este caso, el vidrio MOF actúa como matriz que alberga cristales de otro MOF, los cuales conservan su estructura original durante el proceso de fusión y enfriamiento. Esta coexistencia permite estabilizar fases cristalinas que normalmente serían inestables en condiciones ambientales, como sucede con el MOF MIL-53 (Figura 3.b-d). Al mantenerse en su fase porosa, incluso a temperatura ambiente, se mejora de forma considerable la capacidad del material para adsorber gases. La interacción entre ambas fases, aunque físicamente distintas, juega un papel crucial en las propiedades finales del compuesto.

El potencial de los vidrios MOF no se limita a combinarse con otros MOFs. También se han fabricado compuestos híbridos uniendo vidrios MOF con materiales no-MOF, como perovskitas, vidrios inorgánicos o polímeros. Las perovskitas de haluro de plomo como el CsPbI₃, por ejemplo, son materiales semiconductores muy prometedores, pero también extremadamente inestables frente al calor, la humedad o la exposición a la luz. Al encapsularlas en un vidrio MOF, no solo se estabiliza su estructura funcional, sino que también se protegen frente a estos factores ambientales. Además, el contacto entre ambas fases permite corregir defectos superficiales en las perovskitas, lo que mejora significativamente su eficiencia en aplicaciones como células solares o LEDs.^[9] La combinación de vidrios MOF con vidrios inorgánicos es otro campo emergente.^[47] Aunque a simple vista pueda parecer que estos materiales tienen poco en común, lo cierto es que pueden unirse eficazmente cuando sus temperaturas de fusión o transición vítrea son similares. En este tipo de compuestos, los enlaces químicos que se forman en la interfaz entre ambos materiales refuerzan la estructura y mejoran sus propiedades mecánicas. En particular, se ha observado que grupos fosfato del vidrio inorgánico pueden interactuar con componentes del MOF fundido, creando enlaces cruzados que aumentan la cohesión del material final.^[48]

Además de actuar como matriz base, el vidrio MOF puede utilizarse como material de refuerzo dentro de otro soporte, como los polímeros. Este enfoque ha dado lugar a membranas mixtas con aplicaciones en separación de gases o como electrolitos en baterías. Una ventaja importante de los vidrios MOF es que, al fundirse, pueden adaptarse a la estructura del polímero y formar enlaces que reducen los defectos comunes en este tipo de membranas. Esto se ha demostrado, por ejemplo, al vitrificar MOFs dentro de polímeros como el 6FDA-DAM, logrando una reducción drástica en los espacios vacíos entre fases y mejorando el rendimiento del material.^[49] En otros casos, se ha incorporado vidrio MOF a polímeros para fabricar electrolitos sólidos con alta conductividad iónica, incluso con concentraciones muy bajas del material activo.^[50]

Por último, los MOFs vítreos también han demostrado ser útil como recubrimiento sobre superficies sólidas, superando así

una de las limitaciones más importantes de los MOFs cristalinos, que es su dificultad para procesarse en forma de películas. Al fundir un MOF sobre un sustrato y enfriarlo de forma controlada, se puede obtener una película continua y sin defectos.^[51] Esta técnica es especialmente útil en dispositivos como sensores, electrodos o membranas selectivas, ya que permite una integración directa del MOF en estructuras funcionales. En algunos casos, incluso se ha logrado depositar vidrio MOF sobre fibras de carbono para mejorar el contacto con los electrodos en baterías de estado sólido, lo que facilita el transporte de protones y mejora la eficiencia del dispositivo.^[52]

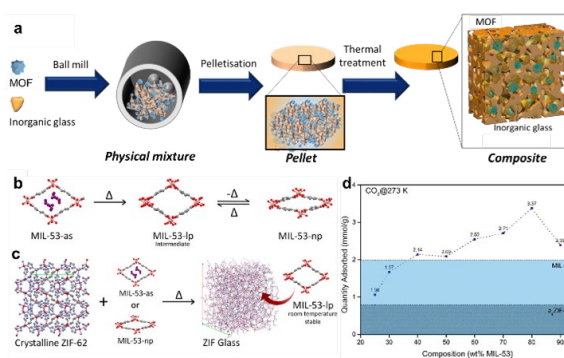


Figura 3. a. Esquema de preparación de un composite que combine un vidrio con MOF. Reproducido de Ref. [46], Copyright con permiso de American Chemical Society. b. Diagrama del proceso de desactivación del MOF MIL-53 y sus transiciones de fase que se producen con temperatura. c. Esquema del composite fabricado combinando MIL-53 y ZIF-62 cristalino que al aplicar un tratamiento térmico se genera el vidrio del ZIF-62 y embebe la fase con poro más grande manteniéndola estable en el tiempo. d. Comparación de la cantidad adsorbida de CO₂ del composite que contiene diferentes cantidades de MIL-53 y ZIF-62. Los átomos han sido representados con diferentes colores (rojo (oxígeno), gris (carbono) y aluminio (naranja)). Reproducido de Ref. [10], Copyright con permiso de American Chemical Society.

Caracterización de estos materiales

La caracterización térmica, estructural y química de estos materiales es fundamental para predecir sus propiedades físicas y químicas. Entre ellas destacan especialmente las propiedades mecánicas y ópticas, sobre todo al comparar estos vidrios con los MOFs es estado cristalino, que suelen obtenerse como polvos microcristalinos.

Para estudiar la estabilidad térmica y confirmar la naturaleza vítrea de estos materiales, se emplean técnicas como el análisis termogravimétrico (TGA) y, especialmente, la calorimetría de barrido (DSC, por sus siglas en inglés: *Differential Scanning Calorimetry*). Esta última permite observar el proceso de fusión e identificar la temperatura de fusión (T_m) y la temperatura de transición vítrea (T_g) (Figura 4.a). La T_g se define como el punto en el que el material pasa de un estado vítreo rígido a un estado más fluido sin llegar a fundirse.^[53]

Por su parte, la TGA permite determinar la temperatura de descomposición, es decir, la máxima temperatura a la que el material se mantiene estable térmicamente. Además, la caracterización reológica resulta de especial interés, ya que permite medir la viscosidad del líquido fundido, lo cual es clave para entender su comportamiento durante el procesado.^[16]

Desde el punto de vista estructural, es esencial utilizar técnicas difractométricas como la difracción de rayos X en polvo (*powder X-ray diffraction* de sus siglas en inglés PXRD) para confirmar la pérdida de orden cristalino tras la fusión. Esta técnica

es especialmente útil en composites, donde se incorporan fases cristalinas, ya que permite comprobar si esas fases conservan su estructura original tras el calentamiento. Cuando el material es amorfo, los picos característicos de difracción de Bragg desaparecen, y el patrón muestra un fondo difuso, típico en los materiales vítreos y amorfos.^[20] Además, la dispersión total de rayos X es una herramienta clave para estudiar materiales con alto grado de desorden, como los vidrios. A través de métodos matemáticos conocidos de los datos de dispersión total de rayos X se puede obtener una función conocida como función de distribución de pares (*Pair distribution function* o PDF en inglés) que da información estructural en el espacio real (Figura 4. b). Esta función describe la probabilidad de encontrar un par de átomos separados por una cierta distancia en un material. De manera que a pesar que los vidrios no tengan cristalinidad (orden a largo alcance), poseen orden a corto alcance (hasta 8 Å aproximadamente). Por lo tanto, su uso es clave en el análisis estructural.^[54]

En el caso de los composites, esta función también permite identificar las distancias características de cada componente, confirmando su coexistencia en la matriz vítreo. Incluso se ha logrado estudiar la interfase entre los dos materiales, obteniendo información sobre las distancias de enlace en esa zona.^[55,56]

Para estudiar la estructura interna de vidrios y materiales compuestos, se utiliza la espectroscopia de absorción de rayos X (XAS de sus siglas en inglés *X-ray Adsorption Spectroscopy*), una técnica que permite observar qué ocurre a nivel atómico. Esta técnica es especialmente útil porque puede enfocarse en un átomo específico del material. En el caso de los vidrios basados en MOFs y sus composites, el análisis suele centrarse en el átomo metálico que forma parte del material. A partir de la XAS se obtienen dos tipos de información complementaria: XANES y EXAFS. La espectroscopia XANES (*X-ray Absorption Near Edge Structure*) analiza la región cercana al borde de absorción de los rayos X y proporciona información sobre el estado de oxidación del átomo metálico, la geometría de su entorno y su estructura electrónica local. Por otro lado, la espectroscopia EXAFS (*Extended X-ray Absorption Fine Structure*) estudia una región más amplia del espectro y permite conocer las distancias entre el átomo analizado y los átomos que lo rodean, así como identificar qué tipo de átomos forman parte de su entorno cercano.

De esta manera, ambas técnicas se complementan para ofrecer una visión detallada de cómo está organizado el átomo metálico dentro del vidrio o composite, tanto desde el punto de vista químico como estructural.

La resonancia magnética nuclear en estado sólido, aplicada a núcleos como el ⁶⁷Zn, también se ha utilizado para estudiar la estructura y el mecanismo de fusión de estos materiales en experimentos in situ con temperatura. Del mismo modo, la espectroscopia de infrarrojo lejano (*Far-IR*), que cubre el rango de 50 a 600 cm⁻¹, permite observar las vibraciones entre el metal y el ligando. Esta técnica resulta muy útil para detectar la descoordinación del ligando durante la fusión, una etapa clave en la formación del vidrio.

Las propiedades mecánicas y ópticas de estos materiales son también de sumo interés ya que estos vidrios no poseen bordes de grano, al contrario que los MOFs cristalinos, lo que les confiere propiedades únicas. Dentro de la caracterización mecánica se suelen hacer experimentos de nanoindentación, para obtener el módulo de Young que mide la resistencia a la deformación plástica, y de estabilidad mecánica por compresión uniaxial. La caracterización óptica de estos materiales suele constar de la medición de la transparencia a través de la transmitancia, que es crítico para aplicaciones como ventanas

inteligentes. También es importante la medición del índice de refracción para aplicaciones ópticas y fotónicas a través de elipsometría espectroscópica y refractometría en película delgada. Otra caracterización importante es la determinación del coeficiente de absorción y la energía de band prohibida (conocida en inglés como *band gap*) mediante el método de Tauc.

Dado que los MOF vítreos conservan cierta porosidad, es fundamental estudiar su textura y capacidad de adsorción. Para ello, se utilizan técnicas como la adsorción de gases, especialmente con metano, dióxido de carbono e hidrocarburos de cadena corta, lo que permite evaluar su potencial en separación de gases y almacenamiento.

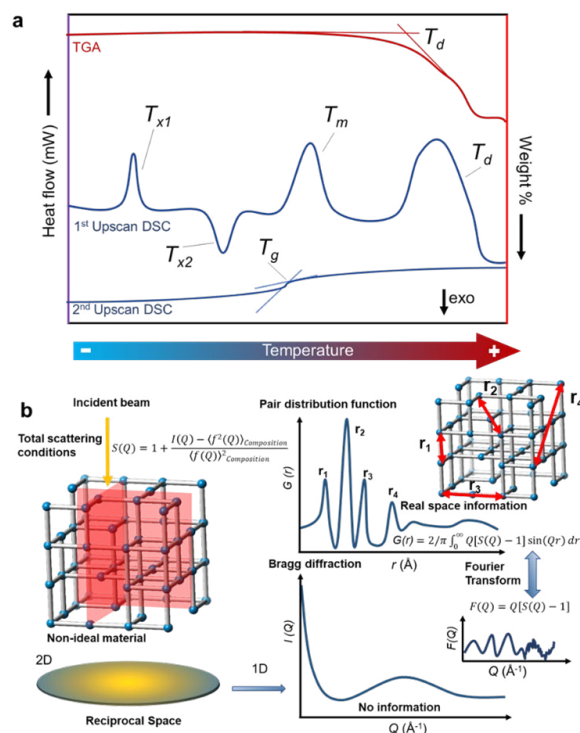


Figura 4. a. Ejemplo de un DSC (flujo de calor vs. temperatura) y análisis termogravimétrico de un MOF cristalino fundible. La TGA se muestra como una línea roja que indica una pérdida de peso al calentar, lo que señala la temperatura de descomposición (T_d). Las primeras y segundas rampas de calentamiento (upscans) del DSC se representan en la gráfica como curvas azules. La primera rampa muestra múltiples procesos durante el calentamiento. Primero, una recristalización endotérmica (transición de fase estructural), denotada como T_{x1} . La segunda señal muestra una transición de fase exotérmica (T_{x2}). También aparecen procesos de fusión y descomposición como señales endotérmicas. En la segunda rampa de DSC aparece una T_g (temperatura de transición vítreo) del MOF cristalino, después de que el material se fundiera y formara una fase vítreo durante el calentamiento en la primera rampa. Reproducido de Ref. [18], Copyright con permiso de *Royal Chemical Society*. b. Esquema que muestra cómo se extrae los datos de dispersión total de rayos X y se extrae la *Pair Distribution Function*.

Conclusiones

Los vidrios de MOFs y los composites vidrio-MOF representan un campo emergente con un gran potencial en la ciencia de los materiales. Al combinar la versatilidad química de los MOFs con la estabilidad de los vidrios, estos materiales están revolucionando aplicaciones en filtración de gases, almacenamiento de energía, sensores y dispositivos electrónicos. A diferencia de

sus homólogos cristalinos, estos vidrios presentan una estructura amorfa que conserva muchas de las propiedades químicas de partida, a la vez que aporta ventajas adicionales como mayor estabilidad mecánica, ausencia de bordes de grano y alta transparencia.

Su obtención mediante procesos térmicos controlados, así como el desarrollo de métodos alternativos como la molienda mecánica o la síntesis directa, ha permitido explorar una gran diversidad de composiciones y estructuras. Estas metodologías han dado lugar a materiales con propiedades modulables y útiles en campos como la catálisis, la separación de gases o la optoelectrónica.

Además, los composites vidrio-MOF amplían aún más su potencial, al permitir combinar fases amorfas con materiales cristalinos, polímeros o incluso semiconductores inestables como las perovskitas, creando sistemas híbridos con propiedades únicas y mayor procesabilidad.

La caracterización térmica, estructural y espectroscópica ha sido clave para comprender el comportamiento de estos materiales y orientar su desarrollo hacia aplicaciones reales. En definitiva, los vidrios de MOFs suponen un avance prometedor en la química de materiales, y a medida que la investigación en esta área avanza, es probable que veamos un mayor número de aplicaciones industriales y tecnológicas derivadas de estos materiales híbridos, consolidando su papel en la próxima generación de materiales avanzados.

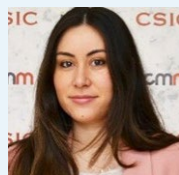
Agradecimientos

La autora agradece la financiación recibida a la Comunidad de Madrid por la ayuda 2024-T1/TEC-31450. Igualmente agradece a los profesores T.D. Bennett y D.A. Keen por su ayuda y mentoría durante los últimos cuatro años.

Bibliografía

- [1] H. Furukawa, K. E. Cordova, M. O'Keeffe, O. M. Yaghi, *Science*. **2013**, *314*, 1230444, <https://doi.org/10.1126/science.1230444>.
- [2] C. Castillo-Blas, V. A. de la Peña-O'Shea, I. Puente-Orench, J. Romerode Paz, R. Sáez-Puche, E. Gutiérrez-Puebla, F. Gándara, Á. Monge, *Sci. Adv.* **2017**, *3*, e1700773, <https://doi.org/10.1126/sciadv.1700773>.
- [3] A. K. Cheetham, T. D. Bennett, F.-X. Coudert, A. L. Goodwin, *Dalt. Trans.* **2016**, *45*, 4113-4126, <https://doi.org/10.1039/C5DT04392A>.
- [4] T. D. Bennett, S. Horike, *Nat. Rev. Mater.* **2018**, *3*, 431-440, <https://doi.org/10.1038/s41578-018-0054-3>.
- [5] T. D. Bennett, A. K. Cheetham, *Acc. Chem. Res.* **2014**, *47*, 1555-1562, <https://doi.org/10.1021/ar5000314>.
- [6] C. Orellana-Tavra, E. F. Baxter, T. Tian, T. D. Bennett, N. K. H. Slater, A. K. Cheetham, D. Fairen-Jimenez, *Chem. Commun.* **2015**, *51*, 13878-13881, <https://doi.org/10.1039/C5CC05237H>.
- [7] E. V. Shaw, A. M. Chester, G. P. Robertson, C. Castillo-Blas, T. D. Bennett, *Chem. Sci.* **2024**, *15*, 10689-10712, <https://doi.org/10.1039/D4SC01433B>.
- [8] Y. Wang, H. Jin, Q. Ma, K. Mo, H. Mao, A. Feldhoff, X. Cao, Y. Li, F. Pan, Z. Jiang, *Angew. Chemie* **2020**, *132*, 4395-4399, <https://doi.org/10.1002/ange.201915807>.
- [9] J. Hou, P. Chen, A. Shukla, A. Krajnc, T. Wang, X. Li, R. Doasa, L. H. G. Tizei, B. Chan, D. N. Johnstone, R. Lin, T. U. Schüllli, I. Martens, D. Appadoo, M. S. Ari, Z. Wang, T. Wei, S.-C. Lo, M. Lu, S. Li, E. B. Namdas, G. Mali, A. K. Cheetham, S. M. Collins, V. Chen, L. Wang, T. D. Bennett, *Science* (80-). **2021**, *374*, 621-625, <https://doi.org/10.1126/science.abf4460>.
- [10] C. W. Ashling, D. N. Johnstone, R. N. Widmer, J. Hou, S. M. Collins, A. F. Sapnik, A. M. Bumstead, P. A. Midgley, P. A. Chater, D. A. Keen, T. D. Bennett, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 15641-15648, <https://doi.org/10.1021/jacs.9b07557>.
- [11] V. Gascón, M. B. Jiménez, R. M. Blanco, M. Sanchez-Sanchez, *Catal. Today* **2018**, *304*, 119-126, <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2017.10.022>.
- [12] R. Lin, X. Li, A. Krajnc, Z. Li, M. Li, W. Wang, L. Zhuang, S. Smart, Z. Zhu, D. Appadoo, J. R. Harmer, Z. Wang, A. G. Buzanich, S. Beyer, L. Wang, G. Mali, T. D. Bennett, V. Chen, J. Hou, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2022**, *61*, e202112880, <https://doi.org/10.1002/anie.202112880>.
- [13] C. A. Angell, *Science* (80-). **1995**, *267*, 1924-1935, <https://doi.org/10.1126/science.267.5206.1924>.
- [14] T. D. Bennett, Y. Yue, P. Li, A. Qiao, H. Tao, N. G. Greaves, T. Richards, G. I. Lampronti, S. A. T. Redfern, F. Blanc, O. K. Farha, J. T. Hupp, A. K. Cheetham, D. A. Keen, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 3484-3492, <https://doi.org/10.1021/jacs.5b13220>.
- [15] S. Malwina, J. Kacper, Z. Chao, Q. Ang, S. M. M., Y. Yuanzheng, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **2020**, *117*, 10149-10154, <https://doi.org/10.1073/pnas.2000916117>.
- [16] N. Ma, S. Horike, *Chem. Rev.* **2022**, *122*, 4163-4203, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00826>.
- [17] E. V. Shaw, C. Castillo-Blas, T. Lambden, B. de Santos, B. Turner, G. I. Lampronti, J. E. M. Laulainen, G. P. Robertson, A. M. Chester, C. Ye, S. Guan, J. K. G. Karlsson, V. Martinez, I. Brekalo, B. Karadeniz, S. Cabrera, L. N. McHugh, K. Užarevič, J. Alemán, A. Fraile, R. C. Evans, P. A. Midgley, D. A. Keen, X. Moya, T. D. Bennett, *Chem. Commun.* **2025**, *61*, 5019-5022, <https://doi.org/10.1039/D4CC06320A>.
- [18] C. Castillo-Blas, A. M. Chester, D. A. Keen, T. D. Bennett, *Chem. Soc. Rev.* **2024**, *53*, 3606-3629, <https://doi.org/10.1039/D3CS01105D>.
- [19] L. Frenzel-Beyme, M. Kloß, P. Kolodzeiski, R. Pallach, S. Henke, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 12362-12371, <https://doi.org/10.1021/jacs.9b05558>.
- [20] A. M. Bumstead, C. Castillo-Blas, I. Pakamoré, M. F. Thorne, A. F. Sapnik, A. M. Chester, G. Robertson, D. J. M. Irving, P. A. Chater, D. A. Keen, R. S. Forgan, T. D. Bennett, *Chem. Commun.* **2023**, *59*, 732-735, <https://doi.org/10.1039/d2cc05314d>.
- [21] J. Hou, M. L. Ríos Gómez, A. Krajnc, A. McCaul, S. Li, A. M. Bumstead, A. F. Sapnik, Z. Deng, R. Lin, P. A. Chater, D. S. Keeble, D. A. Keen, D. Appadoo, B. Chan, V. Chen, G. Mali, T. D. Bennett, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 3880-3890, <https://doi.org/10.1021/jacs.9b11639>.
- [22] A. M. Bumstead, M. L. Ríos Gómez, M. F. Thorne, A. F. Sapnik, L. Longley, J. M. Tuffnell, D. S. Keeble, D. A. Keen, T. D. Bennett, *CrystEngComm* **2020**, *22*, 3627-3637, <https://doi.org/10.1039/d0ce00408a>.
- [23] A. M. Bumstead, I. Pakamoré, K. D. Richards, M. F. Thorne, S. S. Boyadjieva, C. Castillo-Blas, L. N. McHugh, A. F. Sapnik, D. S. Keeble, D. A. Keen, R. C. Evans, R. S. Forgan, T. D. Bennett, *Chem. Mater.* **2022**, *34*, 2187-2196, <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.1c03820>.
- [24] J. Song, L. Frenzel-Beyme, R. Pallach, P. Kolodzeiski, A. Koutsianos, W.-L. Xue, R. Schmid, S. Henke, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 9273-9284, <https://doi.org/10.1021/jacs.3c01933>.
- [25] L. Frenzel-Beyme, M. Kloß, R. Pallach, S. Salamon, H. Moldenhauer, J. Landers, H. Wende, J. Debus, S. Henke, *J. Mater. Chem. A* **2019**, *7*, 985-990, <https://doi.org/10.1039/c8ta08016j>.
- [26] L. León-Alcaide, R. S. Christensen, D. A. Keen, J. L. Jordá, I. Brotons-Alcázar, A. Forment-Aliaga, G. Mínguez Espallargas, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 11258-11264, <https://doi.org/10.1021/jacs.3c01455>.

- [27] L. León-Alcaide, A. Fernández-Alarcón, J. Calbo, D. A. Keen, G. Mínguez Espallargas, *Chem. Commun.* **2025**, 61, 11641–11644, <https://doi.org/10.1039/d5cc02342d>.
- [28] W.-L. Xue, A. Klein, M. El Kafri, J.-B. Weiß, F. Egger, H. Ding, S. K. Vasa, C. Liebscher, M. Zobel, R. Linser, J.-C. Tan, S. Henke, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, 147, 15625–15635, <https://doi.org/10.1021/jacs.5c02767>.
- [29] L. León-Alcaide, C. Castillo-Blas, V. Martin-Diaconescu, I. da Silva, D. A. Keen, T. D. Bennett, G. Mínguez Espallargas, *Chem. Sci.* **2025**, 16, 7946–7955, <https://doi.org/10.1039/d5sc00767d>.
- [30] M. F. Thorne, A. F. Sapnik, L. N. McHugh, A. M. Bumstead, C. Castillo-Blas, D. S. Keeble, M. Diaz Lopez, P. A. Chater, D. A. Keen, T. D. Bennett, *Chem. Commun.* **2021**, 57, 9272–9275, <https://doi.org/10.1039/d1cc03469c>.
- [31] M. F. Thorne, M. L. Rios Gomez, A. M. Bumstead, S. Li, T. D. Bennett, *Green Chem.* **2020**, 22, 2505–2512, <https://doi.org/10.1039/d0gc00546k>.
- [32] C. Ye, G. I. Lampronti, L. N. McHugh, C. Castillo-Blas, A. Kono, C. Chen, G. P. Robertson, L. A. V Nagle-Cocco, W. Xu, S. D. Stranks, V. Martinez, I. Brekalo, B. Karadeniz, K. Užarević, W. Xue, P. Kolodzeiski, C. Das, P. Chater, D. A. Keen, S. E. Dutton, T. D. Bennett, *Chem. Sci.* **2024**, 15, 7198–7205, <https://doi.org/10.1039/d4sc00905c>.
- [33] W.-L. Xue, C. Das, J.-B. Weiß, S. Henke, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2024**, 63, e202405307, <https://doi.org/10.1002/anie.202405307>.
- [34] R. Gaillac, P. Pullumbi, K. A. Beyer, K. W. Chapman, D. A. Keen, T. D. Bennett, F.-X. Coudert, *Nat. Mater.* **2017**, 16, 1149–1154, <https://doi.org/10.1038/nmat4998>.
- [35] T. Ogawa, K. Takahashi, S. S. Nagarkar, K. Ohara, Y. Hong, Y. Nishiyama, S. Horike, *Chem. Sci.* **2020**, 11, 5175–5181, <https://doi.org/10.1039/d0sc01737j>.
- [36] R. Ciriminna, A. Fidalgo, V. Pandarus, F. Bédard, L. M. Ilharco, M. Pagliaro, *Chem. Rev.* **2013**, 113, 6592–6620, <https://doi.org/10.1021/cr300399c>.
- [37] Z. Yin, Y. Zhao, S. Wan, J. Yang, Z. Shi, S.-X. Peng, M.-Z. Chen, T.-Y. Xie, T.-W. Zeng, O. Yamamuro, M. Nirei, H. Akiba, Y.-B. Zhang, H.-B. Yu, M.-H. Zeng, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, 144, 13021–13025, <https://doi.org/10.1021/jacs.2c04532>.
- [38] Y.-S. Wei, Z. Fan, C. Luo, S. Horike, *Nat. Synth.* **2024**, 3, 214–223, <https://doi.org/10.1038/s44160-023-00412-5>.
- [39] M.-Z. Chen, J. Li, S. Liao, Y.-H. Guo, T. Liu, R.-F. Ma, T.-Y. Xie, W.-D. Liu, S.-X. Peng, X. Kuang, Z. Yin, Y. Zhao, M.-H. Zeng, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2023**, 62, e202305942, <https://doi.org/10.1002/anie.202305942>.
- [40] S. Li, R. Limbach, L. Longley, A. A. Shirzadi, J. C. Walmsley, D. N. Johnstone, P. A. Midgley, L. Wondraczek, T. D. Bennett, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 1027–1034, <https://doi.org/10.1021/jacs.8b11357>.
- [41] A. Qiao, H. Tao, M. P. Carson, S. W. Aldrich, L. M. Thirion, T. D. Bennett, J. C. Mauro, Y. Yue, *Opt. Lett.* **2019**, 44, 1623–1625, <https://doi.org/10.1364/ol.44.001623>.
- [42] O. Smirnova, R. Sajzew, S. J. Finkelmeyer, T. Asadov, S. Chatopadhyay, T. Wieduwilt, A. Reupert, M. Presselt, A. Knebel, L. Wondraczek, *Nat. Commun.* **2024**, 15, 5079, <https://doi.org/10.1038/s41467-024-49428-1>.
- [43] O. Smirnova, S. Hwang, R. Sajzew, L. Ge, A. Reupert, V. Nozari, S. Savani, C. Chmelik, M. R. Reithofer, L. Wondraczek, J. Kärger, A. Knebel, *Nat. Mater.* **2024**, 23, 262–270, <https://doi.org/10.1038/s41563-023-01738-3>.
- [44] Z. Yang, Y. Belmabkhout, L. N. McHugh, D. Ao, Y. Sun, S. Li, Z. Qiao, T. D. Bennett, M. D. Guiver, C. Zhong, *Nat. Mater.* **2023**, 22, 888–894, <https://doi.org/10.1038/s41563-023-01545-w>.
- [45] R. Lin, M. Chai, Y. Zhou, V. Chen, T. D. Bennett, J. Hou, *Chem. Soc. Rev.* **2023**, 52, 4149–4172, <https://doi.org/10.1039/d2cs00315e>.
- [46] C. Castillo-Blas, A. M. Chester, R. P. Cosquer, A. F. Sapnik, L. Corti, R. Sajzew, B. Poletto-Rodrigues, G. P. Robertson, D. J. M. Irving, L. N. McHugh, L. Wondraczek, F. Blanc, D. A. Keen, T. D. Bennett, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, 145, 22913–22924, <https://doi.org/10.1021/jacs.3c04248>.
- [47] A. M. Chester, C. Castillo-Blas, L. Wondraczek, D. A. Keen, T. D. Bennett, *Chem. – A Eur. J.* **2022**, 28, e202200345, <https://doi.org/10.1002/chem.202200345>.
- [48] A. M. Chester, C. Castillo-Blas, R. Sajzew, B. P. Rodrigues, R. Mas-Balleste, A. Moya, J. E. Snelson, S. M. Collins, A. F. Sapnik, G. P. Robertson, D. J. M. Irving, L. Wondraczek, D. A. Keen, T. D. Bennett, *Chem. Sci.* **2023**, 14, 11737–11748, <https://doi.org/10.1039/d3sc02305b>.
- [49] R. Lin, J. Hou, M. Li, Z. Wang, L. Ge, S. Li, S. Smart, Z. Zhu, T. D. Bennett, V. Chen, *Chem. Commun.* **2020**, 56, 3609–3612, <https://doi.org/10.1039/d0cc00664e>.
- [50] G. Jiang, C. Qu, F. Xu, E. Zhang, Q. Lu, X. Cai, S. Hausdorf, H. Wang, S. Kaskel, *Adv. Funct. Mater.* **2021**, 31, 2104300, <https://doi.org/10.1002/adfm.202104300>.
- [51] S. Xie, X. Tan, Z. Xue, P. Geysens, H. Pan, W. Guo, Z. Zhou, X. Zhang, I. F. J. Vankelecom, J. Fransaer, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2024**, 63, e202401817, <https://doi.org/10.1002/anie.202401817>.
- [52] J. Zheng, J. Zhang, R. Ma, X. Li, Q. Zheng, Y. Zhang, *Mater. Lett.* **2026**, 407, 140091, <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2026.140091>.
- [53] H. J. Höhne, G. W. H.; Hemminger, W. F.; Flammersheim, *Differential Scanning Calorimetry*, Springer, **2003**, https://doi.org/10.1007/978-3-662-06710-9_6.
- [54] C. Castillo-Blas, J. M. Moreno, I. Romero-Muñiz, A. E. Plate-ro-Prats, *Nanoscale* **2020**, 12, 15577–15587, <https://doi.org/10.1039/d0nr01673j>.
- [55] C. Castillo-Blas, M. J. García, A. M. Chester, M. Mazaj, S. Guan, G. P. Robertson, A. Kono, J. M. A. Steele, L. León-Alcaide, B. Poletto-Rodrigues, P. A. Chater, S. Cabrera, A. Krajnc, L. Wondraczek, D. A. Keen, J. Alemán, T. D. Bennett, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2025**, 17, 15793–15803, <https://doi.org/10.1021/acami.4c18444>.
- [56] A. M. Chester, C. Castillo-Blas, R. Sajzew, B. P. Rodrigues, G. I. Lampronti, A. F. Sapnik, G. P. Robertson, M. Mazaj, D. J. M. Irving, L. Wondraczek, D. A. Keen, T. D. Bennett, *Dalt. Trans.* **2024**, 53, 10655–10665, <https://doi.org/10.1039/d4dt00894d>.



Celia Castillo Blas

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM-CSIC), Madrid, España

E: castillo@icmm.csic.es
ORCID: 0009-0000-0048-5077

Celia Castillo-Blas es investigadora “Atracción de Talento – César Nombela” en el ICMM-CSIC y una IP emergente con un perfil destacado en materiales porosos cristalinos y amorfos híbridos para aplicaciones energéticas y medioambientales. Doctora en Química por el ICMM-CSIC, recibió el Premio Xavier Solans (2018) y un accésit de tesis de la RSEQ (2020). Ha realizado estancias posdoctorales en la UAM y la Universidad de Cambridge. Su investigación combina la síntesis de materiales con técnicas avanzadas como radiación sincrotrón o neutrones. Cuenta con 34 publicaciones (índice $h = 16$) y fue galardonada con el premio de la RSEQ de Jóvenes Investigadores Modalidad Posdoctoral en 2024.

Investigadores menores de 35

Jorge Albalad



Posición: Investigador Ramón y Cajal

Entidad: Departament de Química, Facultat de Ciències, Universitat Autònoma de Barcelona. Catalan Institute of Nanoscience and Nanotechnology (ICN2), CSIC and The Barcelona Institute of Science and Technology, Campus UAB.

ORCID: 0000-0001-5850-6723

Formación: Grado en Química (UAB) / Máster en Química Industrial e Investigación (UAB) / Doctorado en Química (UAB/ICN2)

Líneas de Investigación: materiales reticulares, redes metalorgánicas (MOFs), redes orgánicas covalentes (COFs), modificación post-sintética, Química de Recorte (Clip-off Chemistry).

Aficiones: cocina, dibujo, lectura, videojuegos, gimnasio.

Perfil personal del investigador

Desarrollo metodologías sintéticas y post-sintéticas para materiales reticulares y porosos, con control estructural a escala atómica. Estas estrategias permiten acceder a nuevas arquitecturas moleculares y extendidas, más allá de lo que ofrecen los enfoques y técnicas de diseño convencionales.

Ciencia en lo cotidiano

Mi ejemplo favorito de química/ciencia en la vida diaria es la reacción de Maillard, que cambia el color, textura y sabor de los alimentos tras aplicarles calor de forma controlada.

La aplicación más importante de mi investigación será el diseño de nuevas metodologías sintéticas que permitan crear materiales funcionales previamente inaccesibles.

Mi momento favorito del día para pensar ciencia es durante el primer café del día, para empezar con las ideas ordenadas.

Un concepto que me obsesiona (en el buen sentido) es que los defectos en los materiales no son imperfecciones, sino que a menudo son los responsables de sus propiedades y aplicaciones más perfectas.

Cómo se hace la ciencia

Lo que más disfruto en el laboratorio es usar y manipular nitrógeno líquido. Por muchas veces que lo use, siempre pienso que es demasiado divertido para ser trabajo.

Una habilidad "invisible pero clave para investigar" es la capacidad de reinterpretar los resultados inesperados, y encontrar valor en los errores.

Lo que más valoro de mi grupo/equipo es su disposición a probar cosas nuevas. En lugar de responder con un "no", la reacción habitual es "¿cuándo empezamos?".

Estoy más orgulloso/a al ver crecer a los estudiantes. En poco tiempo pasan de necesitar ayuda constante a convertirse en profesionales independientes.

No puedo resistirme a un café más. Es en esos momentos cuando mi mente parece funcionar mejor.

Recargo energía con trasnochando. Largas noches sin alarmas, ruido, ni obligaciones.

Si no fuera científico sería Chef

Una frase que me guía es "No esperes, nunca va a ser el momento oportuno. Comienza en cualquier lugar, con los medios a tu disposición, y encontrarás el camino".

Una idea para llevarse a casa: "Si haces lo que siempre has hecho, obtendrás lo que siempre obtuviste. Los grandes logros comienzan fuera de tu zona de confort".

Presentación de su artículo

En las últimas décadas, los materiales reticulares como los MOFs y COFs han pasado de ser una curiosidad académica a ocupar un lugar central en la química de materiales. Sus propiedades más atractivas, como su elevada porosidad, son en realidad consecuencia directa de su rasgo más distintivo: la posibilidad de diseñar y construir sus estructuras con precisión a escala atómica y molecular. En este artículo, se reflexiona sobre por qué este campo ha merecido reconocimiento al más alto nivel y cómo el control sintético y post-sintético abre la puerta a materiales verdaderamente programables.

Materiales reticulares: cuando la química molecular se vuelve programable en el espacio

Reticular materials: when molecular chemistry becomes programmable in space

Jorge Albalad

Departament de Química, Facultat de Ciències, Universitat Autònoma de Barcelona. Catalan Institute of Nanoscience and Nanotechnology (ICN2), CSIC and The Barcelona Institute of Science and Technology, Campus UAB.

PALABRAS CLAVE:

Química reticular
Redes metalorgánicas
Redes orgánicas covalentes
Control sintético
Modificación post-sintética

RESUMEN:

La química reticular, representada principalmente por los MOFs y COFs, ha transformado la química de materiales al permitir el diseño de redes cristalinas con precisión atómica y molecular. Su naturaleza modular, junto con el control sintético y post-sintético de sus estructuras, convierte a estos materiales en plataformas altamente versátiles para ajustar de forma dirigida sus propiedades físicas y químicas. Este artículo de opinión presenta al lector una visión general de cómo estos avances han impulsado el paso desde materiales cuya estructura se observa hacia materiales cuya función puede diseñarse desde su síntesis.

KEYWORDS:

Reticular chemistry
Metal-Organic Frameworks (MOFs)
Covalent Organic Frameworks (COFs)
Synthetic control
Post-synthetic modification

ABSTRACT:

Reticular chemistry, mainly represented by MOFs and COFs, has transformed materials chemistry by enabling the design of crystalline frameworks with atomic and molecular precision. Their modular nature, together with the synthetic and post-synthetic control over their structures, makes these materials highly versatile platforms, with directed tuning over their physical and chemical properties. This opinion article provides an overview of how these advances have driven the transition from materials whose structure is merely observed to materials whose function can be designed from their synthesis.

Introducción

Durante décadas, la química de materiales avanzó bajo una premisa implícita: que la complejidad estructural de un material emerge, en gran medida, de manera difícilmente predecible.^[1] Desde cerámicas y semiconductores hasta polímeros amorfos, el control de la arquitectura tridimensional era más aspiracional que sistemático.^[2-6] Sin embargo, el descubrimiento de los materiales reticulares, en particular las redes metalorgánicas y covalentes (del inglés *metal-organic frameworks* (MOFs)^[7,8] y *covalent organic frameworks* (COFs)^[9]), transformó completamente esta narrativa.

El concepto central detrás de estos materiales, la química reticular, se basa en la construcción de redes extendidas y potencialmente porosas a partir de unidades moleculares definidas, cuya conectividad determinan la arquitectura final.^[10,11] De este modo, la estructura final no emerge como algo independiente a sus componentes, sino como el resultado directo de su elección y como estos se enlazan en el espacio.^[12-14] No es casualidad que el desarrollo de la química reticular, fundado principalmente por el Prof. Robson y expandido por los Prof. Kitagawa y Yaghi entre otros, haya sido reconocido recientemente con el Premio Nobel de Química de 2025.^[15-18] Más que premiar una familia concreta de materiales, este reconocimiento valida un

cambio de perspectiva: el paso desde materiales cuya estructura se observa o se interpreta, hacia sólidos cuya naturaleza química, física y estructural puede planificarse a través de sus bloques constituyentes.

¿Qué son realmente los MOFs y COFs?

Dentro de los materiales reticulares, los MOFs y COFs representan dos de las plataformas más exploradas y versátiles. Aunque ambos comparten la idea fundamental de construir redes extendidas a partir de bloques moleculares, la naturaleza de sus componentes y, por tanto, muchas de sus propiedades, son diferentes.

Los MOFs están formados por la combinación de nodos metálicos y ligandos orgánicos multitópicos, unidos mediante enlaces de coordinación. Esta combinación permite generar estructuras altamente porosas, cristalinas y con una enorme diversidad estructural.^[7,19] La presencia de un componente metálico en la estructura no solo aporta robustez, sino también funcionalidad adicional, especialmente en catálisis, adsorción selectiva de gases, o procesos redox.^[20-23]

Por otro lado, los COFs son materiales análogos que no tienen unidades metálicas, y se construyen exclusivamente a partir de componentes orgánicos unidos mediante enlaces

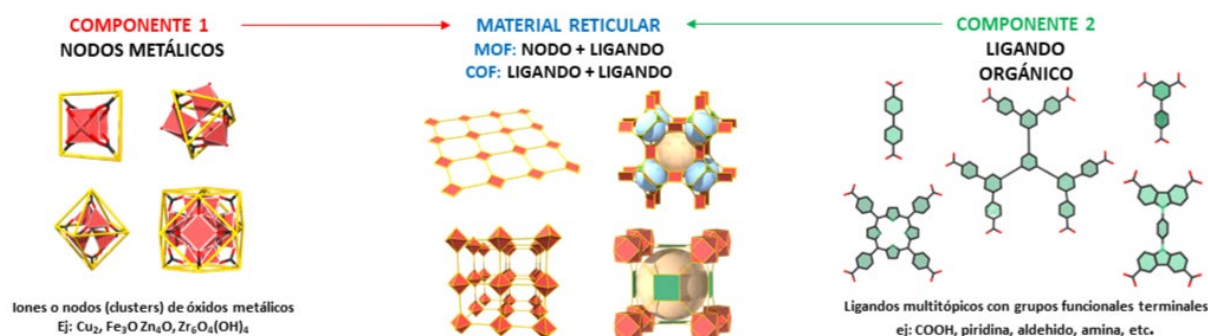


Figura 1. Representación esquemática del diseño estructural de materiales reticulares. A través de la selección de componentes moleculares de geometría y química definida, se puede planificar la estructura y propiedades del material.

covalentes reversibles (imina, boronato, ester borónico, etc.).^[24] Citando al Prof. O. M. Yaghi de forma especialmente acertada: "Si no necesitas el metal, el mejor MOF es un COF". En estos materiales, la geometría de ambos componentes está completamente preorganizada desde el diseño molecular, lo que permite un control aún más directo sobre la arquitectura final y suele traducirse en materiales más ligeros, químicamente robustos, y especialmente atractivos para aplicaciones en separación, membranas, y procesos medioambientales o biológicos incompatibles con unidades metálicas.^[25-31]

En ambos casos, su gran ventaja reside en que la estructura no se descubre, sino que se diseña. En consecuencia, esta química permite diseñar materiales optimizados para la aplicación que se persigue. La posibilidad de elegir los componentes y controlar cómo se enlazan en el espacio, junto a la capacidad de modificar químicamente la red una vez formada, permite ajustar de manera precisa sus propiedades físicas y químicas. De este modo, el desarrollo de materiales deja de estar condicionado por limitaciones sintéticas y pasa a orientarse hacia el cumplimiento de objetivos funcionales definidos.^[32]

Del concepto al material: Control sintético

Los materiales reticulares tradicionalmente se han obtenido mediante síntesis solvotermales, en las que precursores moleculares reaccionan en disolución bajo condiciones agresivas de temperatura y presión. A primera vista, este proceso podría parecer poco compatible con la idea de un diseño preciso de materiales ordenados. Sin embargo, es precisamente en este entorno donde emerge el control sintético estructural que da vida a estos materiales.^[33]

La formación de estas redes está gobernada por enlaces reversibles, los que, en condiciones solvotermales, adquieren un carácter dinámico en el proceso de ensamblaje. Esta reversibilidad permite al sistema reorganizarse, formar subunidades secundarias complejas (conocidas como "secondary building units" o SBUs, o "supermolecular building blocks" o SBBs), corregir defectos y evolucionar hacia estructuras ordenadas y cristalinas favorecidas termodinámicamente.^[34] Como resultado, variables sintéticas como el disolvente, la temperatura, el tiempo de reacción o la presencia de aditivos actúan como herramientas de ajuste fino. De hecho, pequeñas variaciones en estas condiciones pueden ser suficientes para favorecer distintas fases, o modular propiedades como el tamaño de cristal y el grado de defectos estructurales.^[35-40]

Es importante recalcar que hoy en día existen métodos sintéticos menos agresivos que los métodos tradicionales, y con una mayor sostenibilidad energética y ambiental. Por ejemplo, existen métodos sintéticos que operan a temperaturas

más bajas (incluso temperatura ambiente), reducen el consumo energético (microondas), emplean disolventes más verdes (incluso agua) o que directamente omiten el uso de disolvente (mecanosíntesis).^[41-43]

En conjunto, la síntesis de materiales reticulares responde a un equilibrio entre termodinámica y cinética que, lejos de limitar el diseño, lo hace posible. Aunque la predicción no es absoluta, hoy en día es viable dirigir la formación de estructuras hacia objetivos concretos. El éxito del campo no reside en haber simplificado esta complejidad, sino en haber aprendido a utilizarla como una herramienta de diseño.^[44]

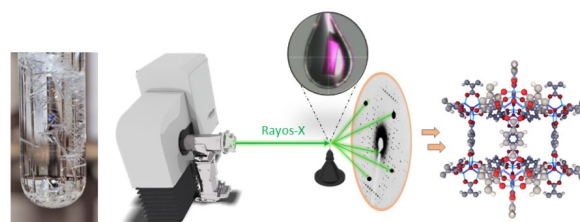


Figura 2. Representación esquemática del proceso de extracción de información estructural de los materiales reticulares a través de difracción de rayos X de monocristal.

Cristalinidad: Cuando la estructura se vuelve legible

El nivel de control estructural de los materiales reticulares adquiere una dimensión especialmente relevante gracias a una de sus características más distintivas: su naturaleza cristalina. A diferencia de muchos otros materiales porosos o amorfos, la organización periódica de estas redes permite conocer con precisión la disposición de sus componentes a escala atómica, lo que convierte la estructura no solo en algo ordenado, sino en algo directamente accesible y cuantificable.

En el campo de los materiales reticulares, particularmente en el de los MOF, la cristalinidad no es un simple detalle estructural, sino un elemento central del diseño químico. Permite identificar de forma inequívoca cada posición atómica dentro de la red a través de la difracción de monocristal y, por tanto, saber con exactitud su esqueleto, dónde se posicionan sus grupos funcionales, y qué entorno químico los rodea.^[45]

Aunque la obtención de monocristales es mucho más compleja en el campo de los COFs, la misma premisa sigue teniendo valor. A través de estudios de difracción de rayos-X en polvo o difracción de electrones, es posible estudiar y entender la naturaleza estructural de estos materiales, y consecuentemente, diseñar materiales puramente orgánicos con un objetivo claro.^[46,47]

Química molecular en la red: Modificación post-sintética de materiales reticulares

Es precisamente la posibilidad de conocer con precisión la estructura de los materiales reticulares lo que los convierte en algo más que sólidos ordenados: los transforma en plataformas químicas donde es posible intervenir de forma precisa y selectiva. Esta idea cobra su máxima expresión en la química post-sintética, donde el material ya formado deja de ser un producto final y pasa a ser un punto de partida para nuevas transformaciones químicas, sin comprometer su arquitectura global. Esto es posible debido a que los componentes de la red conservan su reactividad latente aun cuando están espaciados dentro del material.^[48-50]

Uno de los ejemplos más representativos es la metalación post-sintética, en la que sitios específicos dentro de la red se coordinan con nuevos centros metálicos una vez el material ya ha sido formado. Este proceso permite introducir funcionalidad catalítica o redox en posiciones estratégicas, aprovechando cavidades vacantes o grupos donadores accesibles.^[51] Trabajos en esta línea, como los desarrollados por los grupos de Sumbly-Doonan o Cohen, han mostrado cómo materiales ini-

cialmente estructurales pueden convertirse en plataformas catalíticas altamente selectivas, donde la actividad química está confinada a entornos diseñados con precisión atómica. En estos sistemas, además, la naturaleza cristalina del material permite determinar de forma inequívoca la posición y el entorno del metal incorporado. Esto hace posible también seguir su reactividad con una precisión excepcional, ya que las especies ancladas pueden caracterizarse a nivel atómico mediante difracción de rayos X de la red que las alberga.^[52,53]

De forma complementaria, la funcionalización orgánica post-sintética amplía este concepto hacia la manipulación directa de los ligandos que forman parte de la red. A través de reacciones químicas compatibles con la integridad del sólido, es posible introducir grupos funcionales adicionales, modular la polaridad de los poros, ajustar propiedades electrónicas o incorporar sitios de reconocimiento molecular. Reacciones como la formación de iminas, "Click Chemistry", o transformaciones directas sobre grupos amina o hidroxilo han sido ampliamente utilizadas para introducir funcionalidad adicional de manera selectiva dentro de la red.^[54] Este tipo de transformaciones ha sido clave para expandir el rango de aplicaciones de los materiales reticulares, ya que permite introducir fragmentos sensibles o fácilmente degradables a posteriori, evitando las agresivas condiciones solvotermales de síntesis.

Lo especialmente relevante de estas estrategias es que no dependen únicamente de la existencia de una estructura cristalina, sino de la combinación entre cristalinidad y accesibilidad química. Saber con precisión dónde está cada componente de la red permite que estas transformaciones no sean aleatorias, sino dirigidas: la química ocurre en posiciones concretas, dentro de un entorno estructural conocido y reproducible. En este sentido, la red no actúa como un soporte pasivo, sino como un entorno que organiza y condiciona la reactividad y, en consecuencia, su diseño para una aplicación óptima. Esta capacidad de controlar la reactividad a nivel molecular dentro de un sólido cristalino ha dado lugar también a un nuevo concepto sintético, denominado "Clip-off Chemistry" (o química de recorte), donde la ruptura selectiva de enlaces previamente programados en redes reticulares permite usar estas redes como precursores para diseñar y generar nuevas moléculas, macromoléculas o arquitecturas cristalinas.^[55-57]

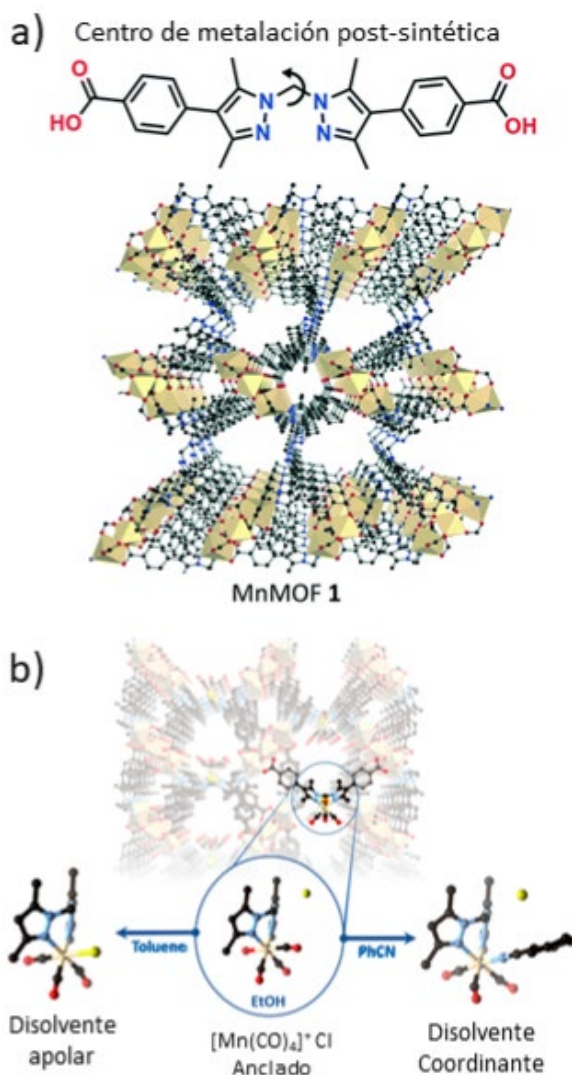


Figura 3. a) Representación visual de la estructura de un MOF con centros quelantes en los ligandos que componen su estructura, que pueden ser post-sintéticamente metalados (b) y su estructura y reactividad estudiada a través de difracción de monocristal. Figura 4b adaptada de la Ref. [53] reproducida con permiso de ACS.

Diseño dirigido: Cuando la estructura define la aplicación

La verdadera fortaleza de los materiales reticulares aparece cuando todo el control estructural y químico que hemos mencionado se traduce en función. La posibilidad de elegir componentes, modificar químicamente la red y conocer con precisión la posición de cada grupo funcional permite diseñar materiales no solo estéticamente elegantes desde el punto de vista químico, sino realmente optimizados para resolver problemas concretos.^[58]

Uno de los ejemplos más claros es en la captura y separación de gases. Materiales diseñados con poros de tamaño y polaridad específicos, o con centros metálicos abiertos, permiten discriminar entre moléculas similares, como CH₄/N₂ o propileno/propano, procesos de separación con enorme relevancia industrial y energética.^[59] En este contexto, materiales como Mg-MOF-74 (Mg₂(dobdc), donde dobdc= ácido 2,5-dihidroxitereftálico) o UiO-66 (Zr₆O₄(OH)₄(BDC)₆, donde BDC= ácido tereftálico) funcionalizados han demostrado cómo pequeñas modificaciones post-sintéticas pueden traducirse en grandes diferencias de selectividad y capacidad de adsorción del mismo material.^[60-62]

En catálisis, la posibilidad de posicionar centros activos de forma aislada y uniforme dentro de una red cristalina, bien por

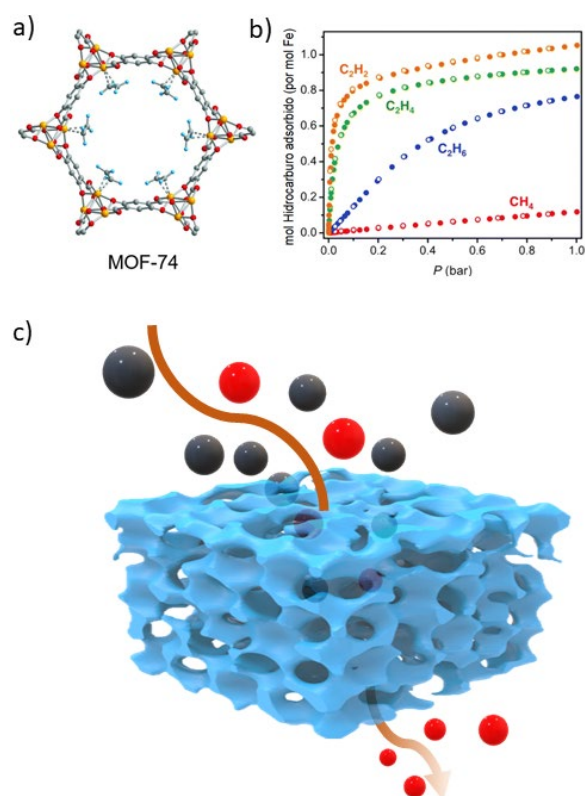


Figura 4. a) Representación de la estructura de MOF-74 y su interacción con ciertos hidrocarburos. b) Gráfica de adsorción de un derivado de MOF-74 con varios hidrocarburos. c) Esquema de permeabilidad selectiva de un derivado funcionalizado del MOF-74, capaz de discriminar y separar diferentes hidrocarburos (rojo: metano, gris: acetileno, etileno, etano) en fase gas cuando difunden a través de su estructura. Figura 4b adaptada de la Ref [61], reproducida con permiso de AAAS.

diseño o por adición posterior, ofrece una ventaja difícil de alcanzar en materiales convencionales. La metalación post-sintética permite introducir sitios catalíticos bien definidos en MOFs y COFs que combinan la precisión de la catálisis homogénea con la robustez de un sólido reutilizable.^[52,53,63]

De forma similar, en liberación controlada de fármacos o transporte molecular, la modulación precisa del tamaño de poro y de la polaridad interna y externa del material permite diseñar sistemas altamente selectivos a adsorber un fármaco, o incluso crear materiales altamente sensibles a un estímulo que permita liberarlo a voluntad.^[64-66]

Incluso en aplicaciones emergentes como la fotocatalisis, el almacenamiento de energía, o la captura de agua atmosférica, el principio sigue siendo el mismo: no se busca simplemente un material poroso, sino un entorno químico diseñado para una función concreta. En otras palabras, los materiales reticulares representan probablemente una de las aproximaciones más cercanas teóricamente a la idea de "materiales a la carta".^[67]

Conclusiones y perspectivas

En resumen, los materiales reticulares han transformado la forma de pensar la química de materiales, acercándola a un escenario donde estructura, reactividad y función pueden diseñarse de manera integrada. Esta capacidad de control, que abarca desde el diseño inicial y las condiciones de síntesis hasta la modificación post-sintética, ha abierto la puerta a una forma

distinta de entender la química de sólidos: no como entidades estáticas, sino como plataformas químicas ajustables.

En términos de aplicaciones, este cambio de paradigma se refleja en su creciente exploración en áreas como la captura y almacenamiento de gases, la separación molecular, la catálisis o la liberación controlada de especies activas. En todos estos casos, el valor añadido no reside únicamente en la porosidad del material, sino en la posibilidad de ajustar de forma precisa su entorno químico interno. Es esta combinación de estructura bien definida y funcionalidad modulable la que explica su atractivo en contextos que van desde la química ambiental hasta la energía o la química médica. Importante destacar que todas estas modificaciones no están limitadas a materiales reticulares extendidos, sino también a su homólogo finito, las cajas o poliedros orgánicos y metal-orgánicos. De igual manera, su control estructural y reactividad latente convierte a estas plataformas en materiales altamente adaptables a las condiciones necesarias, esta vez disponiendo de un control estequiométrico debido a su naturaleza molecular.^[68]

Aun así, en el campo de la química reticular persisten retos importantes, especialmente en términos de coste, estabilidad en condiciones reales y escalabilidad de los procesos sintéticos, lo que condiciona su transferencia a aplicaciones industriales de gran volumen. No todo lo que puede diseñarse con precisión atómica es, por ahora, viable fuera del laboratorio, aunque los avances en metodologías sintéticas, diseño racional y alejarse de la necesidad de condiciones de síntesis agresivas están reduciendo progresivamente estas barreras.^[69]

Quizá aún no estemos en la era de los "materiales a la carta" producidos de forma rutinaria a escala industrial, pero sí en el momento en el que esa idea ha dejado de ser ciencia ficción para convertirse en un objetivo tangible y activamente perseguido. Y como suele ocurrir en química, el verdadero reto no es solo descubrir lo que es posible, sino aprender a hacerlo de forma simple, robusta, escalable y, con suerte, ¿un poco más barata?

Agradecimientos

J.A. desea expresar su agradecimiento por la ayuda Ramón y Cajal (RYC2024-049314-I), financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por el FSE+.

Bibliografía

- [1] A. R. Oganov, C. J. Pickard, Q. Zhu, R. J. Needs, *Nat. Rev. Mater.* **2019**, *4*, 331-348, <https://doi.org/10.1038/s41578-019-0101-8>.
- [2] Z. H. Stachurski, *Materials* **2011**, *4*, Pages 1564-1598 **2011**, *4*, 1564-1598, <https://doi.org/10.3390/ma4091564>.
- [3] A. M. Smith, S. Nie, *Acc. Chem. Res.* **2009**, *43*, 190-200, <https://doi.org/10.1021/ar9001069>.
- [4] S. Chatani, C. J. Kloxin, C. N. Bowman, *Polym. Chem.* **2014**, *5*, 2187-2201, <https://doi.org/10.1039/C3PY01334K>.
- [5] A. Ferrari, F. Körmann, M. Asta, J. Neugebauer, *Nat. Comput. Sci.* **2023**, *3*, 221-229, <https://doi.org/10.1038/s43588-023-00407-4>.
- [6] M. J. Cliffe, M. T. Dove, D. A. Drabold, A. L. Goodwin, *Phys. Rev. Lett.* **2010**, *104*, 125501, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.125501>.
- [7] H. Furukawa, K. E. Cordova, M. O'Keeffe, O. M. Yaghi, *Science* **2013**, *341*, 1230444, <https://doi.org/10.1126/science.1230444>.
- [8] H. C. J. Zhou, S. Kitagawa, *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 5415-5418, <https://doi.org/10.1039/C4CS90059F>.
- [9] A. P. Côté, A. I. Benin, N. W. Ockwig, M. O'Keeffe, A. J.

- Matzger, O. M. Yaghi, *Science* **2005**, *310*, 1166-1170, <https://doi.org/10.1126/science.1120411>.
- [10] R. Freund, S. Canossa, S. M. Cohen, W. Yan, H. Deng, V. Guillerm, M. Eddaoudi, D. G. Madden, D. Fairen-Jimenez, H. Lyu, L. K. Macreadie, Z. Ji, Y. Zhang, B. Wang, F. Haase, C. Wöll, O. Zaremba, J. Andreo, S. Wuttke, C. S. Diercks, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 23946-23974, <https://doi.org/10.1002/anie.202101644>.
- [11] O. M. Yaghi, M. O'Keeffe, N. W. Ockwig, H. K. Chae, M. Eddaoudi, J. Kim, *Nature* **2003**, *423*, 705-714, <https://doi.org/10.1038/nature01650>.
- [12] H. Jiang, D. Alezi, M. Eddaoudi, *Nat. Rev. Mater.* **2021**, *6*, 466-487, <https://doi.org/10.1038/s41578-021-00287-y>.
- [13] W. Xu, B. Tu, Q. Liu, Y. Shu, C. C. Liang, C. S. Diercks, O. M. Yaghi, Y. B. Zhang, H. Deng, Q. Li, *Nat. Rev. Mater.* **2020**, *5*, 764-779, <https://doi.org/10.1038/s41578-020-0225-x>.
- [14] M. O'Keeffe, O. M. Yaghi, *Chem. Rev.* **2011**, *112*, 675-702, <https://doi.org/10.1021/cr200205j>.
- [15] B. F. Hoskins, R. Robson, *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *111*, 5962-5964, <https://doi.org/10.1021/ja00197a079>.
- [16] B. F. Abrahams, B. F. Hoskins, D. M. Michail, R. Robson, *Nature* **1994**, *369*, 727-729, <https://doi.org/10.1038/369727a0>.
- [17] S. Kitagawa, R. Kitaura, S. I. Noro, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2004**, *43*, 2334-2375, <https://doi.org/10.1002/anie.200300610>.
- [18] H. Li, M. Eddaoudi, M. O'Keeffe, O. M. Yaghi, *Nature* **1999**, *402*, 276-279, <https://doi.org/10.1038/46248>.
- [19] M. J. Kalmuzki, N. Hanikel, O. M. Yaghi, *Sci. Adv.* **2018**, *4*, AAT9180, <https://doi.org/10.1126/sciadv.aat9180>.
- [20] M. Martos, I. M. Pastor, *ChemistryOpen* **2025**, *14*, e202400428, <https://doi.org/10.1002/open.202400428>.
- [21] Z. H. Syed, F. Sha, X. Zhang, D. M. Kaphan, M. Delferro, O. K. Farha, *ACS Catal.* **2020**, *10*, 11556-11566, <https://doi.org/10.1021/acscatal.0c03056>.
- [22] Q. Liu, N. Hoefler, G. Berkgigler, Z. Cui, T. Liu, A. C. Co, D. W. McComb, C. R. Wade, *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 18710-18718, <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.2c03212>.
- [23] R. M. Main, S. M. Vornholt, R. Ettliger, P. Netzsch, M. G. Stanzione, C. M. Rice, C. Elliott, S. E. Russell, M. R. Warren, S. E. Ashbrook, R. E. Morris *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 3270-3278, <https://doi.org/10.1021/jacs.3c11847>. [24] K. Geng, T. He, R. Liu, S. Dalapati, K. T. Tan, Z. Li, S. Tao, Y. Gong, Q. Jiang, D. Jiang, *Chem. Rev.* **2020**, *120*, 8814-8933, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00550>.
- [25] Z. Zhou, T. Ma, H. Zhang, S. Chheda, H. Li, K. Wang, S. Ehrling, R. Giovine, C. Li, A. H. Alawadhi, M. M. Abduljawad, M. O. Alawad, L. Gagliardi, J. Sauer, O. M. Yaghi, *Nature* **2024**, *635*, 96-101, <https://doi.org/10.1038/s41586-024-08080-x>.
- [26] N. Huang, X. Chen, R. Krishna, D. Jiang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 2986-2990, <https://doi.org/10.1002/anie.201411262>.
- [27] X. Chen, L. Kong, J. A. A. Mehrez, C. Fan, W. Quan, Y. Zhang, M. Zeng, J. Yang, N. Hu, Y. Su, H. Wei, Z. Yang, *Nanomicro Lett.* **2023**, *15*, S40820-023-01107-4, <https://doi.org/10.1007/s40820-023-01107-4>.
- [28] Y. Shi, J. Yang, F. Gao, Q. Zhang, *ACS Nano* **2023**, *17*, 1879-1905, <https://doi.org/10.1021/acsnano.2c11346>.
- [29] M. Shahid, A. ur Rehman, T. Najam, H. Majeed, M. Shalash, S. M. El-Bahy, M. Sufyan Javed, S. Shoaib Ahmad Shah, M. Altaf Nazir, *ChemPhotoChem* **2024**, *8*, e202400131, <https://doi.org/10.1002/cptc.202400131>.
- [30] H. Wang, Y. Zhai, Y. Li, Y. Cao, B. Shi, R. Li, Z. Zhu, H. Jiang, Z. Guo, M. Wang, L. Chen, Y. Liu, K. G. Zhou, F. Pan, Z. Jiang, *Nat. Commun.* **2022**, *13*, 7123, <https://doi.org/10.1038/s41467-022-34849-7>.
- [31] Q. Zhang, Y. Huang, Z. Dai, Y. Li, Z. Li, R. Lai, F. Wei, F. Shao, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2025**, *17*, 27605-27628, <https://doi.org/10.1021/acscami.5c02556>.
- [32] S. T. Khan, S. M. Moosavi, *Nat. Commun.* **2025**, *16*, 5642, <https://doi.org/10.1038/s41467-025-60796-0>.
- [33] N. Stock, S. Biswas, *Chem. Rev.* **2011**, *112*, 933-969, <https://doi.org/10.1021/cr200304e>.
- [34] H. Furukawa, J. Kim, N. W. Ockwig, M. O'Keeffe, O. M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 11650-11661, <https://doi.org/10.1021/ja803783c>.
- [35] A. M. Evans, L. R. Parent, N. C. Flanders, R. P. Bisbey, E. Vitaku, M. S. Kirschner, R. D. Schaller, L. X. Chen, N. C. Gianneschi, W. R. Dichtel, *Science*, **2018**, *361*, 52-57, <https://doi.org/10.1126/science.aar7883>.
- [36] A. Schaate, P. Roy, A. Godt, J. Lippke, F. Waltz, M. Wiebcke, P. Behrens, *Chem. - Eur. J.* **2011**, *17*, 6643-6651, <https://doi.org/10.1002/chem.201003211>.
- [37] C. R. Marshall, S. A. Staudhammer, C. K. Brozek, *Chem. Sci.* **2019**, *10*, 9396-9408, <https://doi.org/10.1039/C9SC03802G>.
- [38] S. Tatay, S. Martínez-Giménez, A. Rubio-Gaspar, E. Gómez-Oliveira, J. Castells-Gil, Z. Dong, Á. Mayoral, N. Almora-Barrios, N. M. Padiál, C. Martí-Gastaldo, *Nat. Commun.* **2023**, *14*, 6962, <https://doi.org/10.1038/s41467-023-41936-w>.
- [39] F. C. N. Firth, M. J. Cliffe, D. Vulpe, M. Aragones-Anglada, P. Z. Moghadam, D. Fairen-Jimenez, B. Slater, C. P. Grey, *J. Mater. Chem. A Mater.* **2019**, *7*, 7459-7469, <https://doi.org/10.1039/C8TA10682G>.
- [40] M. J. Cliffe, E. Castillo-Martínez, Y. Wu, J. Lee, A. C. Forse, F. C. N. Firth, P. Z. Moghadam, D. Fairen-Jimenez, M. W. Gaultois, J. A. Hill, O. V. Magdysyuk, B. Slater, A. L. Goodwin, C. P. Grey, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 5397-5404, <https://doi.org/10.1021/jacs.7b00106>.
- [41] J. Martín-Illán, D. Rodríguez-San-Miguel, D. Rodríguez-San-Miguel, C. Franco, I. Imaz, D. Maspoch, D. Maspoch, J. Puigmartí-Luis, F. Zamora, *Chem. Commun.* **2020**, *56*, 6704-6707, <https://doi.org/10.1039/DOCC02033H>.
- [42] M. Klimakow, P. Klobes, A. F. Thünemann, K. Rademann, F. Emmerling, *Chem. Mater.* **2010**, *22*, 5216-5221, <https://doi.org/10.1021/cm1012119>.
- [43] H. Vardhan, B. Shin, X. Wang, S. Y. Jiang, A. Alazmi, R. Zhang, Y. Han, X. Wu, R. Verduzco, *Chem. Mater.* **2025**, *37*, 2258-2267, <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.4c03398>.
- [44] M. G. Goesten, F. Kapteijn, J. Gascon, *CrystEngComm* **2013**, *15*, 9249-9257, <https://doi.org/10.1039/C3CE41241E>.
- [45] J. Albalad, C. J. Sumbly, D. Maspoch, C. J. Doonan, *CrystEngComm* **2021**, *23*, 2185-2195, <https://doi.org/10.1039/D1CE00067E>.
- [46] E. Lin, Z. Wang, Z. Zhang, *J. Mater. Chem. A* **2024**, *12*, 21704-21715, <https://doi.org/10.1039/D4TA02312A>.
- [47] G. Zhou, T. Yang, Z. Huang, *Commun. Chem.* **2023**, *6*, 116, <https://doi.org/10.1038/s42004-023-00915-4>.
- [48] S. M. Cohen, N. L. Rosi, *Inorg. Chem.* **2021**, *60*, 11703-11705, <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.1c02159>.
- [49] W. He, D. Lv, Y. Guan, S. Yu, *J. Mater. Chem. A* **2023**, *11*, 24519-24550, <https://doi.org/10.1039/D3TA05158G>.
- [50] J. L. Segura, S. Royuela, M. Mar Ramos, *Chem. Soc. Rev.* **2019**, *48*, 3903-3945, <https://doi.org/10.1039/C8CS00978C>.
- [51] J. D. Evans, C. J. Sumbly, C. J. Doonan, *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 5933-5951, <https://doi.org/10.1039/C4CS00076E>.
- [52] R. A. Peralta, M. T. Huxley, J. Albalad, C. J. Sumbly, C. J. Doonan, *Inorg. Chem.* **2021**, *60*, 11775-11783, <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.1c00849>.
- [53] M. T. Huxley, R. J. Young, W. M. Bloch, N. R. Champness, C. J. Sumbly, C. J. Doonan, *Organometallics* **2019**, *38*, 3412-3418,

- <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.9b00401>.
- [54] A. M. Fracaroli, P. Siman, D. A. Nagib, M. Suzuki, H. Furukawa, F. D. Toste, O. M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 8352-8355, <https://doi.org/10.1021/jacs.6b04204>.
- [55] Y. Yang, A. Broto-Ribas, B. Orfín-Rubio, I. Imaz, F. Gándara, A. Carné-Sánchez, V. Guillerm, S. Jurado, F. Busqué, J. Juanhuix, D. Maspoch, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202111228, <https://doi.org/10.1002/anie.202111228>.
- [56] R. Sánchez-Naya, J. P. Cavalieri, J. Albalad, A. Cortés-Martínez, K. Wang, C. Fuertes-Espinosa, T. Parella, S. Fiori, E. Ribas, A. Mugarza, X. Ribas, J. Farauto, O. M. Yaghi, I. Imaz, D. Maspoch, *Science* **2025**, *388*, 1318-1323, <https://doi.org/10.1126/science.adw4126>.
- [57] S. Ruiz-Relaño, D. Nam, J. Albalad, A. Cortés-Martínez, J. Juanhuix, I. Imaz, D. Maspoch, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 26603-26608, <https://doi.org/10.1021/jacs.4c09431>.
- [58] J. Albalad, R. A. Peralta, M. T. Huxley, S. Tsoukatos, Z. Shi, Y. B. Zhang, J. D. Evans, C. J. Sumbly, C. J. Doonan, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 14893-14900, <https://doi.org/10.1039/D1SC04712D>.
- [59] X. Li, S. Mukherjee, M. J. Zaworotko, *Adv. Mater.* **2026**, *38*, e12551, <https://doi.org/10.1002/adma.202512551>.
- [60] E. J. Kim, R. L. Siegelman, H. Z. H. Jiang, A. C. Forse, J. H. Lee, J. D. Martell, P. J. Milner, J. M. Falkowski, J. B. Neaton, J. A. Reimer, S. C. Weston, J. R. Long, *Science* **2020**, *369*, 392-396, <https://doi.org/10.1126/science.abb3976>.
- [61] E. D. Bloch, W. L. Queen, R. Krishna, J. M. Zadrozny, C. M. Brown, J. R. Long, *Science* **2012**, *335*, 1606-1610, <https://doi.org/10.1126/science.1217544>.
- [62] H. Lyu, H. Li, N. Hanikel, K. Wang, O. M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 12989-12995, <https://doi.org/10.1021/jacs.2c05382>.
- [63] Y. Chen, D. Jiang, *Acc. Chem. Res.* **2024**, *57*, 3182-3193, <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.4c00517>.
- [64] F. Xing, J. Xu, Y. Zhou, P. Yu, M. Zhe, Z. Xiang, X. Duan, U. Ritz, *Nanoscale* **2024**, *16*, 4434-4483, <https://doi.org/10.1039/D3NR05776C>.
- [65] R. Ghosh, M. S. Hasan, S. Gothwal, J. Lee, P. Dhasaiyan, J.-H. Ryu, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2026**, *18*, 25682-25702, <https://doi.org/10.1021/acsami.6c01807>.
- [66] P. Ghosh, P. Banerjee, *Chem. Commun.* **2023**, *59*, 12527-12547, <https://doi.org/10.1039/D3CC01829F>.
- [67] W. Xu, O. M. Yaghi, *ACS Cent. Sci.* **2020**, *6*, 1348-1354, <https://doi.org/10.1021/acscentsci.0c00678>.
- [68] J. Albalad, L. Hernández-López, A. Carné-Sánchez, D. Maspoch, *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 2443-2454, <https://doi.org/10.1039/D1CC07034G>.
- [69] A. M. Wright, M. T. Kapelewski, S. Marx, O. K. Farha, W. Morris, *Nat. Mater.* **2025**, *24*, 178-187, <https://doi.org/10.1038/s41563-024-01947-4>.

 **Chemistry Europe**

We support the next generation of chemists

Apply for the Chemistry Europe Travel Grant



El sistema de unidades en magnetismo

The system of units in magnetism

Francesc Lloret Pastor^{1,2,*} y Rafael Ruiz García²

¹ Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Valencia.

² Instituto de Ciencia Molecular, Universidad de Valencia.

PALABRAS CLAVE:

Unidades Magnéticas
CGS-EMU
Sistema Internacional
Campos Magnéticos
Magnetización

RESUMEN:

A pesar de que el Sistema Internacional de Unidades (SI) es el estándar oficial, el sistema CGS-EMU sigue siendo comúnmente utilizado en el campo del magnetismo. La coexistencia de ambos sistemas de unidades genera confusión y errores, tanto a estudiantes como investigadores. El presente artículo describe la historia y evolución de estos sistemas, con objeto de entender esta polémica coexistencia. Se presta un énfasis particular en las unidades magnéticas y los factores de conversión entre ambos sistemas.

KEYWORDS:

Magnetic Units
CGS-EMU
International System
Magnetic Fields
Magnetization

ABSTRACT:

Even though the International System of Units (SI) is the official standard, the CGS-EMU system is still commonly used in the field of magnetism. The coexistence of both systems of units generates confusion and errors, both for students and researchers. In this article we try to describe the history and evolution of these systems, to understand this controversial coexistence. Emphasis is placed on magnetic units and conversion factors between both systems.

Introducción

Un sistema de unidades es un conjunto de unidades diseñado para cubrir una amplia gama de cantidades medibles, incorporando las correspondientes relaciones matemáticas para reducir al máximo el número de unidades base independientes requeridas. Es decir, un conjunto mínimo de unidades básicas a partir de las cuales derivar todas las demás magnitudes. Un sistema de unidades es un elemento esencial en la física y la ingeniería, pues proporciona coherencia a la medición, comparación y comunicación de resultados.

En el campo del magnetismo, a pesar de reconocer que el Sistema Internacional de Unidades (SI) es el estándar oficial, el sistema CGS-EMU (centímetro-gramo-segundo, donde EMU son las siglas del inglés **e**lectro-**m**agnetic-**u**nits) sigue siendo comúnmente utilizado por parte de muchos investigadores. La coexistencia histórica de ambos sistemas ha generado, y sigue generando, confusión y errores, tanto a estudiantes como investigadores.

Aunque los sistemas de unidades pueden parecer meros convenios administrativos, detrás de ellos late una historia sorprendentemente humana, con debates intensos, filosofías enfrentadas y decisiones políticas complejas que moldearon la forma con que hoy entendemos el mundo físico. En esta breve

revisión se describe, de manera pedagógica y coherente, la historia y sus protagonistas, sus decisiones conceptuales, los conflictos entre la física y la ingeniería, y su evolución, desde el sistema CGS, pasando por el sistema MKS (metro-kilogramo-segundo), racionalizado de Giorgi, hasta el SI y su última revisión en 2019; con un énfasis particular en las unidades magnéticas y la problemática coexistencia de ambos sistemas.

Breve historia de los sistemas de unidades: de los orígenes del CGS al SI contemporáneo

La historia de los sistemas de unidades es, en el fondo, la historia de cómo la humanidad aprendió a medir el mundo de forma coherente para poder construir, comerciar y hacer ciencia sin malentendidos... o al menos con menos discusiones.

Los primeros sistemas tenían el cuerpo humano como regla base. En las civilizaciones antiguas, medir significaba comparar con el cuerpo: el codo (antebrazo), el pie, el palmo o el paso. El problema era evidente: no todos los brazos o pies miden lo mismo. Durante la Edad Media, los sistemas de unidades se multiplicaron. Una libra podía significar cosas distintas según la ciudad. La vara, la arroba o el quintal cambiaban de valor de un reino a otro. Esto complicaba el comercio y la adminis-

tración. Viajar con mercancías implicaba, además de mapas y tablas de conversión, tener mucha paciencia.

A finales del siglo XVIII, la física vivía una especie de "Torre de Babel" metrológica. Cada país, e incluso cada laboratorio, usaba sus propias unidades.^[1] Los resultados experimentales eran incomparables y las ecuaciones, un mosaico de factores numéricos sin patrón. El verdadero punto de inflexión llegó con la Revolución Francesa y la introducción del sistema métrico decimal (1799). La idea era audaz y elegante: crear un sistema decimal universal basado en la naturaleza, no en reyes ni cuerpos humanos. Así nacieron el metro y el kilogramo como unidades universales de longitud y masa. Por primera vez, la medición empezaba a ser lógica y escalable, algo que la ciencia agradecería enormemente. Sin embargo, su alcance no había llegado aún a la electrodinámica. El nuevo fenómeno de la corriente eléctrica y su conexión con el magnetismo, descubierto por Ørsted en 1820 y cuantificada por Ampère, necesitaba su propio marco de medida.

El primer intento serio de sistematización fue obra de Carl Friedrich Gauss y Wilhelm Eduard Weber. En 1832, durante sus investigaciones sobre el magnetismo terrestre, idearon un sistema de unidades puramente mecánico, basado en el centímetro, el gramo y el segundo (el embrión del futuro sistema CGS). El objetivo: toda magnitud electromagnética debía expresarse únicamente en términos de masa, longitud y tiempo. Esto implicaba redefinir carga, corriente, potencial y campo en función de magnitudes mecánicas medibles. En este marco, la fuerza entre dos cargas eléctricas (q_1 y q_2) situadas a una cierta distancia entre ellas (r) podía escribirse sin constantes arbitrarias a través de la ecuación (1). Una forma "pura" de la ley de Coulomb, libre de factores humanos. Así nació la visión naturalista de la metrología física. Un sistema que describiera el universo "como es", no "como lo convenimos".

$$\text{Ley de Coulomb (CGS): } F = \frac{q_1 q_2}{r^2} \quad (1)$$

Mientras Gauss y Weber ponían orden en el laboratorio, James Clerk Maxwell construía el edificio teórico. Entre 1861 y 1865, sus ecuaciones unificaron electricidad, magnetismo y luz (óptica) en un solo cuerpo matemático. Maxwell necesitaba un sistema de unidades coherente que mantuviera la simetría y coherencia de sus ecuaciones.

Los orígenes: la búsqueda de un sistema absoluto (1800–1873)

Durante la primera mitad del siglo XIX, la electricidad y el magnetismo experimentaron una revolución conceptual. Ørsted, Ampère, Faraday y finalmente Maxwell transformaron fenómenos dispersos en un conjunto unificado de leyes dinámicas. Sin embargo, el lenguaje dimensional de estas teorías era caótico. La electrostática usaba unas unidades; la electrodinámica, otras; la mecánica, otras; y los laboratorios ingenieriles aplicaban unidades prácticas incompatibles con la física teórica.

Los trabajos de Maxwell (1873) estimularon la necesidad de establecer un sistema absoluto de unidades, tal como el propuesto por Gauss y Weber, esto es, un sistema cuyo núcleo fueran únicamente longitud (L), masa (M) y tiempo (T). Todas las demás magnitudes deberían deducirse de estas.

La base filosófica era doble:

1. Unificación: si electricidad y mecánica son aspectos de un mismo fenómeno físico, sus unidades deben compartir la misma raíz dimensional.
2. Simplicidad formal: las ecuaciones de la naturaleza deberían ser universales e independientes del sistema de unidades.

Fue en este contexto cuando surgió el primer gran sistema coherente de la física moderna: el sistema "cegesimal" CGS.

El sistema CGS: triunfo y tensiones (1873–1900)

En 1873, el mismo año en que James Clerk Maxwell publicó la primera edición de su libro "A Treatise on Electricity and Magnetism", el Comité para la Selección y Nomenclatura de Unidades Dinámicas y Eléctricas, bajo el liderazgo de William Thomson (Lord Kelvin) y científicos como Maxwell, Stoney y Fleming Jenkin, presentó su primer informe en el cual se recomendaba la adopción del sistema de unidades CGS, a pesar de la oposición de un miembro del Comité, George Johnstone Stoney, quien afirmaba que el centímetro "es demasiado pequeño" para ser una unidad práctica para la ingeniería y defendía adoptar el metro. El comité prefirió el CGS antes que el sugerido sistema MGS (metro-gramo-segundo) de Stoney porque tenía la ventaja de hacer que el valor de la densidad del agua fuese prácticamente igual a la unidad ($1 \text{ g/cm}^3 = 10^{-6} \text{ g/m}^3$). No obstante, esta crítica —aparentemente técnica— anticipaba la futura transición al sistema MKS (metro-kilogramo-segundo).

El CGS era un sistema "absoluto", es decir, basado en unidades mecánicas de longitud L, masa M y tiempo T, a partir de ellas se derivan todo el resto de las unidades. Cualquier magnitud, incluida la eléctrica o magnética, debía expresarse como una combinación de centímetros, gramos y segundos. Por ejemplo, las dimensiones para la fuerza: $F = m \cdot a = m \cdot e/t^2 \rightarrow M \cdot L \cdot T^{-2}$ ($\text{g} \cdot \text{cm} \cdot \text{s}^{-2}$). Similarmente, las dimensiones para la carga, según la ecuación de Coulomb (1): $q = [F \cdot r^2]^{1/2} \rightarrow M^{1/2} \cdot L^{3/2} \cdot T^{-1}$ ($\text{g}^{1/2} \cdot \text{cm}^{3/2} \cdot \text{s}^{-1}$). Obviamente, se requería acordar nombres para cada uno de estos conjuntos de dimensiones. De esta época datan unidades célebres del sistema CGS, aún presentes en magnetismo: dinas (unidad de fuerza), erg (unidad de energía), gauss (inducción magnética), oersted (intensidad del campo magnético H), etc.

Sin embargo, el electromagnetismo era demasiado rico para un único conjunto; así que surgieron dos ramas o subsistemas del CGS:

1. CGS-ESU (electrostático). Derivado de la ley de Coulomb entre cargas puntuales.
2. CGS-EMU (electromagnético). Derivado de las fuerzas entre corrientes o imanes.

La coexistencia de ambos generó una doble tradición de unidades que pronto se volvería molesta.

Aunque conceptualmente elegante, el CGS tenía tres problemas graves:

1. No era práctico para ingeniería, que necesitaba unidades más grandes.
2. Generaba constantes incómodas, especialmente factores (irracionales) de 4π , omnipresentes en las ecuaciones de Maxwell.
3. Nunca pudo integrar completamente la electricidad y el magnetismo en un único subsistema (coexistencia de ESU y EMU).

Estas limitaciones prepararon el terreno para una reforma profunda

La racionalización: Heaviside (1890–1904) y la cruzada contra el 4π

Uno de los muchos logros de Oliver Heaviside fue la reformulación de las ecuaciones cartesianas de Maxwell en notación de cálculo vectorial compacto. Las ecuaciones de Maxwell contenían incómodos factores 4π , reflejo de la geometría de la esfe-

ra en tres dimensiones (el área de una esfera es $4\pi r^2$). Heaviside creía que el factor 4π en las ecuaciones electromagnéticas era simplemente una convención ilógica, y defendió firmemente la racionalización del sistema CGS, es decir, la eliminación del número irracional 4π en la mayoría de las ecuaciones, incluidas las de Maxwell, para las unidades magnéticas. Introdujo así la idea de racionalización, la cual influiría decisivamente en Giovanni Giorgi.

A continuación, se indican las ecuaciones de Maxwell (2) para el campo eléctrico (E) y la inducción magnética (B), racionalizadas y sin racionalizar.

No Racionalizadas	Racionalizadas	
$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho$	$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon_0$	
$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$	$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$	
$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$	$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$	(2)
$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$	$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$	

En las ecuaciones de Maxwell racionalizadas, las constantes ϵ_0 ("permitividad del vacío") y μ_0 (permeabilidad del vacío) ya incluyen el efecto del 4π , esto es, el factor 4π se traslada a la definición de unidades, de modo que todas las ecuaciones electromagnéticas quedan simétricas y racionalizadas.^[2] El producto de ambas constantes es la inversa del cuadrado de la velocidad de la luz (c) según la ecuación (3).

$$\mu_0 \epsilon_0 = \frac{1}{c^2} \quad (3)$$

El sistema MKS de Giorgi: una cuarta unidad entra en escena (1901–1954)

En 1901, el ingeniero italiano Giovanni Giorgi propuso extender el sistema mecánico de tres unidades MKS (metro, kilogramo, segundo) a un sistema tetradimensional, añadiendo una cuarta unidad eléctrica que pudiese vincular a la mecánica y al electromagnetismo. "Si adoptamos una unidad eléctrica independiente —el amperio— las unidades mecánicas y eléctricas pueden coexistir sin constantes arbitrarias" (Giorgi, 1901).^[3]

Lo crucial no era qué unidad escoger, si no la filosofía subyacente: las constantes μ_0 y ϵ_0 no debían fijarse arbitrariamente, si no que debían ser cantidades físicas medibles y no constantes por convenio.

El significado de la permeabilidad del vacío (también llamada constante magnética) μ_0 era fundamental para el sistema de Giorgi, quien enfatizó: "En mi sistema, $[\mu_0]$ no es un número, ni asumo ningún valor especial para él; es una cantidad física, que tiene dimensiones, y que debe medirse experimentalmente". Giorgi consideró que tanto μ_0 como ϵ_0 estaban sujetas al refinamiento experimental, con $\mu_0 \approx 1.256 \times 10^{-6}$ henrios por metro [H/m] y $\epsilon_0 \approx 8,842 \times 10^{-12}$ faradios por metro [F/m], y ambos sujetos a la condición de que $[\mu_0 \epsilon_0]^{-1/2}$ fuese igual a la velocidad de la luz $c \approx 3 \times 10^8$ m/s. Su postura rompía con el CGS.^[4] El electromagnetismo ya no debía derivarse exclusivamente de L, M y T, sino que requería una cuarta unidad explícita, lo cual fue el prelude del sistema MKSA (metro-kilogramo-segundo-amperio) y finalmente del Sistema Internacional, SI.

Heaviside racionalizó las ecuaciones de Maxwell y Giorgi racionalizó las unidades, el cual veía esta racionalización como un complemento opcional, pero conveniente, a su sistema de cuatro dimensiones. Sin embargo, su propuesta causó resistencia. La oposición al sistema de Giorgi fue liderada por Richard Glaze-Brook, un exalumno y heredero intelectual de Maxwell, que actuaba como presidente de la Comisión de Símbolos, Unidades y Nomenclatura (SUN) de la Unión Internacional de Física Pura y Aplicada. Glazebrook, veía en el MKSA

una amenaza para la continuidad del electromagnetismo en CGS, lo cual retrasó la adopción del sistema de Giorgi durante décadas.

Entre 1901 y 1954, una larga serie de organismos internacionales debatieron opciones para la cuarta unidad (ohmio, voltio, culombio, henrio, faradio, weber...). Todas las demás unidades se podrían derivar de estas cuatro mediante las ecuaciones fundamentales. Por ejemplo, la unidad métrica para la carga eléctrica, el culombio (C), se define como la carga transferida por una corriente de un amperio (A) en un segundo [A·s]. En 1946, el Comité Internacional de Pesos y Medidas (CIPM) aceptó el amperio como la cuarta unidad.

La definición original del amperio se dio en términos de la fuerza entre dos conductores paralelos, la ley de Ampère (4), donde la fuerza por unidad de longitud $F/l = 2 \cdot 10^{-7}$ N/m, las corrientes I_1 e $I_2 = 1$ A, y la separación $d = 1$ m.

$$F/l = \mu_0 \cdot I_1 \cdot I_2 / 2\pi d \quad (4)$$

Esta definición fijaba $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ N/A² $\equiv 4\pi \cdot 10^{-7}$ H/m (N = newton y H = henrio). Como veremos más adelante, la definición del amperio en el SI revisado se basará en el valor fijo de la carga elemental del electrón, e , mientras que el valor de μ_0 dependerá del valor de la constante hiperfina, a , de la frecuencia de transición hiperfina del cesio.

Una decisión clave para cambiar el sistema CGS se debía a las cantidades eléctricas y magnéticas. Si se considera que la carga es independiente de la masa, la longitud y el tiempo, la ecuación que describe la fuerza entre dos cargas eléctricas en el vacío debe incluir un constante dimensional k_C que contenga a la nueva unidad de modo que $F = k_C q_1 q_2 / r^2$, donde $k_C = 1/4\pi\epsilon_0$, con unidades $m^{-3} \cdot kg^{-1} \cdot s^4 \cdot A^2$ (aquí aparece la nueva unidad, A, el amperio). La decisión de representar k_C como $1/4\pi\epsilon_0$ incluye la opción de colocar el factor 4π en esta ecuación (5) y así evitar la necesidad de hacerlo en las ecuaciones de Maxwell (2).

$$\text{Ley de Coulomb (MKSA o SI): } F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2} \quad (5)$$

Finalmente, en 1954, durante la 10ª Conferencia General de Pesos y Medidas (CGPM) se aprobó definitivamente el amperio como la cuarta unidad base, formalizando así el sistema MKSA (metro, kilogramo, segundo, amperio). Con la adición del amperio se podían definir coherentemente las magnitudes electromagnéticas y conservar los valores prácticos usados en la ingeniería eléctrica. El MKSA se convertiría, años después, en el esqueleto del SI.

Nacimiento del Sistema Internacional de Unidades (1960)

Seis años más tarde, en 1960, durante la 11ª CGPM se adoptó oficialmente el nombre: "Système International d'Unités" (SI). El nuevo sistema se basaba en siete unidades fundamentales: metro (m), kilogramo (kg), segundo (s), amperio (A), kelvin (K), mol y candela (Cd). Todas las demás unidades podían derivarse mediante productos de potencias enteras de estas. Se había creado, por primera vez en la historia, un sistema universal, coherente, racionalizado y metrológicamente estable. El SI unificaba las unidades magnéticas y eléctricas y utilizaba unidades conocidas como julio, vatio, newton, voltio, ohmio, faradio, etc... todas ellas derivadas de las siete unidades básicas (por ejemplo, $1 \text{ J} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$). Este sistema fue generalmente aceptado por los investigadores en la mayoría de las disciplinas científicas.

El SI moderno previo a la revisión cuántica: de 1983 a 2018

En 1983, el SI redefinió el metro fijando la velocidad de la luz a un valor exacto (con nueve cifras significativas): $c = 299\,792\,458$ m/s. Esto tuvo una consecuencia: la permitividad del vacío, ϵ_0 , antes experimental, quedó fijada por convenio. Durante décadas, el amperio seguía definiéndose mediante la fuerza entre conductores paralelos y, para que esa definición funcionara, se necesitaba asignar un valor exacto a μ_0 ($\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ H/m = $4\pi \times 10^{-7}$ N·A⁻²). Este esquema era funcional, pero no totalmente satisfactorio desde un punto de vista teórico, puesto que las constantes de la naturaleza debían ser medidas y no fijadas por convención.^[5]

La gran revolución de 2019: el SI basado en constantes fundamentales

El 16 de noviembre de 2018, la 26ª CGPM (en Versalles) aprobó la mayor revisión del SI desde 1960, la cual entró en vigor el 20 de mayo de 2019 (Día Mundial de la Metrología). A partir de entonces, la constante de Planck (h), la carga elemental (e), la constante de Boltzmann (k) y la constante de Avogadro (N_A) se fijaron con valores exactos y, como consecuencia, el kilogramo, amperio, kelvin y mol fueron redefinidos con base en estos números fijos, respectivamente.^[6]

En lugar de que la definición del amperio fijara el valor de μ_0 , en esta última revisión de 2019, el SI define el amperio en términos del valor fijo de e (basado en número de electrones por segundo). Como resultado, el valor de μ_0 debe determinarse experimentalmente. Del mismo modo, la permitividad del vacío $\epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2)$ también debe determinarse experimentalmente, tal como era antes de que se fijara c en 1983. El producto $\mu_0 \epsilon_0 = 1/c^2$ sigue siendo una relación exacta. Era razonable fijar el valor de e en lugar de μ_0 . En la década de 1990, el valor del amperio se realizaba mediante la ley de Ohm, mientras que el voltio y el ohmio, como unidades de voltaje y resistencia, se realizaba mediante el efecto Josephson y el efecto Hall cuántico, respectivamente.

Medición de μ_0 y otras constantes

El valor experimental de la permeabilidad en el vacío, μ_0 , se obtiene mediante la determinación experimental de la constante adimensional de estructura fina, α , para la frecuencia de transición del cesio-133, según la ecuación (6), donde la constantes h (constante de Planck), c (la velocidad de la luz en el vacío) y e (la carga elemental del electrón) son valores fijados por convenio desde la redefinición del SI en 2019.

$$(\mu_0)_{exp} = \frac{2h}{c e^2} (\alpha)_{exp} \quad (6)$$

$$h = 6,626\,070\,15 \times 10^{-34} \text{ J s (exacto).}$$

$$e = 1,602\,176\,634 \times 10^{-19} \text{ C (exacto).}$$

$$c = 299\,792\,458 \text{ m/s (exacto).}$$

A partir del valor de $\alpha = 7,297\,352\,5643 \times 10^{-3} \pm 1.1 \times 10^{-12}$, basado en el último ajuste cuatrienal de las constantes físicas fundamentales por el Comité de Datos del Consejo de Ciencia Internacional, se obtiene:

$$\mu_0 = 1,256\,637\,061\,262\,815 \pm 1,89 \cdot 10^{-6} \text{ H/m}$$

Esta constante, curiosamente muy próxima a $1/137$, recibe varias interpretaciones según el campo de la física que la define (física teórica, física de alta energía, cosmología o elec-

trodinámica cuántica), puesto que puede medirse de muchas modalidades.^[7]

Comparemos con el valor anterior fijado históricamente por el SI antes de 2019:

$$\mu_0^{(ant.)} = 4\pi \times 10^{-7} = 1,256\,637\,061\,435\,9173 \cdot 10^{-6} \text{ H/m}$$

La diferencia entre el valor calculado y el antiguo es

$$\Delta\mu_0 = \mu_0 - \mu_0^{(ant.)} \approx -1.73 \times 10^{-16} \text{ H/m}$$

Es decir, una diferencia relativa de $\approx -1.38 \times 10^{-10}$ (≈ -0.14 partes por mil millones). Esa desviación queda dentro de la incertidumbre de μ_0 .

En definitiva, el valor medido actual de μ_0 es prácticamente igual al antiguo valor definido (exacto) de $4\pi \times 10^{-7}$ dentro de la incertidumbre ligada a la constante de estructura fina α . Esto restauró la visión original de Giorgi de 1901. Más de un siglo después, la filosofía original de Giorgi había triunfado.

El hecho de que μ_0 sea un valor experimental (variable por medición) implica que los factores de conversión entre SI y EMU ya no son exactamente equivalentes y varían con el nuevo valor de la nueva medición. No obstante, en la práctica la diferencia es insignificante, del orden de 10^{-9} ; esto es mucho menor que la incertidumbre total en cualquier medición magnética.^[8]

La frecuencia de transición hiperfina del cesio-133, $\Delta\nu_{cs}$, expresada en hertzios, Hz, se fijó para definir al segundo desde 1967. La eficacia luminosa de la radiación monocromática de frecuencia 540×10^{12} Hz, K_{cd} , y la velocidad de la luz en el vacío, c , también se fijaron por la CGPM, para definir las unidades candela y metro, en 1979 y 1983, respectivamente, junto con la constante de Boltzmann, k , y el número de Avogadro, N_A .^[9]

$$\Delta\nu_{cs} = 9\,192\,631\,770 \text{ Hz (exacto).}$$

$$K_{cd} = 683 \text{ lm/W (exacto).}$$

$$k = 1,380\,648 \times 10^{-23} \text{ J/K (exacto).}$$

$$N_A = 6,022\,140\,8 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} \text{ (exacto).}$$

Una constante importante en magnetismo es el Magnetón de Bohr, ecuación (7a), donde m_e es la masa del electrón, la cual no está fijada, por lo que μ_B dependerá de su medición. Ésta se determina experimentalmente a partir de la constante de Rydberg, R_∞ , y α , ecuación (7b).

$$\mu_B = eh/4\pi m_e \quad (7a)$$

$$m_e = 2hR_\infty / c\alpha^2 \quad (7b)$$

Los campos magnéticos y sus unidades

Podemos definir tres términos o vectores magnéticos para describir la magnetización de un material:

H = Campo magnético aplicado mediante imanes permanentes o bobinas eléctricas (electroimanes), etc.

M = Magnetización del medio o del material bajo el campo magnético.

B = Inducción magnética o densidad de flujo magnético. También lo denominaremos, en el presente artículo, como campo

magnético total, ya que comprende al aplicado (o externo, H) y al generado por la magnetización, M , inducida por H .

Breves consideraciones conceptuales

Cuando se aplica un campo magnético, H , a un material, éste responde produciendo un campo magnético (ΔH) inducido, la magnetización, M . Esta magnetización es una medida del momento magnético por unidad de volumen de material, aunque también se puede expresar por unidad de masa. El campo magnético que se aplica al material se llama campo aplicado (H). Un parámetro importante es la inducción magnética (B), que es el flujo total de líneas de campo magnético que atraviesa un área de sección transversal unitaria del material.^[10] Estas líneas de fuerza corresponden tanto al campo magnético aplicado, H , como a las que se generan por la magnetización del material presente, M , lo que nos permite escribir la relación:

$$B \equiv H + M \quad (8)$$

En la Figura 1 se esquematizan todos estos hechos. En 1a, se representa una esfera imaginaria en el vacío entre dos polos de un imán. El número de líneas que pasan por esa unidad de volumen representa la intensidad del imán, el campo H . En 1b y 1c se ha reemplazado la esfera imaginaria por una que contiene un material, pudiendo observar como la magnetización del material, M , deforma las líneas del campo magnético: incrementando el número de líneas que atraviesan la esfera (1b) o disminuyéndolo (1c). Esto es, incrementando el campo magnético ($\Delta H > 0$) en el interior del material, $B > H$, o disminuyéndolo ($\Delta H < 0$), $B < H$. En el primer caso se trata de un material paramagnético, mientras que en el segundo se trata de uno diamagnético. Esta variación ΔH dentro del material es la magnetización del mismo, $M = \Delta H$.

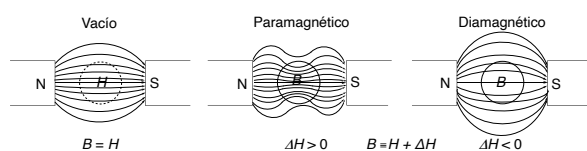


Figura 1. Visualización del campo aplicado H (izquierda) en función del número de líneas por unidad de volumen (esfera imaginaria) y de la inducción magnética B en presencia de materiales para- y diamagnéticos (ver texto).

En este sentido, la inducción magnética, B , la podemos considerar como el campo magnético total dentro del material o campo interno, el cual es el que realmente soporta el material. Por esta razón, es bastante común referirse a la inducción magnética como el campo B . Obviamente, en el vacío (en ausencia de material, $M = 0$), B y H coinciden numéricamente, aunque tengan diferentes unidades. De hecho, la inducción magnética, B , tiene las unidades gauss, G, y Tesla, T, ($1\text{T} = 10^4\text{G}$) en los sistemas CGS y SI, respectivamente. Mientras que, para el campo H usamos las unidades oersted, Oe, y amperios/metro, A/m, ($1\text{Oe} = 79,58\text{A/m}$) para el CGS y SI, respectivamente. Estas últimas unidades crean cierta sorpresa y confusión. Ello se debe a las dos formas de crear o definir teóricamente el campo magnético, H . En el sistema CGS es creado por *polos magnéticos ficticios*, mientras que, en el SI lo crea una *corriente eléctrica*. La relación entre el *polo magnético* y la *corriente eléctrica* solo afecta al sistema de unidades. En el caso del SI, se considera un bucle o espira de radio R y corriente I (Figura 2a).

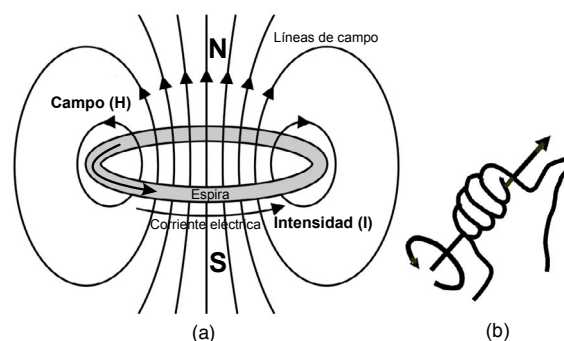


Figura 2. (a) Una espira con corriente eléctrica de intensidad I creando líneas de campo magnético perpendiculares al plano de esta y pasando por el centro de la espira. (b) Regla de la mano derecha con el pulgar indicando la dirección del campo y el resto de los dedos indicando la dirección de la corriente.

Como resultado, se produce un campo magnético, H , en el centro del bucle, dado por la ecuación (9), y un momento magnético, μ , dado por la ecuación (10). Por lo que, las unidades de H en el SI son A/m, y la del momento magnético A·m².

$$H = I/2\pi R \text{ [Amperios/metro, A/m]} \quad (9)$$

$$m = I \cdot \text{Área} \text{ [A·m}^2\text{]} \quad (10)$$

Magnetización y susceptibilidad magnética

La intensidad de la magnetización, M , es el momento magnético por unidad de volumen (magnetización volúmica). Este momento magnético total es la suma vectorial de todos los posibles momentos magnéticos por metro cúbico dado por la ecuación (11a). Los momentos magnéticos surgen de las corrientes circulantes, las cuales las podemos imaginar como pequeñas espiras de tamaño atómico con sus electrones orbitando en el interior del material. De forma análoga a la Figura 2a, el momento es normal al plano del bucle y en una dirección tal que el campo H generado por la corriente pasa a través del bucle de acuerdo con la regla de la mano derecha (Figura 2b).

$$M = \frac{\sum_i \mu_i}{\text{unidad de volumen}} = \frac{\mu}{V} \text{ [A/m]} \quad (11a)$$

En el sistema SI, las unidades de la magnetización volúmica son [A·m²] por metro cúbico (A·m²/m³ = A/m), lo mismo que el del campo magnético H . Los investigadores rara vez conocen los volúmenes de sus muestras, por lo que en general usan sus masas. Por esta razón, la magnetización por unidad de masa M_m es más útil.^[11] Se obtiene dividiendo la magnetización volúmica, $M = M_v$, por la densidad, ρ , de la muestra expresada en unidades del SI, kilogramos por metro cúbico, ecuación (11b).

$$M_m \text{ [A m}^2 \text{ kg}^{-1}\text{]} = \frac{M_v \text{ (A m}^{-1}\text{)}}{\rho \text{ (kg m}^{-3}\text{)}} \quad (11b)$$

Se puede obtener la magnetización molar, M_{mol} , multiplicando la magnetización másica por el peso molecular, PM , del compuesto (11c).

$$M_{mol} \text{ [A m}^2 \text{ mol}^{-1}\text{]} = M_m \text{ (A m}^2 \text{ kg}^{-1}\text{)} \cdot PM \text{ (kg mol}^{-1}\text{)} \quad (11c)$$

Obviamente, cuanto mayor sea el campo externo aplicado, H , mayor magnetización, M , del material. En caso de querer caracterizar las propiedades de magnetización de los compuestos es importante eliminar la dependencia del campo

aplicado dividiendo la ecuación (8) por H . Obtenemos así la ecuación (12a), donde la relación M/H se denomina susceptibilidad magnética, χ , ecuación (12b), y B/H es la permeabilidad magnética, κ , (12c). Tanto la permeabilidad como la susceptibilidad nos indican la capacidad del medio en magnetizarse, lo cual afecta a B pero no a H .

$$\frac{B}{H} \equiv 1 + \frac{M}{H} \quad (12a) \quad \chi = \frac{M}{H} \quad (12b) \quad \kappa = \frac{B}{H} \quad (12c)$$

La susceptibilidad magnética, χ , suele ser la cantidad primaria medida para un nuevo compuesto. La susceptibilidad volúmica se define como la relación entre la magnetización volúmica de la muestra y el campo H aplicado, en el límite de un campo muy pequeño, ecuación (13a):

$$\chi_v = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M_v}{H} \quad (\text{adimensional}) \quad (13a)$$

La susceptibilidad volúmica es adimensional porque las unidades de la magnetización volúmica, M_v , y el campo magnético, H , son las mismas (ecuaciones 9 y 11a). Sin embargo, en el laboratorio, medimos la magnetización en unidades de masa y calculamos la magnetización por mol, por lo que las correspondientes susceptibilidades másica y molar se definen según (13b) y (13c) en el SI, cuyas unidades son las de la inversa de la densidad y del volumen molar, respectivamente.

$$\chi_m [\text{m}^3 \text{kg}^{-1}] = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M_m}{H} \quad (13b)$$

$$\chi_{mol} [\text{m}^3 \text{mol}^{-1}] = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M_{mol}}{H} \quad (13c)$$

La permeabilidad κ (también representada por μ) relaciona B y H , ecuación (12c), y tiene las mismas unidades que la permeabilidad en el vacío, μ_0 , [henrios/metro, H/m].

Es interesante observar la conexión entre las unidades magnéticas del SI y la energía. Un momento magnético, μ , en presencia del campo B , experimenta una fuerza que tiende a alinear al momento paralelamente al campo. La energía U de interacción entre el momento, μ , y el campo, B , viene dada por la ecuación de Zeeman (14), siendo la energía mínima cuando el momento y el campo son paralelos.

$$U = -\mu \cdot B \quad (14)$$

A partir de esta ecuación podemos observar que las unidades del momento μ [$\text{A} \cdot \text{m}^2$] también pueden expresarse como la relación entre la energía y el campo ($\mu = U/B$), un julio por tesla: [$\text{A} \cdot \text{m}^2 = \text{J/T}$].

Analicemos brevemente las unidades de los parámetros anteriores en el sistema CGS-EMU. En la ecuación (15) se indican las magnetizaciones volúmica, másica y molar, respectivamente, las cuales se determinan mediante el mismo procedimiento utilizado anteriormente para el SI, con los siguientes resultados:

$$M_v [\text{emu cm}^{-3}] = \frac{\sum_i \mu_i}{\text{unidad de volumen}} = \frac{\mu}{V} \quad (15a)$$

$$M_m [\text{emu g}^{-1}] = M_v (\text{emu} \cdot \text{cm}^{-3}) / \rho (\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}) \quad (15b)$$

$$M_{mol} [\text{emu mol}^{-1}] = M_m (\text{emu} \cdot \text{g}^{-1}) \cdot PM (\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}) \quad (15c)$$

En el sistema CGS, es bastante habitual expresar la magnetización volúmica en unidades de [emu/cm^3]. Esta es una nomenclatura desafortunada, ya que induce a creer que el [emu] es la unidad del momento magnético en el CGS-EMU, y no lo es. Tan solo se quiere indicar que la magnetización se da en el sistema EMU, con el cm^3 identificando que se trata de la magnetización volúmica. Del mismo modo, las magnetizaciones másicas y molares en unidades CGS se escriben comúnmente como " $\text{emu} \cdot \text{g}^{-1}$ " y " $\text{emu} \cdot \text{mol}^{-1}$ ", respectivamente, o también como " $\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{G}$ " y " $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{G}$ ". Compárense con las del SI (ecuaciones 11a-c). Alternativamente, la magnetización molar es comúnmente expresada en Magnetones de Bohr, μ_B , según la equivalencia: $\mu_B = 5585 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{G}$, la cual se obtiene al sustituir los valores de las constantes del sistema CGS en la ecuación (7a).

La unidad del momento magnético en el CGS la podemos determinar a partir de la ecuación de Zeeman (14). Esto es $\mu = U/B$ [ergios/G], la cual es 1000 veces más pequeño que la unidad del momento en el SI [$\text{A} \cdot \text{m}^2$] o [J/T] tal como se indica en (16).

$$1 \frac{\text{erg}}{\text{G}} = \frac{10^{-7} \text{J}}{10^{-4} \text{T}} = 10^{-3} \text{A} \cdot \text{m}^2 \quad (16)$$

Es interesante observar la ecuación (10), que define el momento como producto de las corrientes por el área (*intensidad-área*), y preguntarse ¿se obtiene el mismo resultado para los sistemas CGS y SI según esta definición? Rápidamente nos damos cuenta de que $1 \text{ A} \cdot \text{cm}^2 \neq 10^{-3} \text{ A} \cdot \text{m}^2$, puesto que $1 \text{ m}^2 = 10^4 \text{ cm}^2$. La desigualdad surge porque la unidad de corriente CGS-EMU no es el amperio, sino el "abamperio", igual a 10 amperios.¹ Este ejemplo revela una grave desventaja del sistema gaussiano; sus unidades para variables eléctricas CGS-ESU (carga, corriente, voltaje y resistencia, las cuales no vamos a discutir aquí) son todas diferentes de las unidades SI en el uso diario.^[12] Por lo tanto, la magnetización volúmica CGS tiene unidades de [$\text{erg G}^{-1} \text{ cm}^{-3}$], generalmente expresadas como [emu/cm^3].

Las susceptibilidades másicas y molares se definen en términos de M_g y M_{mol} como anteriormente.

$$\chi_m [\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}] = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M_m}{H} \quad (18a)$$

$$\chi_{mol} [\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}] = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M_{mol}}{H} \quad (18b)$$

Las unidades para las susceptibilidades másicas y molares son una vez más las de la inversa de la densidad y del volumen molar, respectivamente, tal como se puede observar para las correspondientes susceptibilidades del SI [ver ecuación (13)].

Relaciones entre B, H y M

Se han propuesto dos expresiones para la inducción magnética B en un medio polarizable. La de Arnold Sommerfeld (1948)

¹ El CGS se subdividió en dos subsistemas: CGS-EMU (preferido en estudios electromagnéticos y materiales magnéticos) y CGS-ESU (usado históricamente para cálculos de electrostática). Las unidades eléctricas del sistema EMU contienen al prefijo "ab", de absoluto –abamperio (o Biot), abVoltio, abCulombio, etc.– mientras que las del ESU conllevan el prefijo "estat", de estático –estatamperio (o Franklin), estatVoltio, etc.–. El factor de conversión entre estas unidades es el valor de la velocidad de la luz, $c \approx 3 \cdot 10^{10} \text{ cm/s}$, por lo que son unidades con varios órdenes de magnitud diferente: $1 \text{ abA} = c \cdot 1 \text{ estatA}$, $1 \text{ abV} = (1/c) \cdot 1 \text{ estatV}$, $1 \text{ abC} = c \cdot 1 \text{ estatC}$, etc. Su conversión al SI es: $1 \text{ abA} = 10 \text{ A}$, $1 \text{ abV} = 10^{-8} \text{ V}$, $1 \text{ abC} = 10 \text{ C}$.

definido según ecuación (17) y la de Arthur Kennelly (1936), definido según ecuación (18). Mientras que la convención de Sommerfeld ha sido adoptada por la Unión Internacional de Física Pura y Aplicada (IUPAP) y generalmente usada en el sistema CGS, la de Kennelly es seguida tradicionalmente por los ingenieros eléctricos y usada en el SI.

$$B = H + 4\pi M; [B \rightarrow G, H \rightarrow \text{Oe}, M \rightarrow \text{emu/cm}^3] \quad (17)$$

$$B = \mu_0(H+M); [B \rightarrow T, H \rightarrow \text{A/m}, M \rightarrow \text{A/m}] \quad (18)$$

En el SI, la constante μ_0 (permeabilidad del vacío) es igual a $4\pi \times 10^{-7}$ henrios/m. La unidad de B es el tesla, por lo que $\mu_0 H$ y $\mu_0 M$ vienen en teslas.

En el sistema CGS, μ_0 es igual a la unidad, lo que hace que B , H y M sean numéricamente equivalentes (ecuación 17); sin embargo, cada uno mantiene diferentes unidades: Gauss, Oersted y emu/cm^3 (o $\text{erg/G}\cdot\text{cm}^3$), respectivamente.

Aquí radica gran parte de la confusión, porque en CGS, B y H se usan indistintamente, y es bastante común encontrar

artículos de investigación con el hecho incorrecto de asignar la unidad gauss a H (o su equivalencia en teslas). Sin embargo, dado que numéricamente son iguales, el error es solo conceptual y no genera confusión respecto a los cálculos.

En el caso del sistema SI las conversiones de unidades dan valores numéricamente diferentes. Por ejemplo, el campo de la tierra es 0,4 Gauss o 0,4 Oe. Sin embargo, en SI tenemos:

$$\text{Para } B: 0,4 \text{ G (CGS)} = 4 \cdot 10^{-5} \text{ T (SI)}$$

$$\text{Para } H: 0,4 \text{ Oe (CGS)} = 31,8 \text{ A/m (SI)}$$

Como se puede ver en este ejemplo, B y H nos dan el mismo valor en el sistema CGS, mientras que en el SI los valores son diferentes. Además, es mucho más fácil convertir gauss a tesla (moviendo el punto decimal 4 lugares) que convertir Oersted a A/m. Por lo tanto, no es demasiado sorprendente que esta sea la práctica habitual utilizada por los investigadores en magnetismo para expresar todos los campos (B y H) en tesla o gauss.

Tabla 1. Principales unidades para los sistemas CGS y SI con su factor de conversión.

(A= amperio; cm = centímetro; emu = unidad electromagnética; g = gramo; kg = kilogramo; m = metro; H = henry; T = Tesla; G = gauss; Wb = weber; Mx = maxwell; erg = ergio; J = julio; N = newton)

Termino Magnético	Símbolo	CGS	SI	Factor de conversión CGS \rightarrow SI
Inducción Magnética	B	G	T Wb/m ²	10 ⁻⁴
Campo Magnético	H	Oe	A/m	(10 ³ /4 π) ^b
Magnetización Volúmica	$M=M_v$	erg/G·cm ³ (emu/cm ³)	A/m J/T·m ³	10 ³
Magnetización Volúmica	4 πM	Gauss (G)	A/m	(10 ³ /4 π) ^b
Magnetización Másica	M_m	emu/g	A·m ² /Kg Wb·m/Kg	1 4 π 10 ⁻⁷
Momento Magnético	μ	erg/G (emu)	A·m ² J/T	10 ⁻³
Polarización Magnética	$J = \mu_0 M$	G	T Wb/m ²	10 ⁻⁴
Susceptibilidad Volúmica	c_v	Adimensional (emu/cm ³)	Adimensional H/m = Wb/A·m	4 π (4 π) ² 10 ⁻⁷
Susceptibilidad Másica	c_m	cm ³ /g (emu/g)	m ³ /Kg H·m ² /Kg	4 π 10 ⁻³ (4 π) ² 10 ⁻¹⁰
Susceptibilidad Molar	c_{mol}	cm ³ /mol (emu/mol)	m ³ /mol H·m ² /mol	4 π 10 ⁻⁶ (4 π) ² 10 ⁻¹³
Permeabilidad	k	Adimensional (emu)	H/m Wb/A·m N/A ²	(4 π ·10 ⁻⁷) ^b
Flujo magnético	Φ	Mx G·cm ²	Wb T m ² = V·s	10 ⁻⁸

^{||} El término "emu" es una indicación del sistema CGS-EMU y no es una unidad en el sentido convencional. Algunas veces se usa como momento magnético (emu = erg/G) y otras toma las dimensiones de volumen (emu = cm³). ^b Para el cálculo del factor de conversión se ha usado el valor de $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ H/m} = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Wb/A}\cdot\text{m}$. Sin embargo, puesto que desde 2019 μ_0 es un valor experimental, el factor de conversión debería contener su valor, $\{\mu_0\}$. En este sentido el factor de conversión para las siguientes magnitudes sería: permeabilidad, $k \rightarrow [\{\mu_0\}H/m]$; campo magnético, $H \rightarrow [10^{-4}/\{\mu_0\} \text{ A/m}]$ y magnetización volúmica, $4\pi M \rightarrow [10^{-4}/\{\mu_0\} \text{ A/m}]$, donde $\{\mu_0\}$ se refiere sólo al valor numérico de μ_0 (sin unidades).

En realidad, cuando se indica un campo magnético aplicado de, digamos, 0,1 T, realmente se quiere decir $\mu_0 H = 0,1$ T en el SI. Sin embargo, esto rara vez se indica. Nótese que, en el SI, B y H tienen dimensiones y valores numéricos diferentes (tesla y A/m, respectivamente); pero B y $\mu_0 H$ (tesla) sí tienen las mismas dimensiones, dado que $\mu_0 \equiv \text{H/m} \equiv \text{N/A}^2$.

El producto $\mu_0 M$ se denomina polarización magnética, también denominada intensidad de la magnetización (expresada en tesla) y se representa por la letra J ($=\mu_0 M$), por lo que la expresión (18) se escribe a veces como (19).

$$B = \mu_0 H + J \quad (19)$$

Ambas convenciones (ecuaciones (17-19)) no presentan conflicto si se reconoce que la magnetización, M , y la polarización magnética, J , son magnitudes diferentes, aunque son la misma en el sistema CGS.

A partir de la ecuación (17), vemos que la magnetización volumétrica también tiene las unidades de oersted (como H), por lo que $1 \text{ Oe} = 1 \text{ erg G}^{-1} \text{ cm}^{-3} = 1 \text{ emu cm}^{-3}$. Sin embargo, también se puede observar que $4\pi M$ tiene la unidad de gauss (como B). Esta heterogeneidad de unidades no ocurre en el sistema SI, ecuación (18).

Tal como hemos indicado en la ecuación (12c), otro parámetro que demuestra el tipo de material magnético y su afectación por el campo magnético es la permeabilidad (κ) de un material. Al dividir las ecuaciones (17) y (18) por el campo aplicado, H , como en (12a), obtenemos las ecuaciones (20) y (21), respectivamente, para la permeabilidad magnética, κ , pudiendo observar su relación directa con la susceptibilidad.

$$\kappa(\text{CGS}) = 1 + 4\pi\chi_{\text{CGS}} \quad (20)$$

$$\kappa(\text{SI}) = \mu_0(1 + \chi_{\text{SI}}) \quad (21)$$

En el sistema CGS, la permeabilidad tiene las mismas unidades que la susceptibilidad (adimensional); mientras que, en el SI tiene las mismas unidades que μ_0 ($\frac{\text{H}}{\text{m}} \equiv \frac{\text{N}}{\text{A}^2} \equiv \frac{\text{Wb}}{\text{A}\cdot\text{m}}$ con $\text{Wb} = \text{weber}$). Todo lo anterior queda resumido resumido en la Tabla 1.^[5]

Algunas consideraciones sobre la equivalencia entre sistemas

Tal como se indica en la Tabla 1, las unidades para medir el flujo magnético, Φ , [el cual es el producto de la densidad de flujo magnético, B , y área, A : $\Phi = B \cdot A$] es la unidad weber (Wb) en el SI y el maxwell (Mx) en el sistema CGS. El factor para convertir Wb en Mx es de 10^8 , porque el flujo es el producto de la densidad de flujo y el área, y el área es el cuadrado de la unidad de distancia y por lo tanto 10^4 (el cuadrado de 10^2 , factor de conversión de distancia lineal, *i.e.*, metros en centímetros) y por 10^4 por la conversión tesla en gauss.

Nótese que, el factor de conversión entre la susceptibilidad del SI y del CGS, además de las potencias de 10 que surgen de la conversión de unidades base ($1 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} = 10^{-6} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$), aparece el factor 4π , debido a la existencia de este factor en la ecuación (17) y su ausencia en la ecuación (18). Por esta razón, en el sistema CGS, la susceptibilidad molar en unidades de $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ es igual a $4\pi \cdot 10^{-6}$ veces la susceptibilidad molar del SI, ecuación (22).

$$\chi_{\text{mol}}(\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}) = 4\pi \cdot 10^{-6} \chi_{\text{mol}}(\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}) \quad (22)$$

Terminamos esta sección indicando las siguientes sugerencias: (a) aquellos autores que ven un inconveniente expresar el

campo magnético, H , en A/m, podrían usar teslas si el campo lo expresan como el producto $\mu_0 H$. (b) Similarmente, pueden usar teslas para la magnetización, M , si esta se expresa como $\mu_0 M$ o como polarización magnética, J . En ambos casos se puede transformar teslas en gauss ($1 \text{ T} = 10^4 \text{ G}$).

Diferencias entre H y B

La intensidad del campo magnético (campo aplicado), H , y la inducción magnética, B , son conceptos relacionados pero distintos en electromagnetismo. Tal como indica la ecuación (12c) la relación B/H se denomina permeabilidad magnética, κ , la cual está relacionada con la susceptibilidad mediante las ecuaciones (20) y (21). En general, la susceptibilidad de los paramagnéticos habituales (a temperaturas no muy bajas) es pequeña ($\chi \ll 1$), por lo que, en el sistema CGS, $\kappa \rightarrow 1$, con lo que B y H presentan valores similares, aunque conceptualmente diferentes (en el SI, $\kappa \rightarrow \mu_0$, y $B \approx \mu_0 H$). Sin embargo, B y H pueden ser muy diferentes a temperaturas extremadamente bajas o en presencia de materiales ferromagnéticos. Como ejemplo, la Figura 3a muestra un solenoide de n espiras de radio R e intensidad I en el vacío, el cual crea el campo magnético H . En la Figura 3b se ha introducido un material ferromagnético (como un cilindro de hierro), el cual presenta una magnetización, M , que puede superar con creces al propio campo H , generando un campo total B muchísimo más grande que el aplicado H . En esta idea se basa la construcción de potentes electroimanes.

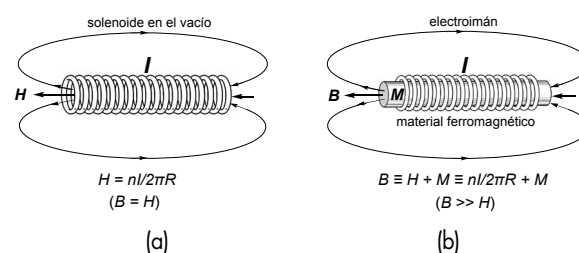


Figura 3. (a) Campo H generado por un solenoide en el vacío. (b) Campo B generado por un electroimán usando el mismo solenoide que (a) y un material ferromagnético (ver texto).

A continuación, se revisan y comparan algunos conceptos implicados.

Intensidad del campo magnético (H)

(a) Representa la fuerza que genera un campo magnético en un punto dado.

(b) En el sistema SI, se mide en Amperios por metro (A/m), mientras que en el sistema CGS se mide en Oersted (Oe).

(c) En el sistema SI, se define en términos de corriente, como en un solenoide largo con n vueltas por metro y una corriente de I amperios (Figura 1a y 3a).

(d) En el sistema CGS, se define en términos de monopolos magnéticos teóricos.

Densidad de flujo magnético (B)

(a) Representa la cantidad de flujo magnético que atraviesa una unidad de área perpendicular al campo (suma del efecto de todos los campos presentes, M y H).

(b) En el sistema SI, se mide en tesla (T), mientras que en el sistema CGS se mide en gauss (G).

(c) En el sistema SI, se relaciona con H y la magnetización (M) mediante la ecuación $B = \mu_0(H + M)$.

(d) En el sistema CGS, la relación es $B = H + 4\pi M$.

¿Son B y H lo mismo en el vacío?

En el sistema CGS-EMU, B es lo mismo que H en el vacío, tanto dimensional como numéricamente, a pesar de que se les asignan nombres de unidades diferentes (gauss para B y oersted para H), puesto que $M = 0$ en el vacío [ecuación 17].

En el SI, $B = \mu_0 H$ en el vacío ($M = 0$, ecuación (18)), con lo que antes de 2019, con μ_0 fija, la relación era exacta. En cambio, con el SI revisado (después de 2019), μ_0 es experimental; por tanto, la relación es conceptualmente distinta. B es el campo físico fundamental asociado a fuerzas sobre cargas en movimiento, mientras que H es un campo auxiliar definido operativamente mediante materiales y circuitos. En ausencia de materia (en el vacío), ambos describen el mismo fenómeno físico (el mismo campo), aunque con distintas convenciones dimensionales. Tal como defendía Birge (1935), “*Las dimensiones no determinan la naturaleza de una cantidad física; definen nuestro modo de describirla*”.

El magnetismo: el “antisistema”

Aunque el SI ha triunfado casi por completo en muchos campos de la física y la ingeniería, el magnetismo sigue siendo una excepción notable, donde el sistema de unidades electromagnéticas (EMU) de centímetros-gramos-segundo (CGS), tal como lo formularon William Thomson, James Clerk Maxwell y otros, sigue siendo de uso bastante común para la expresión de datos magnéticos. Si comparamos el centímetro y el gramo del sistema CGS con el metro y el kilogramo del sistema SI (100 y 1000 veces más grandes, respectivamente) no es de extrañar que los factores de conversión entre ambos sistemas sean de varios órdenes de magnitud. Por ejemplo, la fuerza tiene las dimensiones de masa·longitud/tiempo, por lo que en el CGS la unidad de fuerza, la dina, es $1000 \times 100 = 10^5$ veces más pequeña que el Newton, la unidad de fuerza en el SI. La unidad de energía en el CGS es el ergio, una dina por cm, por lo que es $10^5 \times 10^2 = 10^7$ veces más pequeña que el julio, la unidad de energía en el SI. Todo lo cual, produce una cierta incomodidad trabajar con unos números tan pequeños, por lo que los investigadores en magnetismo consideraban al SI, en palabras de **Olivier Kahn**: “*El SI es el sistema legal, pero la legalidad no es ciencia. De hecho, este sistema es particularmente inapropiado en el magnetismo molecular y, como la mayoría de los investigadores involucrados en este campo, preferimos usar el sistema CGS-EMU*” (Olivier Kahn, 1999).^[13] Esta resistencia al SI persiste en algunos ámbitos actualmente.

Convivencia conflictiva: SI vs. CGS-EMU

Esta persistencia del magnetismo en el sistema CGS-EMU se debe a una combinación de factores históricos, filosóficos y prácticos relacionados con la tradición y la comodidad percibida en el manejo de datos magnéticos. Algunos de ellos se indican a continuación.^[14]

Razones históricas: El magnetismo ha usado el CGS durante más de un siglo (≈1870–1970). Toda la teoría electromagnética —desde Maxwell hasta Landau y Lifshitz— se formuló en unidades CGS. En este sistema los campos B y H tienen la mis-

ma dimensión y se expresan en unidades familiares (gauss y oersted, respectivamente). Muchísimos artículos clásicos, tablas y parámetros de materiales magnéticos se publicaron en CGS. Cambiar al SI implica retraducir medio siglo de conocimiento acumulado, algo poco práctico para comunidades muy consolidadas.

Simplicidad matemática en magnitudes magnéticas: En el sistema CGS-EMU, las relaciones fundamentales del magnetismo son más “sencillas”. Los investigadores en magnetismo siguen valorando la simplicidad conceptual de la relación $B = H + 4\pi M$ dentro del marco CGS. Aquí, todas las magnitudes (B , H , M) tienen la misma dimensión, y χ (susceptibilidad) es adimensional. En cambio, en el SI, en la ecuación $B = \mu_0(H + M)$ aparece μ_0 (con unidades) y, por tanto, las magnitudes tienen diferentes dimensiones: B (tesla = $\text{N}\cdot\text{A}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$), H y M ($\text{A}\cdot\text{m}^{-1}$). Es decir, en el CGS-EMU, la magnetización y el campo se comparan directamente, mientras que en el SI hay que pasar a través de μ_0 .

Magnitudes más accesibles: En magnetismo del estado sólido los valores de magnetización en CGS suelen ser del orden de centenas o miles de gauss, lo que resulta numéricamente cómodo. En cambio, en el SI, esas magnitudes se convierten en valores con muchos ceros o exponentes. Por ejemplo, la imanación de saturación del hierro en el CGS es 1.700 G, mientras que en el SI es $\approx 1,7 \text{ T}/\mu_0 \approx 1,36 \cdot 10^6 \text{ A/m}$. Esta diferencia dimensional hace que se prefiera seguir usando gauss y oersted.

Calibrado de instrumentación: Muchos instrumentos de laboratorio (magnetómetros, susceptímetros, etc.) históricamente se calibraron en unidades CGS. Aunque los modelos modernos ofrecen conversión automática al SI, la mayoría de las bases de datos y curvas de calibración originales permanecen en gauss y emu. Cambiar al SI implicaría reescalar todas las mediciones históricas y perder comparabilidad con décadas de datos.

No obstante, su uso y convivencia con el SI también produce ciertos inconvenientes, tales como:

Conversión no trivial SI ↔ CGS: los factores irracionales y la variabilidad experimental de μ_0 complican la equivalencia exacta entre ambos sistemas. El SI implica un tratamiento distinto de los campos magnéticos y requiere la introducción de la permeabilidad del vacío, lo cual no ocurre en el CGS-EMU, ya que esta constante es igual a la unidad.

Confusión entre B y H : en el CGS son dimensionalmente iguales (aunque con diferentes unidades: gauss y oersted), mientras que en SI no lo son.

Errores por el uso de “emu” como unidad: “emu” no es una unidad, sino simplemente un indicador de unidades electromagnéticas. A pesar de ello, y que es erróneo su uso como tal, expresiones como “emu/cm³” para el momento magnético, μ , son bastante comunes (en lugar de sus verdaderas unidades “erg·G⁻¹” o “erg·Oe⁻¹”). Similarmente, la susceptibilidad volúmica a menudo se expresa en “emu” o “emu por centímetro cúbico”, un estado de confusión que se origina por el mal uso de “emu” como unidad para el momento magnético.

Ambigüedad entre M y $4\pi M$: la coexistencia de dos formas numéricamente distintas para la magnetización causa errores frecuentes. Así, por ejemplo, la magnetización (momento magnético por unidad de volumen) se expresa comúnmente como

M en “emu por centímetro cúbico” o como $4\pi M$ en unidades de gauss (véase ecuación 17). Son dimensionalmente equivalentes, pero difieren numéricamente en el factor 4π . Esta doble definición a menudo conduce a malentendidos y errores. Algo similar ocurre en el SI en donde, por motivos prácticos, muchos investigadores usan teslas como la unidad de H (la cual podrían usar si en su lugar escribieran $\mu_0 H$), o se refieren erróneamente a B en lugar de H .

Conclusiones

La historia de los sistemas de unidades revela cómo la física, la ingeniería, la matemática y la filosofía se entrelazan en la construcción de un lenguaje universal para describir el mundo. Esta historia la podemos resumir en estas cinco aportaciones:

(a) El CGS aportó la primera visión absoluta y coherente del electromagnetismo.

(b) Heaviside introdujo criterios de elegancia y racionalidad.

(c) Giorgi concibió la estructura tetradimensional y la filosofía que subyace al SI moderno.

(d) El SI de 1960 unificó la metrología global.

(e) El SI de 2019 cerró el círculo, arraigando todo el sistema en constantes fundamentales de la naturaleza y la medición experimental de μ_0 .

En este proceso, el magnetismo ha jugado un papel singular. Ha sido campo de batalla entre tradiciones, fuente de confusiones y escenario de debates ontológicos sobre la identidad física de B y H . El magnetismo, con su resistencia histórica al SI, nos recuerda que las unidades no son meros instrumentos de cálculo, sino que son parte del andamiaje conceptual con el que entendemos el mundo. La historia de su evolución es, en último término, la historia de nuestra búsqueda de un lenguaje perfecto para la naturaleza.

Finalmente, y para ser positivista, la coexistencia de CGS y SI en el magnetismo, lejos de ser un inconveniente insalvable, puede ser una fortaleza si se utiliza con comprensión rigurosa y precisión. El CGS conserva su valor pedagógico y práctico, mientras que el SI garantiza coherencia metrológica global.

Bibliografía

- [1] J. Crangle, M. Gibbs, *Phys. World* **1994**, 7, 31-32, <https://doi.org/10.1088/2058-7058/7/11/29>.
- [2] P. Quincey, R. J. C. Brown, *Metrologia* **2017**, 54, 454-460, <https://doi.org/10.1088/1681-7575/aa7160>.
- [3] G. Giorgi, *Atti dell'Associazione Elettrotecnica Italiana* **1901**, 5, 402-418, <https://doi.org/10.1007/BF02709460>.
- [4] G. Giorgi, *IEEE Magn. Lett.* **2018**, 9, 1205106, <https://doi.org/10.1109/LMAG.2018.2859658>.
- [5] A. Thompson, B.N. Taylor, *NIST Special Publication 811*, Gaithersburg **2008**.
- [6] *The International System of Units*, Bureau Int. des Poids et Mesures, Sèvres, France, **2019**.
- [7] R. S. Davis, *Am. J. Phys.* **2017**, 85, 364, <https://doi.org/10.1119/1.4976701>.
- [8] R. B. Goldfarb, *IEEE Magn. Lett.* **2017**, 8, 1110003, <https://doi.org/10.1109/LMAG.2017.2777782>.
- [9] R. B. Goldfarb, *IEEE Magn. Lett.* **2018**, 9, 1205905, <https://doi.org/10.1109/LMAG.2018.2868654>.
- [10] R. B. Goldfarb, en *Magnetic Measurement Techniques for Materials Characterization*, (Eds.: V. Franco, B. Dodrill), Springer, Cham, **2021**, 3-11, https://doi.org/10.1007/978-3-030-70443-8_1.
- [11] C. P. Landee, M. M. Turnbull, *J. Coord. Chem.* **2014**, 67, 375-439, <https://doi.org/10.1080/00958972.2014.889294>.
- [12] N. Fletcher, G. Rietveld, J. Olthoff, I. Budovsky, M. Milton, *NCSL Int. Meas.* **2014**, 9, 30-35, <https://doi.org/10.1080/19315775.2014.11721692>.
- [13] O. Kahn, *Molecular Magnetism*, VCH Publishers, New York, **1993**.
- [14] R. B. Goldfarb, *IEEE Magn. Lett.* **2018**, 9, 1205905; <https://doi.org/10.1109/LMAG.2018.2868654>.



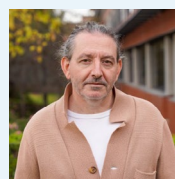
Francesc Lloret Pastor

Departamento de Química Inorgánica
Instituto de Ciencia Molecular, Facultat de Química, Universitat de València

C-e: francisco.lloret@uv.es

ORCID: 0000-0003-2959-0879

F. Lloret es Catedrático de Química Inorgánica de la Universidad de Valencia. Ha publicado cerca de 700 artículos (índice $h = 86$). Su trabajo ha desempeñado un papel clave en el desarrollo del Magnetismo Molecular. Ha sido galardonado por la RSEQ (Premio a la Excelencia Investigadora 2005 y Reconocimiento a una Carrera Distinguida 2022) y por la Sociedad Francesa de Química con el Premio Catalán-Sabatier 2018. Es Dr Honoris Causa por la Universidad de Bucarest (2014) y miembro de la Academia Europea desde 2014. En 2024 ganó el Premio Europeo de Divulgación Científica con el libro “*Un Mundo Magnético: la omnipresencia de los imanes*”.



Rafael Ruiz García

Instituto de Ciencia Molecular, Facultat de Química, Universitat de València

C-e: Rafael.Ruiz@uv.es

ORCID: 0000-0001-9440-0491

Rafael Ruiz García es investigador doctor del Instituto de Ciencia Molecular (ICMol). Tras obtener su doctorado en la Universitat de València en 1995 bajo la dirección de los Catedráticos Francesc Lloret y Miguel Julve, realizó sendas estancias postdoctorales en los grupos de investigación del Profesor Olivier Kahn (Université de Paris-Sud, Francia) y del Profesor Dante Gatteschi (Università di Firenze, Italia), dos centros extranjeros de reconocido prestigio en el área del magnetismo molecular. Su investigación actual se centra en la química de coordinación como herramienta de diseño de materiales magnéticos moleculares multifuncionales para tecnologías emergentes en nanociencia y nanotecnología.

Interpretar perturbaciones en sistemas en equilibrio químico a partir del cociente de reacción Q : una propuesta didáctica digital para Bachillerato

Interpreting perturbations in systems at chemical equilibrium through the re-action quotient Q : a digital teaching proposal for upper secondary chemistry

Rafael Cabrera Moscoso

IES Marqués de Comares (Lucena, Córdoba).

PALABRAS CLAVE:

Equilibrio químico
Cociente de reacción
Le Chatelier
Bachillerato
Simulación didáctica

RESUMEN:

La interpretación de las perturbaciones en sistemas en equilibrio químico suele abordarse en Bachillerato mediante reglas cualitativas asociadas al principio de Le Chatelier, lo que favorece respuestas memorísticas y errores de interpretación. Este trabajo presenta un recurso didáctico digital que sitúa el análisis del equilibrio en la comparación entre Q y K . El recurso combina un simulador, misiones de aplicación, un cuaderno de trabajo y actividades de consolidación y revisión. Su diseño aborda dificultades frecuentes relacionadas con presión y volumen, temperatura, gases inertes, catalizadores y cambios en la cantidad de sustancia gaseosa, $\Delta n(\text{gas})$. Así, el profesorado dispone de una secuencia para que el alumnado identifique qué magnitudes cambian, compare Q y K y justifique la evolución del sistema.

KEYWORDS:

Chemical equilibrium
Reaction quotient
Le Chatelier
Upper secondary education
Didactic simulation

ABSTRACT:

The interpretation of perturbations in systems at chemical equilibrium is often addressed in upper secondary education through qualitative rules associated with Le Chatelier's principle, which tends to foster memorised answers and misinterpretations. This paper presents a digital teaching resource that centres the analysis of perturbations on the comparison between Q and K . The resource combines a core simulator, application missions, a student workbook, and consolidation and review activities. Its design addresses difficulties related to pressure and volume, temperature, inert gases, catalysts, and changes in the amount of gaseous substance, $\Delta n(\text{gas})$. It provides teachers with a sequence in which students identify which quantities change, compare Q and K , and justify the evolution of the system.

Introducción

En Bachillerato, la interpretación de perturbaciones en sistemas en equilibrio químico suele apoyarse en explicaciones cualitativas resumidas en el principio de Le Chatelier. Como primera aproximación, este principio puede resultar útil, pero su aplicación automática favorece respuestas memorísticas y poco precisas, sobre todo cuando el alumnado debe identificar qué variable cambia, cuáles permanecen constantes y cómo queda el sistema inmediatamente después de una perturbación.^[1-9] En este punto aparecen con frecuencia confusiones entre presión y volumen, dificultades para interpretar el efecto de los gases inertes o del catalizador, y problemas para distinguir entre cambios en la constante de equilibrio y cambios en el cociente de reacción.

Diversas publicaciones sobre enseñanza del equilibrio químico han señalado que la dificultad no se reduce a recordar una regla, sino que también depende de cómo se representa el sistema perturbado. Muchos enunciados escolares exigen con-

trolar simultáneamente cantidad de sustancia, concentración, presión parcial, presión total, volumen y temperatura. Si estas variables no se separan con claridad, el razonamiento se reduce a una secuencia verbal del tipo "acción-reacción" y se pierde el análisis del estado real del sistema.^[1-9] No basta, por tanto, con predecir hacia dónde "se desplaza" una reacción; es necesario comprender qué magnitud ha cambiado, cuál es el estado instantáneo posterior a la perturbación y cómo evoluciona el sistema hasta un nuevo equilibrio.

El cociente de reacción permite concretar ese análisis al comparar el valor instantáneo de Q con la constante de equilibrio K , identificar si el sistema se encuentra en equilibrio y justificar el sentido de evolución. La comparación Q/K no funciona como otra regla verbal, porque exige explicitar el control de variables y distinguir entre perturbaciones que modifican Q , perturbaciones que modifican K y situaciones que no modifican ninguna de las dos magnitudes.^[10] En paralelo, la investigación sobre simulaciones interactivas ha mostrado que estas herramientas pueden favorecer la comprensión conceptual cuando

no se usan como demostraciones aisladas, sino dentro de secuencias con andamiaje, predicción, contraste y revisión.^[11-13]

Este trabajo presenta un recurso didáctico digital para 2º de Bachillerato que desplaza el foco desde el uso automático del principio de Le Chatelier hacia la comparación entre Q y K, el control de variables y la justificación razonada. El principio de Le Chatelier puede utilizarse como una primera orientación, mientras que la justificación se apoya en el control de variables y en la comparación entre Q y K.^[1-8]

Diseño y fundamentación didáctica del recurso

Dificultades de aprendizaje abordadas

Una dificultad persistente en la enseñanza del equilibrio químico es que buena parte del alumnado resuelve estas situaciones mediante reglas memorizadas, sin identificar qué cambia en el sistema ni cómo afecta esa perturbación a su evolución. Este modo de razonar suele apoyarse en versiones muy simplificadas del principio de Le Chatelier y puede conducir a respuestas aparentemente correctas, pero poco fundamentadas desde el punto de vista químico.^[1-9]

Entre los errores más frecuentes aparecen la interpretación del equilibrio como un estado estático, la confusión entre cambios de presión y de volumen, la confusión entre procesos a presión constante y a volumen constante, y el uso mecánico del signo de $\Delta n(\text{gas})$ como criterio suficiente para resolver cualquier caso. A ello se suman dificultades al analizar la adición de gases inertes, el papel del catalizador o la diferencia entre una modificación de Q y una modificación de K.^[1-7]

En el artículo de Quílez se relaciona una parte importante de estos errores con un control insuficiente de variables en problemas tradicionales. Por ejemplo, un cambio de volumen no permite inferir de forma directa que la concentración de una especie cambie en el mismo sentido que su cantidad de sustancia; la adición de un gas reactivo no produce el mismo análisis si se realiza a volumen constante o a presión constante; y la adición de un gas inerte exige distinguir si cambia o no el volumen disponible para las especies que participan en el equilibrio. En todos estos casos, el principio de Le Chatelier puede conducir a formulaciones ambiguas o incompletas si no se acompaña de un análisis explícito de Q y K.^[2-7, 10]

Estos problemas no son solo fallos puntuales del alumnado. También reflejan formas de enseñanza que, al simplificar el contenido, terminan ocultando elementos esenciales del razonamiento químico. El recurso se centra en esos puntos para que el alumnado identifique variables, compare Q y K y justifique la evolución del sistema en cada perturbación.

Diseño del simulador base

Un simulador de equilibrio químico resulta útil cuando hace visible un razonamiento que en el papel suele quedar fragmentado. El alumnado parte del equilibrio inicial, identifica la variable modificada y compara Q y K tras la perturbación.

El simulador asocia cada perturbación a una pregunta precisa sobre qué magnitud cambia de forma inmediata, si se modifica Q, si se modifica K o si no cambia ninguna de las dos, y qué evolución posterior recupera la condición de equilibrio. Así, el alumnado no aplica el principio de Le Chatelier como una regla verbal autosuficiente, sino que analiza el sistema antes de justificar su evolución. Existen precedentes de uso de herramientas informáticas para este mismo propósito, como el trabajo de Quílez y Castelló con hoja de cálculo,^[14] en este artículo se retoma ese problema didáctico desde un entorno web interactivo que incorpora retroalimentación inmediata, mi-

siones de aplicación contextualizadas, cuaderno de trabajo y actividades de consolidación.

El simulador se ha construido a partir de un conjunto de veintidós reacciones seleccionadas para cubrir situaciones representativas de equilibrio químico. Incluye ejemplos homogéneos y heterogéneos, reacciones endotérmicas y exotérmicas, y casos en los que la variación de la cantidad de sustancia gaseosa es positiva, negativa o nula. Este repertorio permite trabajar de forma explícita los factores que más problemas de interpretación generan en este bloque de contenidos.

La interfaz del simulador base muestra simultáneamente la ecuación del equilibrio, la comparación entre Q y K, la composición de la mezcla y las variables de control (Figura 1). Esta presentación numérica, simbólica y gráfica ayuda a evitar que el alumnado reduzca el análisis a una frase del tipo “el equilibrio se desplaza hacia...” sin identificar antes qué ha cambiado.

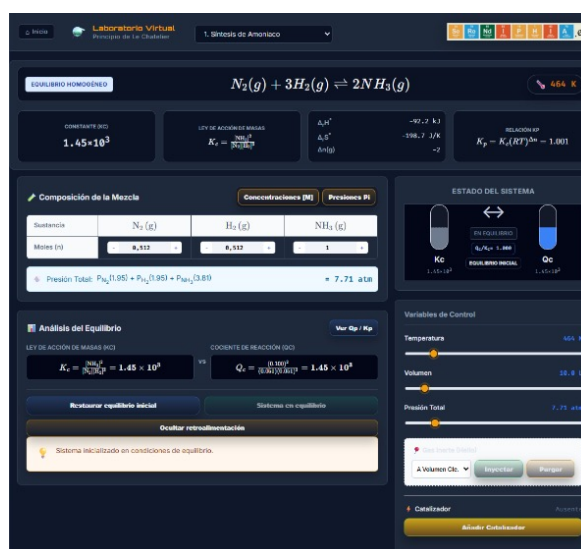


Figura 1. Interfaz del simulador base. La pantalla integra la ecuación química ajustada, la constante de equilibrio, el cociente de reacción, la composición de la mezcla y las variables de control que permiten analizar la respuesta del sistema ante distintas perturbaciones. Reproducido de Ref. [15].

El recurso permite modificar de forma controlada variables como la cantidad de sustancia, la concentración, la presión parcial y total, el volumen o la temperatura, e incorpora también situaciones específicas como la adición de gases inertes o la presencia de catalizadores. El alumnado debe identificar qué magnitudes cambian, cuáles permanecen constantes y cómo queda el sistema inmediatamente después de la perturbación.

Esta misma estructura se documenta en el material complementario mediante vídeos breves de uso del simulador. El cuerpo del artículo recoge la secuencia general, mientras que los vídeos suplementarios muestran con más detalle casos problemáticos descritos en la literatura, como cambio de volumen y concentración, adición de gas reactivo, variación de cantidades iniciales, adición de gas inerte y tratamiento singular de la temperatura.

En el caso de la temperatura, el simulador adopta una simplificación adecuada para 2º de Bachillerato y asume que la entalpía de reacción apenas varía en el intervalo considerado. Esta aproximación permite calcular la variación de K mediante la ecuación de Van't Hoff sin introducir una complejidad termodinámica excesiva. La temperatura se trata, por tanto, como una perturbación singular porque, a diferencia de los cambios

isotérmicos de concentración, presión o volumen, el cambio térmico modifica la constante de equilibrio. A volumen constante, la composición del sistema no cambia de forma instantánea, de modo que Q_c conserva inicialmente el valor asociado al equilibrio de partida; lo que cambia inmediatamente es K_c . La evolución posterior se interpreta comparando ese Q_c instantáneo con el nuevo valor de K_c hasta que el sistema alcanza un nuevo equilibrio, donde vuelve a cumplirse $Q_c = K_c$.

Los valores termodinámicos utilizados en las reacciones se revisaron para que la evolución calculada por el simulador fuera coherente con el comportamiento químico esperado.

Ecosistema didáctico del recurso

El recurso combina simulador, misiones, cuaderno de trabajo y actividades de consolidación. Cada componente cumple una función distinta dentro de la secuencia de aula. El simulador ayuda a interpretar perturbaciones, las misiones obligan a decidir, el cuaderno exige justificar por escrito y las actividades de consolidación permiten revisar lo aprendido. Esta organización coincide con trabajos que subrayan la importancia del andamiaje para relacionar representaciones, identificar patrones y construir explicaciones con sentido.^[11-13]

En la secuencia de aula, la retroalimentación del simulador reconstruye el razonamiento seguido tras cada perturbación. El mensaje identifica la magnitud modificada, la relación resultante entre Q y K y el sentido de evolución del sistema. Así, el alumnado puede contrastar su predicción con un modelo explícito de argumentación y transferirlo a situaciones nuevas.

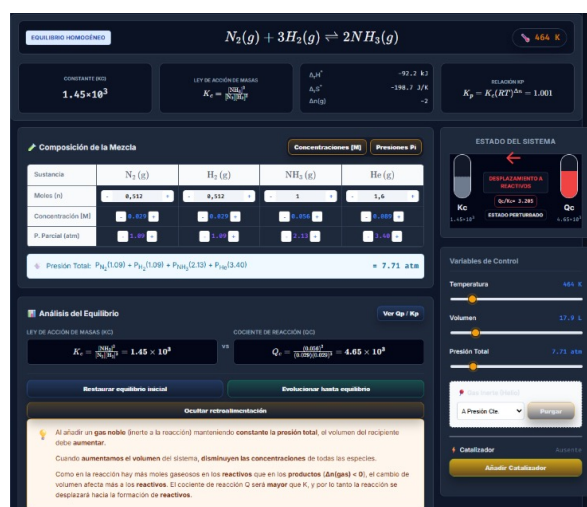


Figura 2. Adición de gas inerte a presión constante. El simulador muestra que, al mantener constante la presión total, la adición de helio aumenta el volumen del recipiente y diluye las especies que participan en el equilibrio. Como consecuencia, cambia Q_c mientras K_c permanece constante, y el sistema deja de estar en equilibrio. El caso interactivo puede consultarse con el simulador precargado. Reproducido de Ref. [16].

La secuencia de aula combina predicciones previas, contraste con la simulación y justificación escrita. Antes de modificar el sistema, el alumnado anticipa qué magnitud espera que cambie y cómo quedará la relación Q/K ; después, compara su hipótesis con la retroalimentación y revisa su explicación.

Las misiones de aplicación constituyen el nivel de trabajo más autónomo del recurso. En ellas, el alumnado deja de analizar perturbaciones aisladas y toma decisiones en escenarios inspirados en procesos químicos reales, como Haber-Bosch, la

producción de SO_3 , el horno de cal, la síntesis de metanol, el equilibrio N_2O_4/NO_2 , el proceso Deacon o la producción de estireno. Estas tareas obligan a justificar compromisos entre equilibrio, velocidad, rendimiento, seguridad y coste, por lo que no siempre existe una única solución óptima. Las misiones están disponibles en la web del proyecto: <https://serendiphia.es/recursos/quimica/equilibrio/LeChat/misiones.html>.^[17]

El cuaderno de misiones, depositado también en Zenodo, recoge las tareas de decisión, justificación y revisión asociadas a estos escenarios. En él, el alumnado registra hipótesis, cambios introducidos, resultados observados y justificación de decisiones, de modo que la interacción con el simulador queda vinculada a una actividad de argumentación y revisión.

Las actividades de consolidación y revisión cierran el itinerario con un cuestionario organizado en seis bloques temáticos: cambios de concentración, volumen y presión, gas inerte, temperatura, reacciones heterogéneas y razonamiento de síntesis. Las preguntas no se limitan a pedir el sentido del desplazamiento del equilibrio; también exigen identificar qué magnitud cambia y establecer la relación resultante entre Q y K .

El recurso se ha utilizado en clase de 2º de Bachillerato durante el desarrollo del tema de equilibrio químico. De forma preliminar, se observó una valoración positiva de la propuesta y, especialmente, la aparición en pruebas objetivas de razonamientos en los que el alumnado recurría explícitamente a la comparación entre Q y K para justificar la evolución de sistemas perturbados.

Esta estructura hace posible que la comprensión del equilibrio químico no dependa solo de la intuición inicial del alumnado, sino de un proceso progresivo de explicitación, contraste y corrección del razonamiento.

Decisiones de diseño didáctico

El simulador organiza sus mensajes en torno a los aspectos del equilibrio químico que suelen generar más confusión en el aula. Cada perturbación se presenta como un caso que exige identificar qué magnitud cambia y bajo qué condiciones lo hace.

Una de esas dificultades es la confusión entre cambios de presión y cambios de volumen. Por ello, el recurso exige precisar qué variable se modifica, en qué condiciones se produce el cambio y si la adición de un gas inerte ocurre a volumen constante o a presión constante.

La temperatura se mantiene como caso singular, ya desarrollado en el apartado anterior, porque el cambio térmico modifica la constante de equilibrio y exige comparar Q con el nuevo valor de K .

El papel de $\Delta n(gas)$ se trabaja como apoyo para interpretar cambios de volumen y presión, incluido el caso particular en que $\Delta n(gas) = 0$. Este parámetro ayuda a justificar por qué una perturbación afecta de manera distinta a reactivos y productos y cómo esa diferencia modifica la relación entre Q y K .

El catalizador se presenta como un factor cinético que modifica la velocidad de aproximación al equilibrio, no como una alteración de Q , de K o del estado de equilibrio.

Con estas decisiones, el alumnado no solo identifica un desplazamiento del equilibrio, sino que argumenta qué magnitudes intervienen, bajo qué condiciones cambian y cuándo dejan de servir las respuestas automáticas.

Conclusiones

El recurso organiza la interpretación de perturbaciones en sistemas en equilibrio químico mediante tres operaciones principales. El alumnado identifica qué magnitud cambia, compara Q y K y justifica la evolución posterior del sistema. Con ello, el foco

se desplaza desde la aplicación automática del principio de Le Chatelier hacia un análisis más explícito del estado del sistema y de las condiciones de la perturbación.

La integración entre simulador, misiones de aplicación, cuaderno de trabajo y actividades de consolidación conecta observación, toma de decisiones, argumentación y revisión de errores. Así, la interacción digital no queda reducida a exploración, sino que se incorpora a una secuencia de aula guiada.

En Bachillerato, este enfoque ofrece una vía para trabajar las perturbaciones del equilibrio con menos dependencia de reglas memorizadas y mayor atención al control de variables, al estado instantáneo del sistema y a la justificación química de la evolución posterior.

Declaración de uso de Inteligencia Artificial Generativa

Durante la preparación de este trabajo, el autor utilizó ChatGPT para revisar la claridad y la gramática del manuscrito, así como apoyo técnico en la programación y el desarrollo del simulador didáctico descrito.

El autor ha revisado íntegramente los resultados y asume la responsabilidad total sobre la veracidad científica, la coherencia de los datos termodinámicos y el contenido intelectual del artículo.

Material suplementario

Los anexos de este documento se encuentran disponibles en la web de la revista Anales de Química de la RSEQ.

Bibliografía

- [1] J. Quílez Pardo, J. J. Solaz Portolés, M. Castelló Hernández, V. Sanjosé López, *Ens. Cien.* **1993**, 11(3), 281-288, <https://doi.org/10.5565/rev/ensciencias.4506>.
- [2] J. Quílez, J. J. Solaz, *J. Res. Sci. Teach.* **1995**, 32(9), 939-957, <https://doi.org/10.1002/tea.3660320906>.
- [3] J. Quílez, V. Sanjosé, *Ens. Cien.* **1996**, 14(3), 381-390, <https://doi.org/10.5565/rev/ensciencias.4213>.
- [4] J. Quílez, *Infancia y Aprendizaje* **1997**, 20(78), 73-86, <https://doi.org/10.1174/O21037097761403154>.
- [5] J. Quílez, *Educ. Quim.* **1997**, 8(1), 46-54, <https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.1997.1.66639>.
- [6] J. Quílez, *Alambique* **1998**, 17, 105-111.
- [7] J. Quílez, *Ens. Cien.* **2006**, 24(2), 219-240, <https://doi.org/10.5565/rev/ensciencias.3802>.
- [8] L. Tyson, D. F. Treagust, R. B. Bucat, *J. Chem. Educ.* **1999**, 76(4), 554, <https://doi.org/10.1021/ed076p554>.
- [9] D. Cheung, *J. Chem. Educ.* **2009**, 86(4), 514, <https://doi.org/10.1021/ed086p514>.
- [10] J. Quílez, *An. Quím. RSEQ* **2025**, 121, 25-31, <https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2016>.
- [11] S. Ainsworth, *Learn. Instr.* **2006**, 16(3), 183-198, <https://doi.org/10.1016/j.learninstruc.2006.03.001>.
- [12] C. E. Wieman, W. K. Adams, K. K. Perkins, *Science* **2008**, 322(5902), 682-683, <https://doi.org/10.1126/science.1161948>.
- [13] D. G. Herrington, S. M. Hilborn, E. N. Sielaff, R. D. Sweeder, *Chem. Educ. Res. Pract.* **2022**, 23, 644-661, <https://doi.org/10.1039/D2RP00063F>.
- [14] J. Quílez, M. Castello, *Educ. Quim.* **1996**, 7, 50-54, <https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.1996.1.66688>.
- [15] R. Cabrera, "Laboratorio Virtual: Equilibrio Homogéneo", disponible en <https://serendiphia.es/recursos/quimica/equilibrio/LeChat/index.html>, **2026** (consultado: 20/02/2026).
- [16] R. Cabrera, "Laboratorio Virtual: Caso precargado del artículo S8. He a presión constante", disponible en https://serendiphia.es/recursos/quimica/equilibrio/LeChat/index.html?case=s8_inerte_presion&v=20260513-textos, **2026** (consultado: 20/02/2026).
- [17] R. Cabrera, "Laboratorio Virtual: Centro de misiones", disponible en <https://serendiphia.es/recursos/quimica/equilibrio/LeChat/misiones.html>.



Rafael Cabrera Moscoso

IES Marqués de Comares (Lucena, Córdoba)

E-mail: rcabreratic@gmail.com

ORCID: 0009-0009-2724-2767

Rafael Cabrera es profesor de Física y Química en el IES Marqués de Comares (Lucena, Córdoba). En su trabajo docente utiliza recursos digitales y secuencias didácticas para ayudar al alumnado de Bachillerato a comprender mejor la química. Entre sus intereses se encuentran la creación de simuladores interactivos, la clarificación conceptual y el diseño de materiales para el aula.

Ilumínate con química: un proyecto dentro del programa Bachillerato de Excelencia

Enlighten yourself with chemistry: a project within Baccalaureate of Excellence program

Ana M. del Hoyo Martín

IES Francisco Umbral, Ciempozuelos, Madrid.

PALABRAS CLAVE:

Cuántica
Fosforescencia
Fluorescencia
Quimioluminiscencia
Luz

RESUMEN:

El Bachillerato de Excelencia es un programa que permite a los alumnos profundizar y llevar a cabo un proyecto de investigación permitiendo que entren en contacto con el mundo científico. La luz es un fenómeno físico que se encuentra directamente relacionado con la química y que se puede estudiar fácilmente a través de sustancias presentes en nuestra vida cotidiana. A través de elementos como la tónica, la cúrcuma o las barras luminiscentes se puede abordar el estudio de diferentes fenómenos luminiscentes, como son fluorescencia, fosforescencia y quimioluminiscencia, al mismo tiempo que permite conocer a relevancia histórica de la química cuántica. Además, el trabajo experimental posibilita que los estudiantes adquieran competencias y destrezas para la aplicación del método científico.

KEYWORDS:

Quantum
Phosphorescence
Fluorescence
Chemiluminescence
Light

ABSTRACT:

The Baccalaureate of Excellence is a program that allows students to deepen and carry out a research project allowing them to come into contact with the scientific world. Light is a physical phenomenon that is directly related to chemistry and can be easily studied through substances present in our daily lives. Through elements such as tonic, turmeric or luminescent bars, different luminescent phenomena can be studied, such as fluorescence, phosphorescence and chemiluminescence, while at the same time providing knowledge of the historical relevance of quantum chemistry. In addition, experimental work enables students to acquire competences and skills for the application of the scientific method.

Introducción

La relación entre química y luz ha estado presente a lo largo de la historia, tanto en el desarrollo de la ciencia como en la vida cotidiana,^[1] desde los alquimistas, los antiguos filósofos, pasando por Newton, hasta el desarrollo de la espectroscopía y la teoría cuántica.^[2]

El desarrollo de la física cuántica nació a partir de tres fenómenos que no explicaba la física clásica: la radiación del cuerpo negro, el efecto fotoeléctrico y los espectros atómicos. Es este último fenómeno, el de los espectros atómicos, el que dio lugar al desarrollo del modelo de Bohr, el cual relaciona los saltos energéticos entre las órbitas con los espectros de absorción (cuando un electrón absorbe energía para pasar desde el estado fundamental a un estado excitado) y de emisión (cuando un electrón emite energía desde un estado excitado al estado fundamental) de un átomo (Fig. 1).

Luminiscencia: Fosforescencia, fluorescencia y quimioluminiscencia

La luminiscencia (capacidad de emitir luz) de moléculas complejas se puede emplear para relacionar contenidos de 2º de Bachillerato,^[3] como son los espectros atómicos y el enlace covalente, con el concepto de orbital molecular. De esta manera,

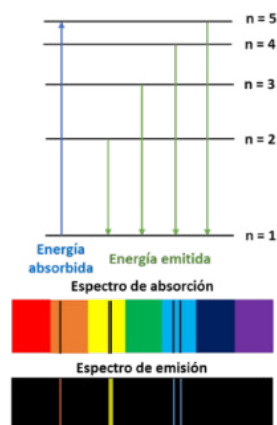


Figura 1. Diagrama de energía y espectros atómicos de absorción y emisión.

los estudiantes podrán comprender que las moléculas interactúan de manera similar con la radiación electromagnética y que no solo los elementos químicos pueden absorber y emitir energía en forma de luz. Además, experimentalmente es más sencillo obtener moléculas luminiscentes a partir de sustancias

de la vida cotidiana que hacerlo a través de elementos puros, ya que para esto se necesitan tubos de descarga o quemar sales que contengan algún metal (procesos que tienen mayor peligrosidad).^[4] Todo esto hace que este diseño experimental sea adecuado como proyecto dentro del programa Bachillerato de Excelencia.

El diagrama de Jablonsky,^[5] (Fig. 2) permite explicar los dos procesos luminiscentes que se pueden encontrar a nivel molecular: fluorescencia (proceso rápido) y fosforescencia (proceso lento). La fluorescencia es un proceso rápido puesto que la transición energética se produce entre dos estados singlete (transición permitida) mientras que la fosforescencia es un proceso lento ya que tiene lugar entre un estado triplete y uno singlete (transición prohibida). Por este motivo, la fluorescencia solo se observa mientras se está irradiando la muestra y la fosforescencia tiene lugar incluso después de haber sometido la muestra a una fuente de excitación.

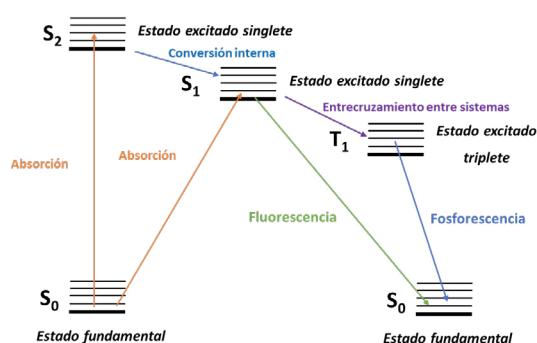
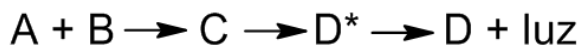


Figura 2. Diagrama de Jablonsky.

Por otro lado, existen algunas reacciones químicas que emiten energía en forma de luz, este fenómeno recibe el nombre de quimioluminiscencia.^[6] Como se ve en el esquema 1 los reactivos dan lugar a un intermedio de reacción o producto en estado excitado, que evoluciona liberando la energía en forma de fotones provocando el fenómeno de quimioluminiscencia.



Esquema 1. Ecuación química de un proceso quimioluminiscente.

Fluorescencia: uso y extracción de sustancias cotidianas.

A nuestro alrededor podemos encontrar fácilmente muchas sustancias que poseen moléculas fluorescentes como son la tónica (quinina), las espinacas (clorofila), la cúrcuma (curcumina), gotas oftálmicas (fluoresceína) y pastillas de vitamina C, las cuales contienen riboflavina como aditivo fluorescente (Fig. 3).^[7]

Es poco habitual que la fluorescencia se produzca por absorción de radiación UV con una longitud de onda inferior a 250 nm, ya que esta radiación tiene energía suficiente para desactivar el electrón del estado excitado, por este motivo para los experimentos se utilizó una linterna de luz UV con la longitud de onda de 395 nm.^[8] Debido a esto las transiciones $\sigma \rightarrow \sigma^*$ son poco habituales dentro del fenómeno de fluorescencia. En su lugar, son más comunes transiciones electrónicas menos

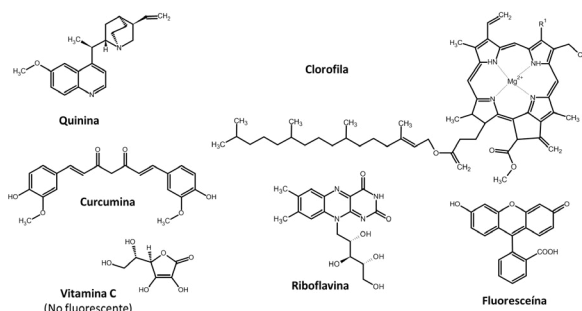


Figura 3. Estructuras químicas de las moléculas implicadas en los experimentos.

energéticas como son las $\pi^* \rightarrow \pi$ (compuestos con dobles enlaces conjugados), donde la eficiencia cuántica es muy grande o $\pi^* \rightarrow n$ (compuestos con heteroátomos con pares de electrones no enlazantes). Los fenómenos de fluorescencia de mayor intensidad se encuentran en compuestos aromáticos con transiciones $\pi^* \rightarrow \pi$ de baja energía.

Para los experimentos que se realizaron dentro de este proyecto, la tónica fue usada directamente, la clorofila y la curcumina fueron extraídas con etanol, y las gotas oftálmicas y las pastillas de vitamina C (con riboflavina) disueltas en agua preparando sendas disoluciones. En todos los casos se utilizó la linterna de luz ultravioleta para irradiar las muestras y observar el fenómeno de fluorescencia. Además, se estudió la adición de diferentes sustancias para estudiar su influencia en este fenómeno.

Estudio de la fluorescencia de la quinina presente en la tónica

La quinina es un alcaloide proveniente de la corteza de los árboles del género *Cinchona* que ha sido utilizado como anti-malárico. Su descubrimiento data del s. XVII durante una de las expediciones europeas desde Sudamérica, cuando los jesuitas se dieron cuenta de que los indios utilizaban la corteza de unos árboles para tratar esta enfermedad. Esta molécula presenta dos nitrógenos en su estructura, lo que permite que presente dos equilibrios ácido-base que dan lugar a la formación de un monocatión y un dicatión (Fig. 4).^[9]

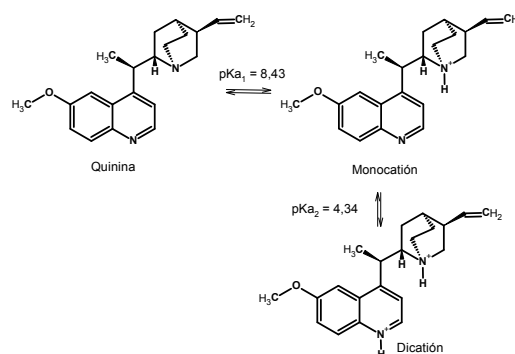


Figura 4. Equilibrios ácido-base de la quinina.

Como se observa en la Figura 5 la molécula de quinina exhibe fluorescencia azul ($\lambda = 450 \text{ nm}$) al ser expuesta a luz UV.



Figura 5. Muestras de tónica sin iluminar (izquierda) e iluminada con luz UV (derecha).

A continuación, se añadió 1 mL de diferentes sustancias (H_2O , NH_3 , H_2SO_4 , NaCl , HCl y NaOH) a cada una de las alícuotas de tónica y se volvió a irradiar con luz UV como se muestra en la Figura 6, obteniendo los resultados reflejados en la Tabla 1.

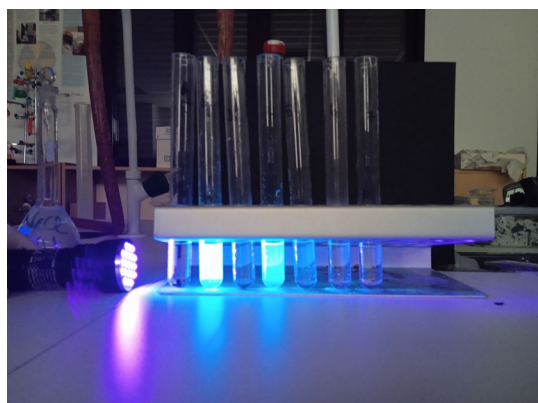


Figura 6. Muestras de tónica tras añadir distintas sustancias, de izquierda a derecha: blanco, H_2O , NH_3 , H_2SO_4 , NaCl , HCl y NaOH .

Tabla 1. Ensayo con muestras de tónica.

Ensayo	Sustancia añadida	Observaciones
1	H_2O (blanco, sin tónica)	No hay fluorescencia
2	H_2O	Fluorescencia
3	NH_3 (30%)	No hay fluorescencia
4	H_2SO_4 (0,2 M)	Fluorescencia
5	NaCl (0,1 M)	No hay fluorescencia
6	HCl (37%)	No hay fluorescencia
7	NaOH (0,1 M)	No hay fluorescencia

En todos los casos la fluorescencia desaparece salvo cuando se añadió ácido sulfúrico. Cabe destacar que la fluorescencia fue recuperada en la muestra tratada con NaOH tras la adición de H_2SO_4 . Los resultados revelan que el fenómeno de fluorescencia se observa en las especies protonadas (monocación y dicación), lo que significa que el nitrógeno de la quinuclidina no afecta a las propiedades electrónicas de la molécula. Sin embargo, la fluorescencia disminuye en medio básico (molécula neutra) como consecuencia de los enlaces de hidrógeno que se forman con el disolvente (agua).^[9] Por otro lado, se observa que el ion cloruro (ensayo 5) provoca la extinción dinámica de la fluorescencia al colisionar con la molécula en el estado excitado, haciendo que esta pierda la energía de manera no radiativa.^[10]

Estudio de la fluorescencia de la clorofila presente en las hojas de espinacas

La clorofila es una macromolécula de porfirina (también presente en la hemoglobina) que se encuentra coordinada a un ion Mg^{2+} (Fig. 3). Además, esta molécula es uno de los pigmentos implicados en la fotosíntesis de las plantas. Durante este proceso la molécula absorbe un fotón pasando al correspondiente estado excitado. Cuando la molécula regresa al estado fundamental cede energía, la cuál es empleada para crear un gradiente de protones a través de la membrana de los cloroplastos para generar ATP (fuente de energía).

El extracto de espinacas contiene varios componentes (se puede observar en cromatografía en capa fina) como son clorofila A y B, xantofilas y carotenos. Como se observa en la Figura 7, al irradiar el extracto de espinacas con luz UV se detecta fluorescencia de color rosa ($\lambda = 620\text{-}680\text{ nm}$), lo que corresponde con el espectro de emisión de las clorofilas.

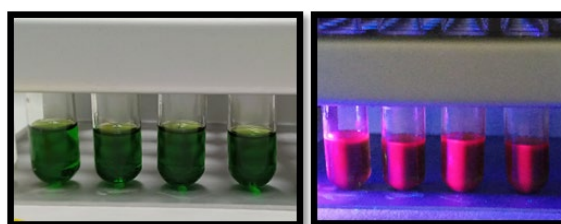


Figura 7. Muestras de extracto de espinacas sin iluminar (izquierda) e iluminada con luz UV (derecha).

A continuación, se añadió 1 mL de diferentes sustancias a diferentes muestras de extracto de espinacas y se volvió a irradiar con luz UV como se muestra en la Figura 8, obteniendo los resultados reflejados en la Tabla 2.

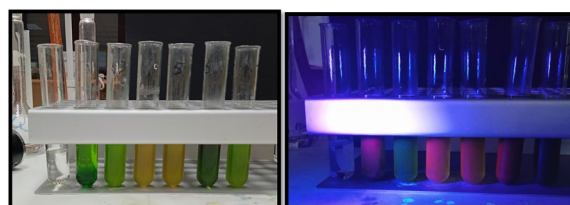


Figura 8. Muestras de extracto de espinacas tras añadir distintas sustancias, de izquierda a derecha: blanco, H_2O , NH_3 , H_2SO_4 , NaCl , HCl y NaOH .

Tabla 2. Ensayos con extracto de espinacas.

Ensayo	Sustancia añadida	Observaciones
1	H_2O (blanco, sin extracto de espinacas)	No hay fluorescencia
2	H_2O	Color verde, fluorescencia
3	NH_3 (30%)	Color verde pardo, no hay fluorescencia
4	H_2SO_4 (0,2 M)	Color amarillo, fluorescencia
5	NaCl (0,1 M)	Color amarillo, fluorescencia
6	HCl (37%)	Color verde intenso, fluorescencia
7	NaOH (0,1 M)	Color verde pardo, turbidez, no hay fluorescencia

Se observó que las muestras que contenían medio básico (ensayos 3 y 7) perdieron el color verde intenso dejando de exhibir fluorescencia, esto es debido a que los dos ésteres presentes en la molécula de clorofila se saponifican dando lugar a clorofilida, fitol y metanol.^[11] Al añadir H_2SO_4 , la muestra se volvió a amarilla sin perder la capacidad de emitir luz, esto sugiere que se ha producido la feofitización de la clorofila (el ion Mg^{2+} ha sido sustituido por dos hidrógenos), lo cual es habitual a pH ácidos. El pH ácido también promueve la formación de enlaces de hidrógeno y la deformación del anillo de clorofila dando lugar a agregados tipo H y tipo J, lo que provoca una disminución de la fluorescencia como se observa en el ensayo 6 (HCl).^[12] El comportamiento observado para la muestra que contenía NaCl fue similar al ensayo 4.

Estudio de la fluorescencia de la curcumina presente en la cúrcuma

La cúrcuma es una especia que se encuentra en los rizomas de la planta que lleva el mismo nombre (perteneciente a la familia del jengibre). Además, está especia forma parte del curry, un condimento habitual en la cocina tailandesa e india. La cúrcuma contiene un compuesto llamado curcumina (Fig. 3) que exhibe fluorescencia verde (Fig. 9) teniendo su máximo de emisión a 590 nm de longitud de onda, y además presenta una amplia variedad de propiedades farmacológicas. Esta fluorescencia es debida a que la curcumina existe en su forma enólica, debido a que es una β -dicetona, ya que en esta estructura resonante los dos cromóforos se comunican a través de un sistema conjugado de electrones π .^[13]

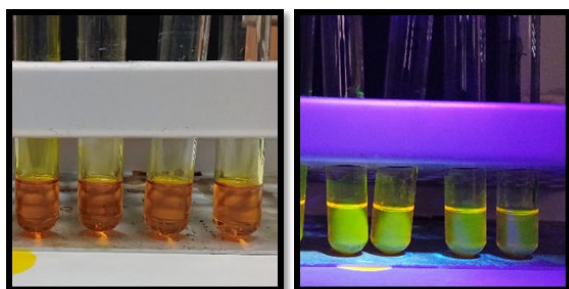


Figura 9. Muestras de extracto de cúrcuma sin iluminar (izquierda) e iluminada con luz UV (derecha).

Esta sustancia además de presentar propiedades antitumorales también puede comportarse como indicador ácido-base.^[14,15] gracias a los cambios estructurales que se producen al variar el pH como se observa en la figura 10.

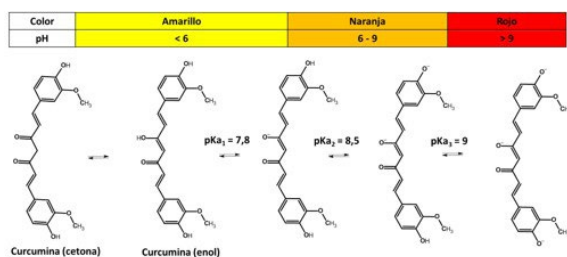


Figura 10. Equilibrios ácido-base de la curcumina y aplicación como indicador.

A continuación, se añadió 1 mL de diferentes sustancias a las muestras extracto de cúrcuma y se volvió a irradiar con luz UV como se muestra en la Figura 11, obteniendo los resultados reflejados en la Tabla 3.

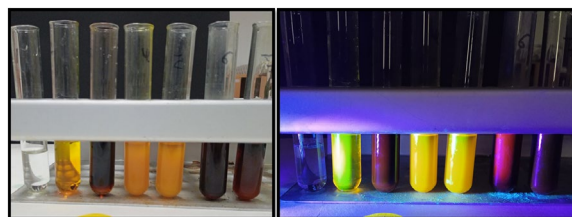


Figura 11. Muestras de extracto de curcumina tras añadir distintas sustancias, de izquierda a derecha: blanco, H_2O , NH_3 , H_2SO_4 , NaCl, HCl y NaOH.

Tabla 3. Ensayos con extracto de cúrcuma.

Ensayo	Sustancia añadida	Observaciones
1	H_2O (blanco, sin extracto de cúrcuma)	No hay fluorescencia
2	H_2O	Fluorescencia
3	NH_3 (30%)	Cambio de color a rojo, no hay fluorescencia
4	H_2SO_4 (0,2 M)	No hay fluorescencia
5	NaCl (0,1 M)	No hay fluorescencia
6	HCl (37%)	Cambio de color a marrón, no hay fluorescencia
7	NaOH (0,1 M)	Cambio de color a rojo, no hay fluorescencia.

Se observó que en todos los casos la fluorescencia se extinguió, lo que significa que el pH tiene una influencia muy importante en este fenómeno. Según la literatura, la fluorescencia de la curcumina decrece por debajo de $\text{pH} = 1$ y por encima de $\text{pH} = 8,3$.^[13] Además, se sabe que el compuesto se degrada a pH extremos dando lugar a ácido ferúlico, feruloilmetano, vainillina y acetona.^[14] Las muestras que contienen medio básico (ensayos 3 y 7) pasaron a poseer color rojo debido a la formación del enolato del compuesto, mientras que la muestra que contenía H_2SO_4 (ensayos 4) se volvió amarilla por la predominancia de la especie dicetona. El hecho de que se pierda la fluorescencia a pH extremo está relacionado con cambios en las propiedades electrónicas de la molécula de curcumina, provocando la ausencia de fluorescencia. En el experimento que se añadió HCl concentrado (ensayo 6) se observó que la muestra cambió exhibiendo un color marrón, lo que corresponde a la degradación de la curcumina. Por último, la presencia de NaCl (ensayo 5) provocó de nuevo la extinción dinámica de la fluorescencia debido al ion cloruro.

Fluorescencia de la riboflavina presente en la vitamina C

La vitamina C (Fig. 3), también conocida como ácido ascórbico, se encuentra presente en cítricos y verduras. Además, se puede obtener fácilmente en el supermercado como complemento alimenticio. Esta vitamina es esencial para el crecimiento y desarrollo normal de cuerpo humano, su carencia puede provocar enfermedades graves como el escorbuto, dolencia habitual que hacía enfermar a los marineros entre los siglos XVI y XVIII. Sin embargo, la vitamina C no presenta fluorescencia

debido a que no posee un sistema conjugado de electrones π . La riboflavina o vitamina B2 (Fig. 3), es una vitamina hidrosoluble que es importante para el crecimiento, la producción de glóbulos rojos y para la liberación energía de los carbohidratos, las proteínas y las grasas. Esta molécula se encuentra como aditivo en las pastillas de vitamina C comerciales, por lo que es fácilmente accesible.

La vitamina B2 exhibe fluorescencia amarilla-verdosa ($\lambda = 525$ nm) cuando es irradiada bajo luz UV (Fig. 12).

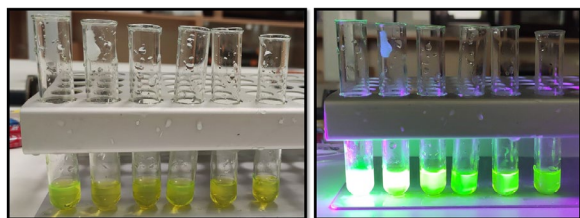


Figura 12. Muestras de vitamina B2 sin iluminar (izquierda) e iluminada con luz UV (derecha).

Esta sustancia presenta dos equilibrios ácido-base que se encuentran representados en la figura 13.

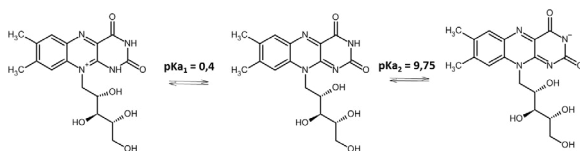


Figura 13. Equilibrios ácido-base de la riboflavina (vitamina B2).

A continuación, se añadió 1 mL de diferentes sustancias a las muestras de vitamina B y se volvió a irradiar con luz UV como se muestra en la Figura 14, obteniendo los resultados reflejados en la Tabla 4.

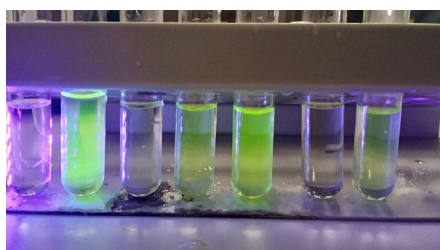


Figura 14. Muestras de extracto de vitamina C tras añadir distintas sustancias de izquierda a derecha: blanco, H_2O , NH_3 , H_2SO_4 , NaCl, HCl y NaOH.

Tabla 4. Ensayos con vitamina C.

Ensayo	Sustancia añadida	Observaciones
1	H_2O (blanco, sin vitamina C)	No hay fluorescencia
2	H_2O	Fluorescencia
3	NH_3 (30%)	No hay fluorescencia
4	H_2SO_4 (0,2 M)	Fluorescencia atenuada
5	NaCl (0,1 M)	Fluorescencia atenuada
6	HCl (37%)	No hay fluorescencia
7	NaOH (0,1 M)	No hay fluorescencia

Se observó que las muestras que contienen medio básico (ensayos 3 y 7) perdieron la fluorescencia y que las que contenían medio ácido (ensayos 4 y 6) perdían o atenuaban su capacidad de emitir luz. Según la literatura, el catión de la riboflavina no es fluorescente y el anión correspondiente presenta un rendimiento cuántico muy bajo.^[17] Esto significa que tanto la especie catiónica como la especie aniónica modifican su estructura electrónica de tal manera que no son capaces de exhibir fluorescencia. Por último, la presencia de iones cloruro vuelve provocar la desactivación no radiativa del estado excitado de la riboflavina, algo que ya ha sido observado en los experimentos con la quinina y la curcumina.

Fluorescencia de la fluoresceína

La fluoresceína (Fig. 3) es una molécula orgánica que se utiliza en oftalmología para la detección de cuerpos extraños en el ojo y daños en la córnea. Este compuesto exhibe fluorescencia verde ($\lambda = 485$ nm) como se observa en la figura 15.

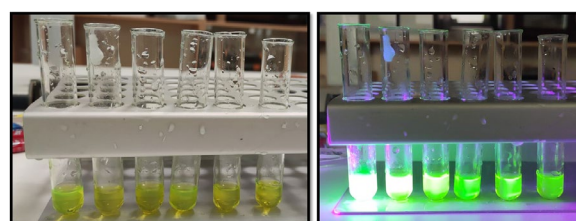


Figura 15. Muestras de fluoresceína sin iluminar (izquierda) e iluminada con luz UV (derecha).

La fluoresceína posee un ácido carboxílico y un fenol en su estructura, por lo que presenta diferentes equilibrios ácido-base como se puede ver en la figura 16.

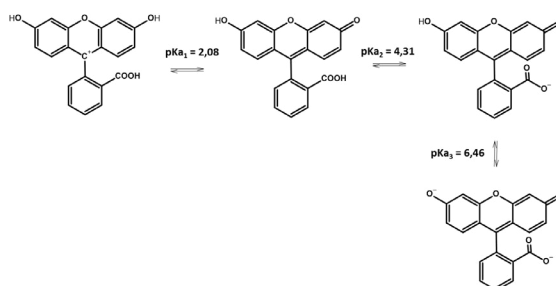


Figura 16. Equilibrios ácido-base de la fluoresceína.

A continuación, se añadió 1 mL de diferentes sustancias a las muestras de fluoresceína y se volvió a irradiar con luz UV como se muestra en la Figura 17, obteniendo los resultados reflejados en la Tabla 5.

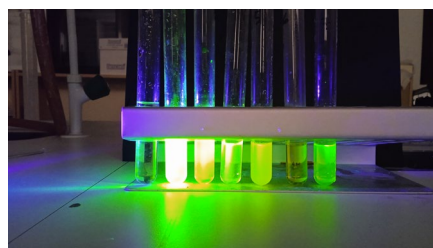


Figura 17. Muestras de extracto de fluoresceína tras añadir distintas sustancias, de izquierda a derecha: blanco, H_2O , NH_3 , H_2SO_4 , NaCl, HCl y NaOH.

Tabla 5. Ensayos con fluoresceína.

Ensayo	Sustancia añadida	Observaciones
1	H ₂ O (blanco, sin fluoresceína)	No hay fluorescencia
2	H ₂ O	Fluorescencia
3	NH ₃ (30%)	Fluorescencia
4	H ₂ SO ₄ (0,2 M)	Fluorescencia atenuada
5	NaCl (0,1 M)	Fluorescencia
6	HCl (37%)	No hay fluorescencia
7	NaOH (0,1 M)	Fluorescencia

Se pudo observar que la fluorescencia se mantiene a pH básico y que disminuye o desaparece a pH ácido. Esto es debido a que el dianión y anión son estructuras fluorescentes, siendo el dianión el derivado que presenta mayor rendimiento cuántico. Se sabe que la fluorescencia que exhiben el anión y la molécula neutra de la fluoresceína son muy similares, ya que el grupo carboxilo no influye en la estructura xanténica, que es la causante de la emisión de luz.^[18] Igualmente, es conocido que el catión de la fluoresceína no es fluorescente, por este motivo no se observa el fenómeno en ácido clorhídrico concentrado. Por último, la presencia de cloruros no inhibió la fluorescencia, esto es debido a que la fluoresceína presenta un rendimiento cuántico muy alto.

Diferencias entre fluorescencia y fosforescencia

Para observar las diferencias entre ambos fenómenos luminiscentes se empleó tónica comercial (quinina, compuesto fluorescente) y un objeto pintado con pintura fosforescente. Como se observa en la figura 18 la tónica solo exhibe luminiscencia cuando es irradiada, sin embargo, la pintura fosforescente emite fotones, aunque no se encuentre bajo la luz UV. Esto sucede porque la fosforescencia es un fenómeno lento debido a que es consecuencia de una transición electrónica prohibida.



Figura 18. Tónica y objeto con pintura fosforescente bajo luz UV (izquierda). Tónica y objeto con pintura fosforescente después de haber sido irradiados con luz UV (derecha).

Quimioluminiscencia: la química de las barras luminosas

El fenómeno de quimioluminiscencia se caracteriza por producir una emisión de fotones como consecuencia de una reacción química. Una forma fácil y accesible de observar este proceso con estudiantes de bachillerato es usar las barras luminiscentes utilizando algunos de los experimentos desarrollados por Kuntzman.^[19] Estas barras están formadas por un tubo de plástico que contiene difenil oxalato y un colorante fluorescente (responsable del color de la luz de cada barra luminiscente) además de tener integrado un compartimento de vidrio que contiene agua oxigenada. Cuando se rompe este tubo de vidrio ambos líquidos se ponen en contacto y tiene lugar la reacción química (Fig. 19).

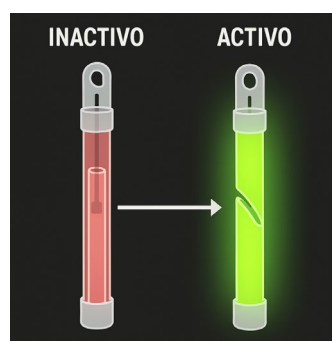
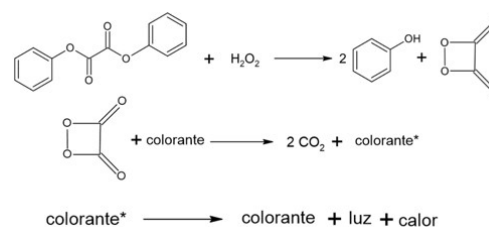


Figura 19. Funcionamiento de las barras luminiscentes. (Imagen realizada con inteligencia artificial).

Lo que sucede es que el compuesto difeniloxalato reacciona con agua oxigenada para dar lugar a un intermedio dioxetanodio, muy reactivo debido a que se encuentra muy constreñido. Este intermedio cíclico reacciona con el colorante fluorescente liberando CO₂ y transfiriéndole energía para que éste pase a su estado excitado. Por último, el colorante libera la energía acumulada en forma de luz y calor (Esquema 2).



Esquema 2. Mecanismo de la reacción quimioluminiscente.

Para estudiar en más detalle este proceso y comprender como funciona se han realizado cuatro experimentos diferentes.

Influencia de la temperatura

Las reacciones químicas se producen cuando las moléculas de reactivos chocan con la suficiente energía y la orientación adecuada produciéndose rupturas y formación de enlaces. Cuanto mayor sea la temperatura de la reacción mayor será la energía cinética de las partículas, produciendo un aumento de la velocidad de la reacción.

Para estudiar de manera cualitativa la cinética del proceso de quimioluminiscencia se introdujeron las barras luminiscentes activadas dentro de tres vasos de agua a diferentes temperaturas (Fig. 20).

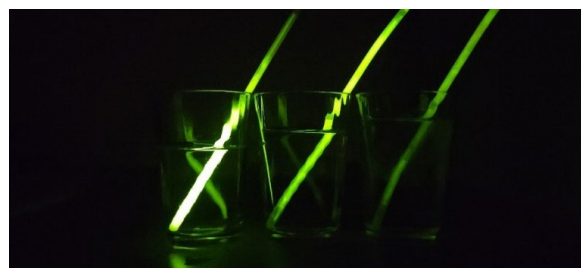


Figura 20. Barras luminiscentes a distintas temperaturas. De izquierda a derecha: agua caliente, agua a temperatura ambiente, agua fría.

Como se puede ver, la barrita a mayor temperatura emite mayor intensidad luminosa y la que se encuentra a menor temperatura emite menor intensidad. Esto es debido a que la intensidad luminosa depende del número de fotones emitidos,

lo que aumenta al aumentar la velocidad de la reacción con la temperatura.

Comprobación de la presencia de catálisis básica

La reacción que tiene lugar dentro de las barras luminiscentes es catalizada por medio básico, siendo el anión salicilato el derivado más usado habitualmente. Este ion es una base débil que se encuentra en equilibrio con el ácido salicílico (Fig. 21). Este equilibrio puede ser modificado por adición de ácido o base al medio.

Para estudiar este fenómeno se activaron varias barras lumi-

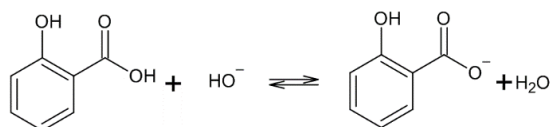


Figura 21. Equilibrio ácido-base del ácido salicílico y salicilato.

niscentes del mismo color añadiendo su contenido a tres tubos de ensayo distintos (Fig. 22). A continuación, se añadieron diferentes sustancias con la intención de comparar la luminiscencia con diferentes valores de pH. Los resultados se muestran en la tabla 6.

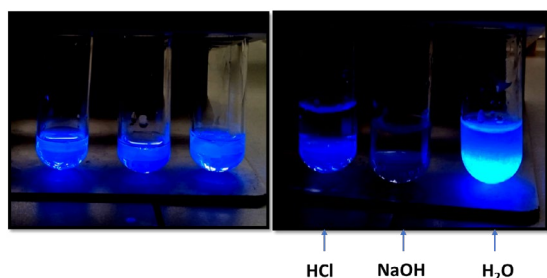


Figura 22. Contenido de barras luminiscentes activadas antes (izquierda) y después (derecha) de la adición de HCl, NaOH y H₂O.

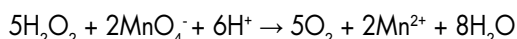
Tabla 6. Ensayos de quimioluminiscencia a diferentes pH.

Ensayo	Sustancia añadida	Observaciones
1	HCl (0,1 M)	Emisión de luz atenuada
2	NaOH (0,1 M)	Emisión de luz muy ávida e intensa
3	H ₂ O	No hay cambios

Se observa una atenuación de la luz emitida en la muestra que está en medio ácido, ya que la reacción se ralentiza. Por otro lado, la muestra a la que fue añadida medio básico emitió luz aumentando mucho su intensidad, pero apagándose a los pocos segundos. Las observaciones se justifican a través de la catálisis básica del proceso.

Detección de uno de los reactivos: agua oxigenada

Uno de los reactivos empleados en las barras luminiscentes es H₂O₂. El agua oxigenada puede ser detectada a través de la siguiente reacción química con KMnO₄.



Esquema 3. Reacción redox entre H₂O₂ y MnO₄⁻.

Para realizar este experimento se debe extraer el tubo de vidrio que se encuentra en el interior las barras luminosas. A continuación, se vierte la disolución transparente (contiene H₂O₂) sobre la disolución de KMnO₄ de color morado. Como se observa en la figura 23, la disolución morada pierde su color y se vuelve transparente, ya que el permanganato se reduce a Mn²⁺ (incoloro) produciendo O₂ y H₂O.

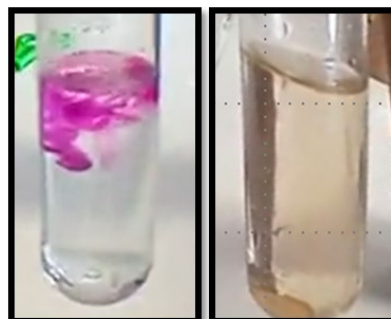


Figura 23. Disolución de H₂O₂ de una barra luminiscentes con MnO₄⁻ (izquierda) y Mn²⁺ (derecha).

Detección de uno de los productos: dióxido de carbono

Uno de los productos de la reacción de quimioluminiscencia es CO₂. Este compuesto forma parte de los extintores porque al ser un gas más denso que el oxígeno es capaz de desplazar a este favoreciendo que se apague la llama consecuencia de las reacciones de combustión.

Para detectar el dióxido de carbono se añadió la disolución de una barra luminiscente dentro de un tubo de ensayo y seguidamente se introdujo una cerilla encendida. Lo que se observa es que la llama se extingue inmediatamente lo que confirma la liberación de CO₂ durante el proceso fotoquímico (Fig. 24).



Figura 24. Cerilla antes (izquierda) y después de ser expuesta a CO₂.

Conclusiones

A través de sustancias accesibles a nuestro alrededor se ha desarrollado un proyecto muy atractivo dentro del programa de Bachillerato de Excelencia que permite al alumnado conocer el fenómeno de luminiscencia en mayor profundidad. Este proyecto proporciona herramientas para analizar la relación que existe entre la química y la luz, pudiéndose observar la estrecha relación que existen entre la fluorescencia y la estructura electrónica de molécula. Todas las moléculas fluorescentes que fueron estudiadas poseen un sistema de electrones π altamente conjugado y estructuras rígidas, lo que favorece la eficiencia cuántica, ya que las transiciones π* → π son las causantes de este fenómeno. De igual manera se pudo observar la diferencia

de manera cualitativa entre los fenómenos de fluorescencia y fosforescencia. Por último, se evaluaron los factores que influyen la reacción química luminiscente que se produce en las barras luminosas, detectando tanto reactivos como productos implicados. Este proyecto permite el acercamiento la ciencia a estudiantes de bachillerato permitiendo un acercamiento a la actividad investigadora, fomentando la curiosidad y el aprendizaje de la química.

Agradecimientos

Agradecer al Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física y Química (GEDH) la concesión del segundo premio a la labor educativa: «Física y Química para el conocimiento de la ciencia y la tecnología cuántica». Agradecer el trabajo de la alumna Margarita Mapane Muadakuku de 2º Bachillerato de Excelencia del IES Francisco Umbral su implicación en este proyecto.

Bibliografía

- [1] P. Douglas, M. Garley, *Science in School* **2010**, 14, 63-68.
- [2] L. Peña, *Revista Digital Universitaria* **2018**, 19(3), <http://doi.org/10.22201/codeic.16076079e.2018.v19n3.a1>.
- [3] P. B. O'Hara, W. St. Peter, C. Engelson, *J. Chem. Educ.* **2005**, 82, 49-52, <https://doi.org/10.1021/ed082p49>.
- [4] S. Heredia Avalos, *Rev. Eureka Enseñ. Divul. Cien.* **2008**, 5(3), 377-381, https://doi.org/10.25267/Rev_Eureka_ensen_divulg_cienc.2008.v5.i3.12.
- [5] H. H. Jaffe, A. L. Miller, *J. Chem. Educ.* **1966**, 43(9), 469-473, <https://doi.org/10.1021/ed043p469>.
- [6] E. Welsh, *Science in School* **2011**, 19, 62-68.
- [7] M. Hamer, A. M. Beraldi, S. G. J. Gómez, F. Ortega, D. Onna, M. Hamer, *J. Chem. Educ.* **2021**, 98(8), 2625-2631, <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.1c00328>.
- [8] D. Wong, "Fluorescence and Phosphorescence", disponible en [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Spectroscopy/Electronic_Spectroscopy/Fluorescence_and_Phosphorescence](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Spectroscopy/Electronic_Spectroscopy/Fluorescence_and_Phosphorescence), consultado (04/03/2026).
- [9] S. G. Schulman, R. M. Threatte, A. C. Capomacchia, W. L. Paul, *J. Pharm. Sci.* **1974**, 63, 6, 876-880, <https://doi.org/10.1002/jps.2600630615>.
- [10] J. R. Lakowicz en *Principles of fluorescence spectroscopy*, (Eds.: J. R. Lakowicz), Springer, Boston, **2006**, 333-351, https://doi.org/10.1007/978-0-387-46312-4_9.
- [11] S. Badui Dergal, *Química de los alimentos*, Pearson, México, **2006**.
- [12] F. Qu, N. Gong, S. Wang, Y. Gao, C. Sun, W. Fang, Z. Men, *Dyes Pigm.* **2020**, 173, 107975, <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2019.107975>.
- [13] P.-H. Bong, *Bull. Korean Chem. Soc.* **2000**, 21(1), 81-86, <https://doi.org/10.5012/bkcs.2000.21.1.81>.
- [14] R. Kuttan, P. Bhanumathy, K. Nirmala, M. C. George, *Cancer Lett.* **1985**, 29(2) 197-202, [https://doi.org/10.1016/0304-3835\(85\)90159-4](https://doi.org/10.1016/0304-3835(85)90159-4).
- [15] R. M. Caraballo, L. M. S. Medina, S. G. J. Gomez, P. Vensaus, M. Hamer, *J. Chem. Educ.* **2021**, 98(3), 958-965, <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c01165>.
- [16] H. H. Tonnesen, en *Phenolic Compounds in Food and Their Effects on Health I ACS Symposium Series, Vol. 506* (Eds.: C.-T. Ho, C. Y. Lee, M.-T. Huang, ACS Publications, Washington, **1992**, pp. 143-153, <https://doi.org/10.1021/bk-1992-0506.ch011>.
- [17] P. Drössler, W. Holzer, A. Penzkofer, P. Hegemann, *Chem. Phys.* **2002**, 282(3), 429-439, [https://doi.org/10.1016/S0301-0104\(02\)00731-0](https://doi.org/10.1016/S0301-0104(02)00731-0).
- [18] H. Diehl, R. Markuszewskis, *Talanta* **1989**, 36(3), 416-418, [https://doi.org/10.1016/0039-9140\(89\)80213-9](https://doi.org/10.1016/0039-9140(89)80213-9).
- [19] T. S. Kuntzleman, K. Rohrer, E. Schultz, *J. Chem. Educ.* **2012**, 89(7), 910-916, <https://doi.org/10.1021/ed200328d>.



Ana M. del Hoyo Martín

Departamento de Física y Química, IES Francisco Umbral, Ciempozuelos, Madrid
Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física y la Química (RSEF y RSEQ)

C-e: anamaria.delhoyomartin@educa.madrid.org
ORCID: 0000-0002-4173-1526

Doctora en Química Orgánica (2014) por la Universidad Autónoma de Madrid. Ha trabajado en investigación en la Universidad de Groningen, ICIQ y NovAlix. Actualmente es profesora de Física y Química en IES Francisco Umbral de Ciempozuelos y miembro del Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física y la Química (RSEQ/RSEF). Ha participado en diferentes eventos de divulgación científica como: Disfrutar Divulgando Desinteresadamente y en la Feria Madrid es Ciencia dentro del stand de la RSEF.

Un itinerario didáctico y divulgativo por Madrid: La Ilustración española y el descubrimiento de tres elementos químicos

An educational itinerary through Madrid: The Spanish Enlightenment and the discovery of three chemical elements

Gabriel Pinto Cañón* y Victoria Alcázar Montero

E.T.S. de Ingenieros Industriales, Universidad Politécnica de Madrid.

Grupo Especializado en Didáctica e Historia, Reales Sociedades Españolas de Física y de Química.

PALABRAS CLAVE:

Actividad extraescolar
Divulgación de la ciencia
Elementos químicos
Historia de la ciencia
Ilustración española
Madrid
Paseo didáctico
Turismo científico

KEYWORDS:

Extracurricular activity
Science outreach
Chemical elements
History of science
Spanish Enlightenment
Madrid
Educational walk
Scientific tourism

RESUMEN:

Se presenta un itinerario didáctico y divulgativo por Madrid que vincula espacios urbanos con la Ilustración española y el descubrimiento de tres elementos químicos —platino, wolframio y vanadio— por científicos españoles. La actividad se integra en proyectos previos de divulgación y de Aprendizaje Servicio, orientados a públicos diversos, y persigue fomentar el conocimiento de relaciones Ciencia, Tecnología, Sociedad, Historia y Arte. El recorrido, situado en parte en el actual Paisaje de la Luz (Patrimonio Mundial de la UNESCO desde 2021), se estructura en nueve etapas que permiten contextualizar manufacturas reales, instituciones científicas y figuras clave del siglo XVIII. Se destacan las contribuciones de Antonio de Ulloa —descubridor del platino y miembro de la Misión Geodésica—, de los hermanos Delhuyar —que aislaron el wolframio— y de Andrés Manuel del Río —identificador del eritronio, posteriormente denominado vanadio—. Cada parada incorpora explicaciones breves sobre procesos científicos, controversias históricas y conexiones entre España y la América virreinal.

ABSTRACT:

An educational and outreach itinerary through Madrid is presented, linking urban spaces with the Spanish Enlightenment and with the discovery of three chemical elements—platinum, tungsten, and vanadium—by Spanish scientists. The activity is integrated into previous outreach and Service Learning projects aimed at diverse audiences, and seeks to promote the understanding of the relationships among Science, Technology, Society, History, and Art. The route, partly located within the current Paisaje de la Luz (a UNESCO World Heritage Site since 2021), is structured into nine stages that contextualize royal manufactories, scientific institutions, and key figures of the eighteenth century. The contributions of Antonio de Ulloa—discoverer of platinum and member of the Geodesic Mission—of the Delhuyar brothers—who isolated tungsten—and of Andrés Manuel del Río—who identified erythronium, later renamed vanadium—are highlighted. Each stop incorporates brief explanations of scientific processes, historical controversies, and connections between Spain and the Viceroyal America.

Introducción

En los últimos años, hemos diseñado e implementado itinerarios didácticos y divulgativos por Madrid, en los que pretendemos difundir aspectos de la historia de la ciencia y la tecnología entre públicos diversos (estudiantes y profesores de diferentes etapas educativas y países, participantes en congresos científicos, público en general...). En algunas ocasiones, se han realizado en el contexto de proyectos de Aprendizaje-Servicio (ApS), contando con la colaboración de profesorado de distintas áreas de conocimiento y estudiantes universitarios de ramas de ingeniería y de formación del profesorado.

Algunos de los resultados educativos y en el ámbito de la divulgación, se han publicado en otros medios.^[1-3] Dada la estrecha conexión de uno de los paseos con el ámbito de la

química, se ha considerado oportuno detallarlo en esta publicación, para promover su conocimiento y facilitar su recorrido, entre profesionales del área. En concreto, se trata de la ruta que solemos denominar “La Ilustración española y el descubrimiento de tres elementos químicos”.

En este trabajo, tras comentar los objetivos planteados con la actividad, se describen las etapas de la ruta y, de forma somera, algunas de las explicaciones que se aportan en cada una de ellas.

Objetivos del itinerario didáctico y divulgativo

Los objetivos fundamentales que se plantean cuando se lleva a cabo el paseo, son:

1. Fomentar el conocimiento de relaciones Ciencia, Tecnología, Sociedad, Historia y Arte, tanto entre el público participante como entre el profesorado y alumnado universitario que colabora en su organización.
2. Aprender sobre temas de historia de la ciencia y de la técnica, en el contexto de la época histórica conocida como Ilustración Española.
3. Profundizar en el conocimiento de la gesta de cuatro científicos españoles (Antonio de Ulloa (1716-1795), los hermanos Delhuyar –Juan José (1754-1796) y Fausto (1755-1833)– y Andrés Manuel del Río (1764-1849)) que descubrieron tres elementos químicos (platino, wolframio y vanadio, respectivamente), así como de otros científicos, ingenieros y arquitectos de la época.
4. Reflejar y evocar huellas de estos científicos en Madrid.
5. Resaltar la importancia de la tabla periódica (uno de los principales hitos no solo de la ciencia, sino del conjunto de la cultura). Sin ser conscientes de ello, los cuatro personajes citados contribuyeron a su génesis.
6. Divulgar la riqueza de las relaciones históricas, sociales y culturales entre España y la América española, en el siglo XVIII y principios del XIX.
7. Abordar, de forma complementaria, temas concretos de otras áreas de ciencia y tecnología, como la óptica, la geodesia y la botánica.
8. Colaborar en la proyección de Madrid como destino turístico de interés científico. La mayor parte del recorrido que se propone se incluye en el *Paisaje de la Luz* –también conocido como *Paseo del Prado y el Buen Retiro, paisaje de las artes y las ciencias*–, declarado en 2021 como *Patrimonio de la Humanidad* por la UNESCO en la categoría de *Paisaje Cultural*.
9. Contribuir a la consecución de Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) concretos, como son:
 - ODS 4, Educación de Calidad (garantizar una educación inclusiva, equitativa y de calidad y promover oportunidades de aprendizaje durante toda la vida para todos). Especialmente con las metas 4.4 (“...aumentar considerablemente el número de jóvenes y adultos que tienen las competencias necesarias...”), 4.7 (“... valoración de la diversidad cultural y la contribución de la cultura al desarrollo sostenible...”) y 4.c (“...aumentar considerablemente la oferta de docentes cualificados...”).
 - ODS 11, Ciudades y Comunidades Sostenibles (lograr que las ciudades sean inclusivas, seguras, resilientes y sostenibles), esencialmente con la meta 11.4 (“...redoblar los esfuerzos para proteger y salvaguardar el patrimonio cultural y natural del mundo...”).

Introducción a la Ilustración española

España desempeñó un papel destacado en el descubrimiento de los tres elementos químicos mencionados en el apartado anterior. No se trata de hazañas aisladas, sino que fue el resultado de un esfuerzo colectivo y una de las consecuencias del impulso regenerador acometido durante el siglo XVIII, en el contexto de la Ilustración española y las consiguientes reformas borbónicas.^[4] Tras la muerte de Carlos II (1661-1700) (último rey de la casa de Habsburgo) sin descendencia, se desarrolló a nivel internacional la Guerra de Sucesión –conflicto bélico entre las potencias europeas que se inició en 1701 y duró hasta 1714 con la firma del Tratado de Utrecht–, que consolidó, con Felipe V (1683-1746), la dinastía borbónica.

Como es bien sabido, la Ilustración fue un movimiento filosófico y cultural que subrayaba el predominio de la razón

(racionalismo) y el fomento de la libertad de pensamiento, que representó una forma de globalización cultural.^[5,6] Entre otras características de su desarrollo en España –tras la introducción de las ideas reformistas por los “novatores”–, cabe mencionar un interés generalizado por reformar multitud de ámbitos (obras públicas, comunicaciones, educación, agricultura, industria –incluidas mejoras económicas y técnicas en sectores como la minería y la metalurgia en la América española– ..., en las conocidas como reformas borbónicas.^[7,8] Se desarrollaron cambios administrativos para remodelar o crear ciertas estructuras del Estado (virreinos, intendencias, capitanías generales...) –para hacerlo más eficiente y centralizado–, a través de gobiernos de *despotismo ilustrado*, en los que los monarcas se apoyaron en personas bien formadas. Hubo también multitud de iniciativas para promover la formación científica y técnica en los ejércitos y un esfuerzo por desarrollar una “ciencia nacional” que permitiera aplicar la tecnología a un mejor aprovechamiento de los recursos. Muestra de ello es la creación de instituciones científicas y docentes como la Real Academia de Guardiamarinas (Cádiz, 1717), la Academia Militar de Matemáticas y Fortificación (Barcelona, 1720), el Colegio de Cirugía (Cádiz, 1748), el Real Seminario Patriótico de Vergara (Guipúzcoa, 1776) y la Academia de Minas de Almadén (Ciudad Real, 1777). También se financiaron expediciones científicas, especialmente por América. Además, se fomentó el intercambio científico con otros países, mediante acciones como el envío de jóvenes “pensionados” para ampliar estudios en los principales centros educativos europeos, la organización de programas de “comisiones secretas” (equivalente a lo que podría ser el espionaje industrial actual), y la contratación de científicos e ingenieros extranjeros (Heinrich Störr, Joseph Louis Proust, Pierre François Chavaneau...) para enseñar en los centros recién creados o renovados. Para propagar ideas reformistas, se crearon *Sociedades Económicas de Amigos del País* en multitud de ciudades. De este modo, se puede considerar que España se incorporó de una manera efectiva a la revolución científica de la época.

La ocupación francesa de España, entre 1808 y 1813, enmarcada en la Guerra de la Independencia, supuso el fin del reformismo ilustrado –ya debilitado a la muerte de Carlos III (1716-1788), prototipo de rey ilustrado, dado que su hijo y sucesor, Carlos IV (1748-1819), facilitó un ciclo de reacción ante el temor causado por la Revolución francesa (1789)– y el inicio de un periodo convulso. Paradójicamente, esta invasión trajo consigo reformas ilustradas y revolucionarias, pero su imposición por la fuerza provocó el rechazo popular.

Etapas del paseo didáctico y divulgativo

La ruta consiste en un paseo de unas dos horas y media de duración incluyendo las explicaciones en las distintas etapas. Se inicia en la fuente del Ángel Caído del Parque del Buen Retiro, sigue por la plaza del Emperador Carlos V (conocida popularmente como glorieta de Atocha) y, pasando por el Paseo del Prado, el Palacio de las Cortes, y la calle del Ave María en Lavapiés, llega hasta el Instituto de Educación Secundaria San Isidro. La primera etapa es buen momento para explicar las ideas fundamentales de la ruta, introduciendo el periodo ilustrado y cuestiones aclaratorias sobre lo que son los elementos químicos y la tabla periódica, y la importancia de los metales. Por ejemplo, se emplea material de apoyo que incluye imágenes de algunos arquitectos emblemáticos mencionados más adelante y retratados por Francisco de Goya (1744-1828), el gran pintor del periodo.

Aquí se recoge la “ruta completa”, pero puede haber versiones más breves al acortar el recorrido en la salida y en la etapa final. Así, a menudo, se inicia en lo que aquí figura como

etapa 2 (explicando allí el contenido de la primera) y finaliza en la etapa 7, explicando desde allí las dos finales.

Como típica “ruta guiada”, cuando se lleva a la práctica con un grupo, se muestran láminas, esquemas y fotografías, como los retratos de los protagonistas y el aspecto de los edificios de su época, para enriquecer el contenido.

En la figura 1 se muestra un mapa de las diferentes etapas del recorrido. En los siguientes epígrafes se recoge una descripción breve de cada etapa, tal y como se lleva a cabo en general. La idea es que cualquier persona interesada en el tema la pueda hacer con estas indicaciones e información complementaria a la que se puede acceder fácilmente en la web.

Etapa 1: Restos de la antigua Real Fábrica de Porcelana del Buen Retiro

Esta fábrica, conocida popularmente como “La China”, estuvo situada en la actual rotonda del Ángel Caído, dentro del Parque del Retiro. Se conservan únicamente los restos de una noria del siglo XVII empleada en dicha fábrica, que se descubrió en excavaciones realizadas entre 1996 y 2000. La fábrica — ejemplo de manufactura real— fue fundada por Carlos III, con artesanos de Nápoles, en el emplazamiento de una antigua ermita. Su objetivo era producir cerámicas destinadas al Palacio Real y otros sitios regios mediante técnicas cuyo proceso era secreto de Estado.^[9] Aunque durante un tiempo se pensó que fue destruida por los franceses, hoy en día se considera que fueron las tropas inglesas en 1812 tras derrotar a los galos acuartelados allí. La fabricación de la cerámica no es un hecho anecdótico; tendrá su reflejo en posteriores etapas del paseo.

Etapa 2: Real Observatorio de Madrid

Construido también por iniciativa de Carlos III, a propuesta de Jorge Juan y Santacilia (1713-1773), fue inaugurado en 1790. El arquitecto fue Juan de Villanueva y de Montes (1739-1811), y la idea inicial era que formara parte de un “Eje de las Ciencias”, junto con el *Real Gabinete de Historia Natural* (en el edificio que posteriormente sería el Museo del Prado) y el *Real Jardín Botánico*.^[10] Actualmente es la sede del *Observatorio Astronómico Nacional*, dependiente del *Instituto Geográfico Nacional*, y se puede visitar (destaca una réplica de un telescopio de Herschel de 60 cm de diámetro; el original fue destruido en 1808 durante la ocupación francesa).^[11]

Etapa 3: Palacio de Fomento

Obra de Ricardo Velázquez Bosco (1843-1923), el edificio fue construido, en los terrenos del *Real Jardín Botánico*, entre 1893 y 1897. Proyectado como *Escuela de Arte y Oficios y Facultad de Ciencias*, finalmente se destinó a sede del Ministerio de Fomento (desde 1931 ha sido la sede del *Ministerio de Agricultura*, con distintas denominaciones). Aunque pertenece a un periodo muy posterior a la Ilustración, se utiliza para hablar de la vida y obra de Antonio de Ulloa, debido a la presencia de una estatua suya en la fachada principal (ver figura 2). Ulloa nació en Sevilla en 1716 e ingresó en 1733 en la *Real Academia de Guardiamarinas* de Cádiz. Entre 1735 y 1744 participó, junto con Jorge Juan, en la *Misión Geodésica Francesa*, una expedición científica emblemática por el *Virreinato del Perú*, en los actuales Colombia y Ecuador, que ayudó a determinar que la Tierra está achatada por los polos. Además de resolver una cuestión científico-filosófica, el hallazgo tenía importantes aplicaciones para la elaboración de cartas náuticas. Durante el viaje de regreso, Ulloa fue capturado por corsarios ingleses que lo llevaron prisionero a Inglaterra.^[12] Allí, en la *Royal Society*, comunicó su intuición de que la *platina* —hasta entonces considerada una impureza indeseable del oro en zonas estudiadas durante la expedición— era en realidad un metal distinto, cuyo nombre evolucionaría con el tiempo hasta “platino”, único elemento químico cuyo símbolo tiene raíz etimológica española.^[13] Entre otros resultados de la *misión*, Ulloa describió también un fenómeno óptico que hoy se conoce como “los anillos de Ulloa”. Entre 1749 y 1751 participó en una “comisión secreta” por varios países europeos. Además de su labor como oficial de la Marina —llegó a ser el primer gobernador del vasto territorio de Luisiana y superintendente de las minas de mercurio de Huancavelica, en Perú—, redactó un informe sobre la limpieza de Madrid, propuso la creación del *Gabinete de Historia Natural* en la ciudad e inició el proyecto que terminaría siendo el *Canal de Castilla*, entre otras acciones.^[14] En este punto de la ruta se dedica tiempo a explicar la *Misión Geodésica* y se anima a los participantes a visitar, en otro momento, el *Museo Naval*, que conserva importantes piezas (cuadrantes, catalejos, niveles geodésicos...) usadas por Antonio de Ulloa y Jorge Juan.

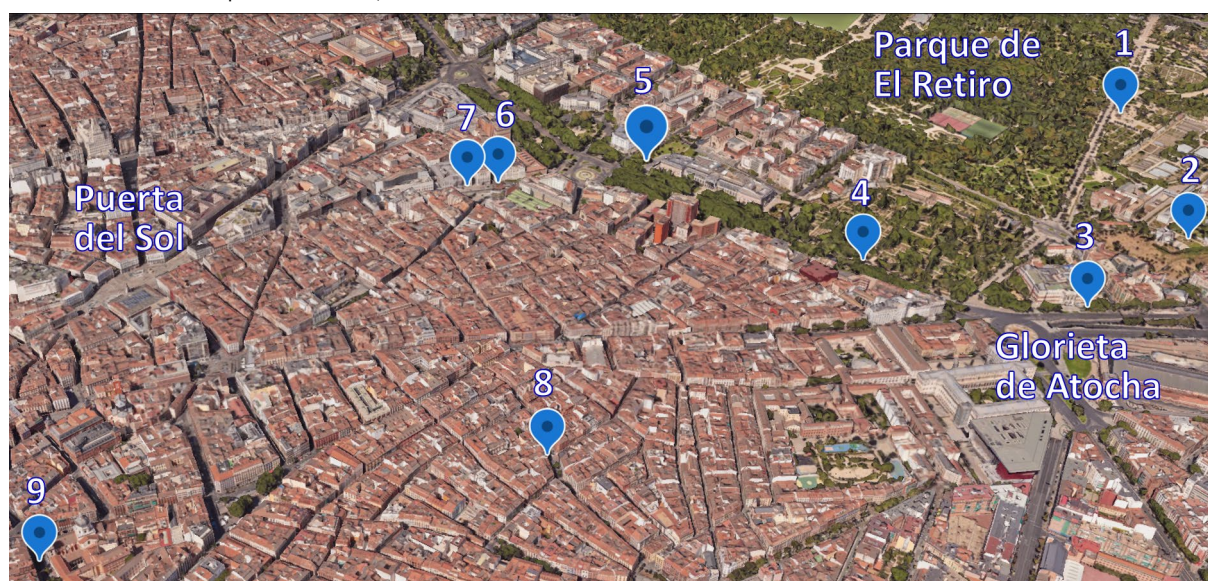


Figura 1. Plano que recoge el área de Madrid donde se desarrollan las etapas comentadas en el texto y algunas zonas emblemáticas para ayudar a la ubicación. Fuente: Los autores (aplicación de Google Earth).



Figura 2. Fotografía del Palacio de Fomento en 2024 (Imagen de Fernando - reproducida de Ref. [15] bajo licencia CC BY-SA 4.0) y detalle de la estatua de Antonio de Ulloa situada en su fachada (Imagen de Luis García, reproducida de Ref. [16] bajo licencia CC BY-SA 3.0).

Etapas 4 y 5: Puerta de Sabatini del Real Jardín Botánico y Fachada principal del Museo Nacional del Prado

Fundado en 1755 a orillas del río Manzanares y trasladado a su ubicación actual entre 1774 y 1781, bajo la dirección de Francesco Sabatini (1721-1797) y Juan de Villanueva, la finalidad del *Real Jardín Botánico* era el estudio y la enseñanza de la botánica, así como la organización de expediciones científicas como la *Real Expedición Botánica al Nuevo Reino de Granada*, dirigida por José Celestino Mutis (1732-1808), que destacó por la calidad de sus láminas y la descripción de numerosas especies.^[17,18] Este naturalista coincidió en la actual Colombia con Juan José Delhuyar. La etapa 4, cuya parada está en la puerta principal del *Jardín Botánico* en el Paseo del Prado (ver figura 3), continúa (etapa 5) hasta la fachada principal del *Museo Nacional del Prado*, cuyo edificio comenzó a construirse en 1786 también por Villanueva, con la intención de albergar el *Real Gabinete de Historia Natural*, la *Academia de Ciencias* y un laboratorio de química. Tras sufrir graves daños durante la invasión napoleónica, fue inaugurado en 1819 como *Real Museo de Pinturas y Esculturas*, a iniciativa de Fernando VII (1784-1833), impulsado por su esposa, la reina María Isabel de Braganza (1797-1818).

Etapas 6: Calle donde se ubicó la Casa de la Platina

Esta etapa se ubica en la calle del Marqués de Cubas, esquina con la carrera de San Jerónimo. La denominada "Casa de la Platina" que albergó la Real Fábrica de Platina y la *Escuela de Física, Química y Mineralogía*, estuvo ubicada originalmente



Figura 3. El Jardín Botánico desde el Paseo del Prado (óleo de Luis Paret y Alcázar (1746-1799), sobre 1795, reproducida de Ref. [20]) y fotografía actual de la misma puerta, durante la realización de uno de los paseos por la ruta descrita (fuente: los autores).

en la calle Hortaleza (en la manzana 330, actual número 87), fuera del recorrido, en lo que con el tiempo fue una fábrica de cerveza, y más tarde un palacio, conocido como de Santa Bárbara. Fue dirigida por los químicos franceses Pierre François Chavaneau (1754-1842) y Joseph Louis Proust (1754-1826), protagonistas de relevantes estudios sobre la purificación y el tratamiento del platino.^[19] En 1791 se trasladó a la calle de los Jardines, posteriormente denominada calle del Turco (donde sufrió un atentado mortal el general Juan Prim y Prats (1814-1870) y, en la actualidad, calle del Marqués de Cubas.

Etapas 7: Palacio de las Cortes

El edificio del Congreso de los Diputados, construido entre 1843 y 1850, es relevante para la ruta (ver figura 4) porque en otro colindante vivió sus últimos años y falleció Fausto de Delhuyar. Nacido en Logroño (1755) estudió cirugía, matemáticas e historia natural en París, completó su formación en otras instituciones europeas y fue profesor de Mineralogía y Metalurgia en el Real Seminario Patriótico de Vergara, donde coincidió con Chavaneau. Allí, en 1783, obtuvo el wolframio junto con su hermano Juan José.^[21] Tras estancias en otros centros europeos, Fausto fue designado director general de Minería del Virreinato de Nueva España y fundó el Colegio y el *Palacio de Minería* en Ciudad de México. Regresó a España en 1822, a raíz de la independencia de México, como director general de Minas y director de la Escuela de Minas de Almadén. Creó la Dirección General de Minas que se trasladó, en 1827, con un laboratorio de ensayos y una cátedra de química docimástica (de ensayo de metales) a la calle Florín (hoy de Fernánflor) y murió en 1833.^[22] Su hermano Juan José, un año mayor que él y de formación internacional similar, fue pensionado en Suecia para mejorar la química para la fabricación de cañones. Allí, Torbern Olof Bergman (1735-1784) y Carl Wilhelm Scheele (1742-1786) le introdujeron en los métodos modernos de laboratorio de química y le sugirieron que podría haber un metal nuevo en el mineral *tungsten* (hoy conocido como scheelita). Posteriormente, fue nombrado director

general de Minas de Nueva Granada, Falleció a los 42 años en Santa Fe de Bogotá en 1796.^[23] Esta etapa es buena ocasión para informar de la controversia en la denominación del wolframio como *tungsteno*, y de los procesos químicos que llevaron a la obtención del nuevo metal por los hermanos Delhuyar.

Etapas 8 y 9: Casa natal de Andrés Manuel del Río e I.E.S. San Isidro

Andrés Manuel del Río nació en 1764 en la calle del Ave María (n.º 23 actual) del barrio de Lavapiés, a donde se llega en esta etapa del paseo.^[24] Fue bautizado en la cercana Iglesia de San Sebastián y estudió en los Reales Estudios de San Isidro, donde hoy se encuentra el actual Instituto de Educación Secundaria del mismo nombre. Se formó en minería y química en la Academia de Minas de Almadén y, posteriormente, en otros centros de Europa (París, Schemnitz, Freiberg...) durante casi una década. En 1793 fue nombrado profesor del *Real Seminario de Minería* de México, donde enseñó mineralogía y laboreo de minas, coincidiendo con Fausto Delhuyar. Regresó a España, brevemente (entre 1821 y 1822), como representante de Nueva España en el Parlamento (ubicado entonces en el actual edificio del Senado) durante el *Trienio Liberal*, residió un lustro en Estados Unidos, colaborando con destacadas sociedades científicas y murió en México, en 1849. En 1801 analizó unas muestras de *plomo pardo* en Zimapán —se pensaba que eran fosfato de plomo y hoy en día se conoce como vanadinita, $Pb_3Cl(VO_4)_3$ —, encontrando el óxido de un metal desconocido que denominó eritronio —previamente barajó los nombres de zimapanio y pancromo—. Comunicó el hallazgo a su amigo Alexander von Humboldt (1769-1859) que estaba entonces en una expedición científica por la zona. Humboldt pasó unas muestras al químico francés Hippolyte Victor Collet-Descotils (1773-1815), quien concluyó que no se trataba de un nuevo elemento químico. En 1830 el sueco Nils Gabriel Sefström (1787-1845), apoyado por su maestro Jöns Jacob Berzelius (1779-1848), encontró lo que pensó que era un nuevo metal que denominó vanadio (de la diosa escandinava de la belleza Vanadis).^[25] Poco después, Friedrich Wöhler (1800-1882) analizó una muestra de *plomo pardo* de Humboldt y concluyó que el óxido de vanadio era idéntico al de eritronio de Del Río. A mediados del siglo XX, hubo intentos desde México (donde Del Río ha sido y es muy apreciado), con el apoyo de Linus Carl Pauling (1901-1994), de que se cambiara el nombre de vanadio por eritronio, pero la IUPAC no lo consideró pertinente. Como homenaje a Del Río y a la importancia del *IES San Isidro*, la ruta completa termina en este emblemático instituto de Madrid que, precisamente este año (2026) está realizando un gran número de actividades y exposiciones de material educativo histórico, con motivo del IV centenario de los *Reales Estudios de San Isidro*. Como curiosidad anunciada al inicio del paseo, al comentar la fundación de la *Real Fábrica de Porcelanas*, se indica que Del Río, en su visita a París en el inicio de sus estudios internacionales, tenía como un objetivo subsanar unos defectos de fabricación de la cerámica en dicha entidad y, además, uno de sus últimos artículos científicos versó sobre cerámica de Puebla en México.

Resultados y conclusiones

Las etapas resumidas en el apartado anterior son una mera indicación de lo tratado en la ruta. En su realización práctica se comentan muchas más cuestiones, adaptándolas al público concreto, con la idea de que sea un paseo dinámico, lo más distendido posible.

A modo de ejemplos: en la primera etapa, se muestra una tabla con los símbolos alquimistas de los siete metales de la antigüedad y su relación con dioses de la mitología romana,

planetas y días de la semana;^[26] en la etapa 2 se muestra un balón hinchable con el mapamundi para explicar el objetivo de la Misión Geodésica y un catalejo para ilustrar el proceso matemático de medidas topográficas por triangulación; en la etapa 7 se muestra un frasco de reactivo de *sodium tungstate* para ilustrar que en español es wolframato de sodio, así como una bombilla antigua con filamento de wolframio (uso emblemático de este metal); en la misma etapa, se muestran grabados antiguos donde se recoge el edificio donde falleció Fausto Delhuyar, colindante con la *Iglesia del Espíritu Santo* (donde hoy se levanta el edificio del Congreso), y en la etapa 8 se despliega una fotografía de gran tamaño del *Retablo de la Independencia*, mural del mexicano Juan O’Gorman (1905-1982) donde se rinde homenaje a Humboldt, Fausto Delhuyar y Andrés Manuel del Río.^[27]



Figura 4. Palacio de las Cortes en 1853, con el edificio anejo (parte superior) donde años antes trabajó y falleció Fausto Delhuyar. Fuente: Pinterest, dominio público.

La idea de esta ruta se fraguó con motivo del Año Internacional de la Tabla Periódica (2019), al apreciar que en Madrid hay vestigios de interés que permiten relacionar una época brillante de la cultura, la Ilustración española, con uno de sus resultados que no es muy conocido: el descubrimiento de tres elementos químicos.

Desde hace tres años se lleva a cabo por diversos motivos: actividad complementaria de algún máster universitario que imparten los autores, actividad social de algún congreso que se celebra en Madrid, petición de algún profesor para grupos específicos (estudiantes de universidades extranjeras en visita a Madrid, alumnos de altas capacidades, universidad de la experiencia...), etc. También, periódicamente se difunde, especialmente durante la Semana de la Ciencia y la Innovación de Madrid, y la actividad UPM Conecta, mediante conferencias.

A través de encuestas y comentarios personales, se vislumbra un gran aprecio por la realización de la actividad entre el público participante —en general, sorprendido (gratamente) de que desde España se haya colaborado tan intensamente en el descubrimiento de tres elementos químicos y de las relaciones estrechas científico-culturales, además de históricas, con los países hermanos de Hispanoamérica—.

Desde la perspectiva docente y divulgativa, la actividad ha resultado altamente satisfactoria; no solo ha permitido difundir temas de interés, sino que también ha propiciado un enriquecimiento significativo en torno a las relaciones entre historia, ciencia, técnica, arte y sociedad por parte del equipo responsable. A modo de invitación final, para quienes se encuentren en Madrid o tengan previsto visitarla, se anima encarecidamente a realizar el recorrido y a descubrir cómo la ciencia cobra vida en primera persona a través de las calles de la ciudad.

Agradecimientos

Se agradecen las ayudas de la *Universidad Politécnica de Madrid* (Proyecto “Madrid con ciencia: paseos para descubrir nuestro pasado científico”, Convocatoria de «Proyectos de Aprendizaje-Servicio» 2024) y la *Sección Territorial de Madrid de la Real Sociedad Española de Química* (Proyecto “Tras las huellas de la ciencia en Madrid”, Convocatoria de «Ayudas para la realización de actividades divulgativas y educativas» 2026). Asimismo, se agradecen los comentarios y sugerencias de los revisores, que han contribuido a mejorar este manuscrito.

Bibliografía

- [1] G. Pinto, V. Alcázar, M. Martín-Conde, Á. Agüero, M. P. Arrieta, F. R. Beltrán, P. García-Muñoz, J. A. Sepúlveda, *Advances in Building Education (ABE)*, **2025**, 9(1), 9-30.
- [2] G. Pinto, V. Alcázar, M. Martín Conde, en *Experiencias y estrategias de innovación educativa en ciencia, tecnología, ingeniería y matemáticas (IV)*, (Eds.: M. González Montero de Espinosa, A. Herráez Sánchez), Grupo SM, Madrid, **2025**, pp. 207-217, <https://doi.org/10.5281/zenodo.1400950Z>.
- [3] G. Pinto, M. Martín Conde, A. Agüero, V. Alcázar, N. Arabaseri, M. P. Arrieta, F. R. Beltrán, P. García Muñoz, M. Isar, I. López Hernández, F. Martín García, C. Matías, “Diseño e implementación de rutas divulgativas STEAM en Madrid: Un proyecto de Aprendizaje-Servicio” disponible en <https://zaguan.unizar.es/record/131922> **2023** (consultado: 03/03/2026).
- [4] G. Pinto, en *Experiencias y estrategias de innovación educativa en ciencia, tecnología, ingeniería y matemáticas (III)* (Eds.: M. González Montero de Espinosa, A. Herráez Sánchez), Grupo SM, Madrid, **2023**, pp. 155-163.
- [5] T. Munck, G. G. Djembé, *Historia social de la Ilustración, Crítica*, **2001**.
- [6] D. Outram, *The enlightenment*, Cambridge University Press, **2019**.
- [7] A. Lafuente, N. Valverde Pérez. *Los mundos de la ciencia en la Ilustración Española*, Fundación Española para la Ciencia y Tecnología, **2003**.
- [8] A. J. Kuethe, K. J. Andrien, *The Spanish Atlantic world in the eighteenth century: War and the Bourbon Reforms, 1713-1796*, Cambridge University Press, **2014**.
- [9] C. M. Mañueco Santurtún, *Bol. Soc. Esp. Ceram. Vidrio* **1999**, 38(4), 335-344.
- [10] L. Herranz Durández, *Del Observatorio Astronómico a la Virgen de Atocha (Madrid): una historia de oportunidades perdidas*, E.T.S. Arquitectura (UPM), Madrid, **2017**.
- [11] J. M. Sánchez-Ron, *Phys. perspect*, **2006**, 8, 318-343, <https://doi.org/10.1007/s00016-005-0261-3>.
- [12] J. F. Guillén Tato, *Los tenientes de navío Jorge Juan y Santacilia y Antonio de Ulloa y de la Torre-Guiral y la medición del Meridiano*, Caja de Ahorros de Novelda, Madrid, **1973**.
- [13] G. Pinto, *J. Chem. Educ.* **2017**, 94(7), 970-975, <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.6b01007>.
- [14] A. Gutiérrez Escudero, en *Actas del II Centenario de don Antonio de Ulloa* (Eds.: M. Losada, C. Varela), CSIC - Escuela de Estudios Hispanoamericanos (EEHA), **1995**, 257-270.
- [15] “Palacio de Fomento”, disponible en https://es.wikipedia.org/wiki/Palacio_de_Fomento, **2025** (consultado: 18/06/2026).
- [16] “Antonio de Ulloa”, disponible en https://es.wikipedia.org/wiki/Antonio_de_Ulloa, **2026** (consultado: 18/06/2026).
- [17] C. Añón, *Real Jardín Botánico de Madrid: sus orígenes, 1755-1781*, Real Jardín Botánico CSIC, Madrid, **1987**.
- [18] A. Rodríguez, *Expediciones científicas españolas del siglo XVIII*, Edaf, Madrid, **2023**.
- [19] P. D. Cano, *De re metallica* (Madrid): **2016**, 27, 47-56.
- [20] L. Paret y Alcázar, “El Jardín Botánico desde el Paseo del Prado”, disponible en <https://www.museodelprado.es/coleccion/obra-de-arte/el-jardin-botanico-desde-el-paseo-del-prado/e7d3ff35-7cfe-42a6-90f2-64737fb96c54>, **1792 - 1799** (consultado: 18/06/2026).
- [21] P. Román Polo, en *La proyección mundial de los hermanos Delhuyar en el campo de la ciencia y de la economía* (Eds.: S. Ibáñez) Universidad de La Rioja, **2022**, pp. 121-166.
- [22] I. Pellón González, en *XI Congreso de la Sociedad Española de Historia de las Ciencias y de las Técnicas* (Eds.: J. M. Urkia), Real Sociedad Bascongada de los Amigos del País, Guipúzcoa, **2012**, pp. 27-62.
- [23] P. Román Polo, en “Entre la alquimia y la química”, (Eds.: J. M. Salas, L. F. Vallvey) Editorial Universidad de Granada **2017**, pp. 93-120.
- [24] G. Pinto, *An. Quím.* **2020**, 116(1), 38-42.
- [25] O. Puche Riart, *Fundetel* **2001**, 5, 72-84.
- [26] P. Román Polo, *ConCIENCIAS. Digital*: **2019**, 24, 38-55.
- [27] G. Pinto, *Educ. Quím.* **2022**, 33(4), 143-155, <https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.2022.4.0.82131>.



Gabriel Pinto Cañón

E.T.S. Ingenieros Industriales, Universidad Politécnica de Madrid. Grupo Especializado en Didáctica e Historia, común a las Reales Sociedades Españolas de Física y de Química

C-e: gabriel.pinto@upm.es

ORCID: 0000-0002-8961-7255

Licenciado (1985) y Doctor (1990) en Ciencias Químicas por la Universidad Complutense de Madrid, se incorporó como docente a la E.T.S. de Ingenieros Industriales (Universidad Politécnica de Madrid) en 1986, donde ejerce como catedrático de universidad (área de ingeniería química). Ha investigado sobre espectroscopía, polímeros y materiales compuestos de matriz polimérica, recursos didácticos, educación STEAM e historia de la ciencia, habiendo publicado más de 200 artículos. Ha dedicado un esfuerzo especial a la divulgación científica en multitud de formatos (conferencias, talleres, ferias, artículos, libros, webs...), reconocido por el Premio Nacional a la Difusión de la Ciencia otorgado en 2020 por la Confederación de Sociedades Científicas de España, entre otros.



Victoria Alcázar Montero

E.T.S. Ingenieros Industriales, Universidad Politécnica de Madrid. Grupo Especializado en Didáctica e Historia, común a las Reales Sociedades Españolas de Física y de Química

C-e: marivictoria.alcazar@upm.es

ORCID: 0000-0002-1891-3209

Realizó los estudios de Licenciatura (1986) y Doctorado (1989) en Ciencias Químicas en la Universidad de Salamanca. A continuación, fue becaria postdoctoral Fulbright (1990-1992) en la Universidad de California Los Ángeles y, más tarde (1992-1993), profesora ayudante en el Instituto Tecnológico de Zúrich (ETH). Se incorporó a la Universidad Autónoma de Madrid (1993-1996) con un contrato de incorporación a España de Doctores y Tecnólogos y, tras trabajar como Profesora de Enseñanza Secundaria (1996-2007), se unió al Departamento de Ingeniería Química Industrial y del Medio Ambiente de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales (Universidad Politécnica de Madrid) donde, en la actualidad, es catedrática de universidad.

Noticias de la RSEQ

PREMIOS RSEQ 2026

Daniel Maspoch, Medalla de la RSEQ 2026

Daniel Maspoch (L'Escala, Alt Empordà, 1976) se licenció en Química por la Universitat de Girona en 1999 y obtuvo el doctorado en Ciencia de Materiales por la Universitat Autònoma de Barcelona y el Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (CSIC) en 2004, bajo la dirección del Prof. Jaume Veciana, Prof. Daniel Ruiz-Molina y la Prof. Concepció Rovira. Posteriormente realizó una estancia postdoctoral en la Northwestern University (USA), en el grupo del Prof. Chad A. Mirkin, donde se introdujo en el campo de la nanotecnología trabajando en técnicas nanolitográficas como la *Dip-Pen Nanolithography*.

En 2007, tras obtener un contrato Ramón y Cajal, se incorporó al Institut Català de Nanotecnologia (ICN). En 2010 inició su carrera científica independiente en el ya consolidado Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia (ICN2), centrando su investigación en materiales reticulares porosos, llevándolos a la escala nanoscópica, así como en sistemas avanzados de liberación controlada. En 2011 fue nombrado profesor de investigación ICREA.

El grupo del Prof. Maspoch ha realizado contribuciones destacadas al diseño, síntesis y estudio de materiales porosos, particularmente en el ámbito de los *metal-organic frameworks* (MOFs), los *covalent organic frameworks* (COFs) y las cajas moleculares, orientados a aplicaciones en energía, purificación de agua, recubrimientos antimicrobianos y otras tecnologías avanzadas. En el ámbito de la innovación y la transferencia tecnológica, mediante el desarrollo de nuevos sistemas de liberación controlada, ha colaborado con más de veinte empresas a través de 26 contratos de investigación, ha llevado al mercado tres productos desarrollados en sus laboratorios y comercializados internacionalmente, ha presentado 16 patentes, cuatro de ellas licenciadas, ha suscrito cuatro contratos de transferencia tecnológica y es cofundador de la empresa *Ahead Therapeutics*. Más recientemente, ha impulsado un nuevo paradigma sintético denominado *Clip-off Chemistry*, basado en la deconstrucción racional de estructuras moleculares preformadas mediante la ruptura selectiva de enlaces. Esta estrategia ha abierto rutas inéditas para la síntesis de nuevas (macro)moléculas y materiales, con resultados publicados en revistas de máxi-



Prof. Daniel Maspoch.

mo impacto y adoptados ya por grupos internacionales. Su producción científica supera los 230 artículos. Cabe destacar también su labor como mentor, con 24 tesis doctorales defendidas y más de 10 actualmente en curso.

La investigación del Prof. Maspoch ha sido reconocida con distinciones como el Premio Marcial Moreno-Mañás (2015), el Premio a la Excelencia Investigadora de la RSEQ (2020), el Premio Rei Jaume I en Nuevas Tecnologías (2023) y el Premio de Excelencia Investigadora de la Societat Catalana de Química (2025). En 2022 fue nombrado académico correspondiente de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales de España. Asimismo, ha obtenido en cuatro ocasiones financiación del *European Research Council*, incluyendo una *ERC Consolidator Grant* (2014), una *ERC Advanced Grant* (2021) y dos *ERC Proof-of-Concept Grants* (2019 y 2022). ORCID: [0000-0003-1325-9161](https://orcid.org/0000-0003-1325-9161).

Premios de Reconocimiento a una Carrera Distinguida de la RSEQ

Pablo Ballester se formó como químico en la Universidad de las Islas Baleares, donde se licenció y doctoró en 1986 bajo la dirección del Prof. R. Mestres. Tras varias estancias posdoctorales, en la propia UIB con el Prof. José M. Saá y en la Universidad de Pittsburgh y en el *Massachusetts Institute of Technology*, en el grupo del Prof. Julius Rebek Jr., inició una línea de trabajo centrada en el reconocimiento molecular y la química supramolecular que ha marcado toda su trayectoria.

Entre 1991 y 2004 desarrolló su carrera académica en la Universidad de las Islas Baleares, donde también asumió distintas responsabilidades docentes y de gestión. En 2004 obtuvo una plaza de profesor de investigación ICREA y se incorporó al Institut Català d'Investigació Química (ICIQ) como investigador principal, institución en la que ha desarrollado una trayectoria internacionalmente reconocida en química supramolecular.

La investigación de Pablo Ballester ha contribuido de forma decisiva al diseño y síntesis de receptores, cavitanos, jaulas y cápsulas moleculares, con especial protagonismo de los calix[4]pirroles aril y super-aril extendidos. Sus trabajos han ampliado la comprensión de los procesos de reconocimiento molecular, autoensamblaje, encapsulación y confinamiento, y han mostrado el potencial de estos sistemas en reconocimiento molecular, transporte, catálisis y control de la reactividad en espacios confinados.

Es coautor de más de 300 artículos científicos publicados en revistas de alto impacto, que han recibido más de 16.600 citas, y ha liderado proyectos competitivos nacionales y europeos. Entre ellos destaca la coordinación científica de la red MSCA-ITN NOAH y su participación actual en iniciativas europeas como ENRICH y la Acción COST LUCES. Su actividad investigadora ha ido acompañada de una intensa labor formativa, con la dirección de tesis doctorales (28) y la supervisión de investigadores posdoctorales (24) y de estudiantes internacionales (49), así como de una



Prof. Pablo Ballester.

sostenida actividad de transferencia que incluye patentes y tecnologías licenciadas. En la actualidad, forma parte del Consejo Editorial de la revista *Molecular Chemistry Journal* editada por ELSA.

A lo largo de su carrera, ha recibido diversos reconocimientos, entre ellos el Premio Janssen-Cilag de Química Orgánica de la RSEQ (2012), su elección como miembro de la *European Academy of Sciences* (2021) y su nombramiento como *Chemistry Europe Fellow* (2022). En 2026 ha sido distinguido con el Premio de la RSEQ de Reconocimiento a una Carrera Distinguida, que subraya la relevancia y la continuidad de una trayectoria científica internacional en el ámbito de la química supramolecular. ORCID: [0000-0001-8377-6610](https://orcid.org/0000-0001-8377-6610).



Prof.ª Coral Barbas.

Coral Barbas es catedrática de Química Analítica en la Facultad de Farmacia de la Universidad CEU San Pablo (Madrid), donde ha desarrollado una trayectoria científica marcada por la innovación y el impulso de nuevas áreas de conocimiento. Su trabajo ha sido clave en la introducción y consolidación de la metabolómica en España, contribuyendo a situar esta disciplina en la vanguardia de la investigación biomédica.

Una aportación estructural especialmente relevante de su carrera ha sido la creación y desarrollo del Centro de Metabolómica y Bioanálisis (CEMBIO), fundado en 2008. Bajo su dirección, CEMBIO se ha consolidado como una infraestructura científica de referencia internacional, formando a más de 300 investigadores procedentes de cerca de 20 países y generando una amplia red colaborativa. El centro ha desempeñado un papel decisivo en el posicionamiento internacional de la metabolómica desarrollada en España, así como en la transferencia de conocimiento hacia entornos experimentales, clínicos y biomédicos.

Su actividad investigadora se centra en el desarrollo y aplicación de herramientas analíticas avanzadas para la

identificación de biomarcadores y el estudio de alteraciones metabólicas en distintas patologías. Con más de 400 publicaciones científicas, su trabajo ha tenido un impacto sostenido en la comunidad internacional, situándola entre el 2 % de los investigadores más influyentes del mundo según el ranking de la Universidad de Stanford.

Su trayectoria incluye una destacada proyección internacional, habiendo sido *Marie Curie Fellow* en el King's College de Londres y profesora visitante en el *Imperial College London*, en el Departamento de Cirugía y Cáncer, así como en la Universidad Médica de Bialystok.

En el ámbito de la gestión académica, es directora de la Escuela Internacional de Doctorado CEU (CEINDO) y ha desempeñado previamente el cargo de vicerrectora de Investigación en la Universidad CEU San Pablo. En la actualidad, ejerce como coordinadora de Universidades CEU, con-

tribuyendo a la definición de estrategias de investigación y formación doctoral.

Su compromiso con la comunidad científica se refleja en su participación activa en sociedades científicas y órganos de asesoramiento. Ha sido presidenta de la Sección Territorial de Madrid de la RSEQ y vicepresidenta de la Sociedad Española de Metabolómica. Actualmente forma parte de comités asesores internacionales, como los de la Universidad de Viena y el Hospital La Fe de Valencia.

Entre sus distinciones destacan el Doctorado Honoris Causa por la Universidad Médica de Bialystok, la Medalla de la Sociedad Belga de Ciencias Farmacéuticas, el *Nernst-Tswett Award* de la *European Society of Separation Sciences*, así como su nombramiento como *Honorary Fellow* de la *Metabolomics Society*. ORCID: [0000-0003-4722-491X](https://orcid.org/0000-0003-4722-491X).

Premios a la Excelencia Investigadora

María Escudero Escribano (Cáceres, 1983) es profesora de investigación ICREA en el Instituto Catalán de Nanociencia y Nanotecnología (ICN2), donde dirige el grupo de NanoElectrocatalisis y Química Sostenible (NanoESC). Su investigación se centra en la electrocatalisis y el diseño de materiales a escala atómica para la conversión de energía renovable y la producción de combustibles y productos químicos sostenibles.

Es ingeniera química por la Universidad de Extremadura y doctora en Electroquímica por la Universidad Autónoma de Madrid (2011). Realizó estancias postdoctorales en la Universidad Técnica de Dinamarca (2012–2015) y en la Universidad de Stanford (2015–2017). En 2017 inició su carrera independiente como profesora y líder de grupo en la Universidad de Copenhague. En 2022 se incorporó al ICN2 como profesora ICREA y ese mismo año obtuvo una *ERC Consolidator Grant* (ATOMISTIC, 2023–2028), centrada en el diseño de materiales a escala atómica para la activación y conversión electroquímica de metano.

Su trabajo integra electroquímica, ingeniería de materiales y técnicas operando de espectroscopía y microscopía para diseñar procesos electrocatalíticos emergentes. Ha contribuido al desarrollo de nuevos marcos conceptuales en ingeniería de electrolitos, reducción electroquímica de CO₂, producción y utilización de hidrógeno verde, activación electroquímica de metano y acoplamiento C–N para la producción de combustibles y fertilizantes sostenibles.

Ha publicado 76 artículos científicos, 40 como autora de correspondencia, en revistas como *Science*, *Nature Chemistry*, *Nature Materials*, *Nature Catalysis*, *JACS* o *Angewandte Chemie*. Es coinventora de tres patentes y editora asociada de PRX Energy, además de miembro de comités editoriales de revistas como *ACS Energy Letters* o *ACS Catalysis*. Ha supervisado ocho tesis doctorales y nueve investigadores postdoctorales hasta la fecha, y actualmente dirige un grupo multidisciplinar de 16 investigadores de 11 nacionalidades. Sus antiguos miembros ocupan posiciones



Prof.ª María Escudero Escribano.

en instituciones internacionales de referencia en Europa y EE. UU. Es miembro electo de la Academia Joven de España desde 2022, representante regional en España de la *International Society of Electrochemistry* desde 2023, y miembro del Comité Científico Asesor del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) desde 2024.

Su trayectoria ha sido reconocida con numerosos premios nacionales e internacionales, entre ellos el Premio Nacional de Investigación “María Teresa Toral” (2024), el Premio a la Excelencia Investigadora de la RSEQ (2026), el Premio Fundación Real Academia de Ciencias al Joven Talento Científico Femenino (2024), el *Clara Immerwahr Award* (2019), el Premio Princesa de Girona Investigación Científica (2018) y la Medalla de Oro del *European Young Chemist Award* (2016). ORCID: [0000-0002-6432-3015](https://orcid.org/0000-0002-6432-3015).



Dra. Patricia Horcajada.

La carrera científica de la Dra. Patricia Horcajada se ha centrado en el área de ciencia de materiales, particularmente en redes metal-orgánicas (MOFs). Con una formación singular y multidisciplinar (Farmacia, Ciencia de Materiales; PhD 2005), ha llevado a cabo una investigación de alto nivel, primero como científica funcionaria del CNRS (*Centre National de la Recherche Scientifique*, Francia; 2005-2015) y después, como investigadora senior en IMDEA Energía (2016-). Cabe destacar su labor, desde la síntesis y caracterización de MOFs (>75 nuevas estructuras) hasta su escalado y conformado, y

El Dr. Haritz Sardon Muguruza es profesor titular en la Universidad del País Vasco (EHU) y líder del Grupo de Catálisis y Polímeros Sostenibles en BERC-POLYMAT, el cual cuenta con aproximadamente 20 investigadores. Obtuvo su licenciatura (2006) y su máster (2008) en la EHU, antes de doctorarse con mención internacional en 2011 bajo la supervisión de las profesoras M. J. Fernández-Berridi y L. Irusta. Tras un breve periodo en el sector privado en la empresa Histocell (Bilbao, 1,5 años), el Dr. Sardon se trasladó a *IBM Research* (California) para realizar una estancia postdoctoral de dos años bajo la supervisión del Dr. J. L. Hedrick, donde trabajó en el uso de la organocatálisis en sistemas de polimerización. Tras finalizar su formación postdoctoral, regresó a España con una beca Juan de la Cierva para trabajar en POLYMAT, antes de incorporarse a la EHU como profesor ayudante en 2018.

Como investigador independiente, el trabajo del Dr. Sardon se ha centrado en el diseño de los plásticos del futuro mediante la implementación de estrategias de reciclaje de plásticos escalables y respetuosas con el medio ambiente, así como en el desarrollo de nuevos polímeros con circularidad intrínseca. Así, su grupo aprovechó la alta estabilidad térmica y el control excepcional que ofrecen las mezclas organocatalíticas ácido-base para reportar uno de los primeros ejemplos de reciclaje químico selectivo de plásticos las cuales están en fase de explotación a través de la *start-up* POLYKEY, de la cual el Dr. Sardon es cofundador.

Otra línea de investigación importante dirigida por el Dr. Sardon se refiere a la integración de los principios de sostenibilidad en la Fabricación Aditiva (AM), comúnmente conocida como impresión 3D. Actualmente, su equipo está trabajando en el diseño de nuevas resinas para la fabricación aditiva que sean intrínsecamente reciclables, cerrando así el ciclo de los materiales utilizados en la impresión 3D. Para abordar este

su aplicación en áreas de gran relevancia como la energía, salud o medioambiente, aportando un gran número de nuevos conceptos (e.g. aplicación biomédica, desintoxicación, agroquímicos, descontaminantes de aguas en condiciones reales, producción récord en producción de H_2 , procesos eficientes de deshumidificación y de NO_x utilizando MOFs).

La Dra. Horcajada ($h = 80$) es coautora de 210 publicaciones científicas (188 Q1, 75 D1), además de 7 capítulos de libro, 1 libro editado y 10 patentes (3 licenciadas). Su producción científica es considerada altamente influyente (~36.000 citas, 7 y 72 artículos con >1000 y >100 citas, respectivamente). Ha participado en más de 160 congresos, impartiendo 50 conferencias invitadas y 14 plenarios.

A lo largo de su trayectoria, ha participado en más de 70 proyectos de investigación (45 nacionales, 14 europeos, 4 internacionales y 9 contratos industriales), coordinando 22 proyectos nacionales, 8 europeos, 1 internacional y 2 contratos. Asimismo, destaca por su intensa labor formativa (26 doctorandos, 12 en curso).

Entre los reconocimientos recibidos, destacan "Mujer Tecnóloga" de la Universidad de Deusto (2024), "Doctora de Alcalá" (2023), Medalla de Plata de la *International Association of Advanced Materials* (2023), "Joven Talento Femenino de la Real Academia de Ciencias" (2022), "Jóvenes Investigadores Líderes de Grupo" de la RSEQ (2020), Leonardo BBVA (2017), "Investigadores menores de 40 años, Miguel Catalán" de la Comunidad de Madrid (2016) o "Excelencia Científica" del CNRS (2011-14), entre otros. Además, desde 2020, figura en el 2 % de los investigadores más influyentes del mundo según el ranking de la Universidad de Stanford. ORCID: [0000-0002-6544-5911](https://orcid.org/0000-0002-6544-5911).



Dr. Haritz Sardon.

desafío, el grupo del Dr. Sardon ha sido pionero en químicos libres de radicales para la fabricación aditiva mediante el uso de fotoácidos y fotobases. Varias de estas tecnologías se están comercializando actualmente a través de la *start-up* HEVEA3D, cofundada por el Dr. Sardon.

El Dr. Sardon ha dirigido más de 15 tesis y es autor de más de 200 publicaciones y es coinventor de más de 10 patentes (tres de ellas licenciadas). El Dr. Sardon ha sido reconocido a través de varios premios internacionales como el Premio de Química de Polímeros de la RSC o el Premio al Joven Investigador en polímeros de ACS (2020). ORCID: [0000-0002-6268-0916](https://orcid.org/0000-0002-6268-0916).



Prof. Marc Vendrell.

Marc Vendrell (Barcelona, 1979) es catedrático de Química Traslacional e Imagen Biomédica y director del *IRR Chemistry Hub* en la Universidad de Edimburgo (Reino Unido). Se doctoró en Química por la Universidad de Barcelona en 2007 y se incorporó al *A*STAR Singapore Bioimaging Consortium* como *Senior Research Fellow* (2007-2012). En 2012 empezó su carrera independiente en el *College of Medicine and Veterinary Medicine* (Universidad de Edimburgo), donde es catedrático desde 2020.

Desde su inicio como investigador independiente, Vendrell ha promovido una visión científica orientada a integrar química y biomedicina. Su grupo ha desarrollado un programa de in-

vestigación interdisciplinario y traslacional para diseñar sondas químicas de imagen para estudios biológicos a tiempo real, con 12 millones de euros captados como investigador principal y más de 40 millones de euros como investigador asociado, incluyendo varias becas de la ERC y la EIC. Entre sus contribuciones más destacadas figura la creación de una plataforma de sondas fluorescentes para estudiar la función de células inmunológicas. La innovación de las metodologías sintéticas desarrolladas por Vendrell ha sido reconocida con los premios Marcial Moreno Mañas (2018), *SRUK Emerging Talent Award* (2019) y *Bader Prize* de la *Royal Society of Chemistry* (2023). Desde 2021, Vendrell figura en la lista del 2 % de científicos más influyentes del mundo de Stanford/Elsevier. Vendrell es miembro electo de la *Royal Society of Chemistry* desde 2017 y de la *Royal Society of Edinburgh* desde 2024.

Vendrell ha publicado alrededor de 160 publicaciones, la mayoría como autor correspondiente, incluyendo 13 patentes. Más de 10 reactivos desarrollados en su laboratorio, entre ellos aminoácidos y péptidos fluorescentes, han sido licenciados y se comercializan por empresas multinacionales como Merck, *BioLegend*, *Tocris* o *Iris Biotech*. Más recientemente, su equipo ha creado biosensores para medir inflamación en muestras de pacientes, una tecnología que originó la *spin-out IDxSense*, centrada en diagnósticos para enfermedades inflamatorias. Actualmente, Vendrell es investigador principal del estudio observacional clínico *KTRSENSORS* en dos hospitales del Reino Unido para evaluar el uso de dichos biosensores en pacientes con potencial rechazo de trasplantes de riñón.

Vendrell ha supervisado más de 40 estudiantes y 20 post-docs, muchos de los cuales han desarrollado carreras independientes en academia o en el sector privado en Europa, Asia o Estados Unidos. ORCID: [0000-0002-5392-9740](https://orcid.org/0000-0002-5392-9740).

Premio Joven Investigador – Modalidad “Líder de Grupo”

Marta Artola Pérez de Azanza (San Sebastián, 1985) estudió Farmacia en la Universidad San Pablo-CEU (Madrid) e inició su carrera investigadora en 2008 como becaria CITIUS en Janssen Cilag (Toledo), donde despertó su interés por el desarrollo de fármacos. Posteriormente, se formó como química en la Universidad Complutense de Madrid (UCM), donde obtuvo su doctorado en 2014 en Química Orgánica y Química Médica bajo la dirección de M. Luz López Rodríguez, Henar Vázquez y Mar Martín-Fontecha. Durante esta etapa realizó estancias de investigación en la *Technische Universität München* (Munich, Alemania, grupo del Prof. Stephan Sieber) y en *The Scripps Research Institute* (La Jolla, Estados Unidos, grupo del Prof. Phil Baran). En 2015 inició su etapa posdoctoral en la Universidad de Leiden (Países Bajos), junto al Prof. Herman Overkleeft, donde se especializó en química de carbohidratos y glicobiología química, centrándose en el diseño de inhibidores selectivos y sondas de actividad para glicosidasas. En 2019 obtuvo una plaza *tenure-track* y desde entonces lidera un grupo de investigación independiente en el *Leiden Institute of Chemistry*. Actualmente es profesora asociada de Química Biológica y Química Terapéutica en la Universidad de Leiden.

Su investigación se sitúa en la interfaz entre química orgánica, química biológica y química médica, con el objetivo



Dra. Marta Artola Pérez de Azanza.

de desarrollar herramientas moleculares y nuevas estrategias terapéuticas para modular enzimas clave del metabolismo de

los glicanos, como glicosidasas y glicosiltransferasas. Es autora de más de 60 publicaciones científicas y tres patentes. Entre sus contribuciones destacan el desarrollo de derivados de ciclo-sulfatos como inhibidores altamente selectivos de α -glucosidasas (*ACS Central Science*, 2017; *JACS*, 2022) y de ciclophellitos modificados selectivos para β -glucosidasas (*JACS*, 2019; *Chemical Science*, 2023, *Chemical Science* 2024; *RSC Chemical Biology*, 2025), herramientas clave para el estudio y tratamiento de enfermedades lisosomales. Más recientemente, su investigación se ha expandido hacia el desarrollo de nue-

José Augusto Berrocal se formó como químico orgánico en la Università di Roma "La Sapienza", donde obtuvo la licenciatura, el máster y el doctorado en Ciencias Químicas (*cum laude*) bajo la dirección de los profesores Luigi Mandolini y Stefano Di Stefano. Durante su etapa doctoral se especializó en el estudio cuantitativo de sistemas dinámicos y reacciones intramoleculares, sentando las bases de su futura actividad en química supramolecular y de materiales.

Tras el doctorado, realizó estancias posdoctorales en instituciones de referencia internacional: la *Eindhoven University of Technology*, en el grupo del Prof. E. W. "Bert" Meijer, y la *Rijksuniversiteit Groningen*, donde trabajó en el grupo del Prof. Ben L. Feringa, Premio Nobel de Química 2016, ampliando su experiencia en autoensamblaje supramolecular y sistemas fotoresponsivos.

En 2019 se incorporó al *Adolphe Merkle Institute* (Universidad de Friburgo, Suiza) como líder de grupo, iniciando una línea de investigación independiente centrada en el desarrollo de materiales poliméricos y supramoleculares estímulo-responsivos. Su investigación integra química orgánica, supramolecular y de polímeros para el diseño de materiales dinámicos orientados al reciclado químico, los actuadores blandos y los sistemas mecanorreactivos.

En 2021 obtuvo una *ERC Starting Grant*, que consolidó internacionalmente su línea de investigación sobre mecanóforos heterolíticos y materiales activados por fuerza mecánica. En julio de 2023 se trasladó al Instituto Catalán de Investigación Química (ICIQ, Tarragona), donde continuó su actividad como *Group Leader* dentro del *Starting Career Program* del ICIQ. Desde diciembre de 2025, es profesor de investigación ICREA y *Group Leader* en el ICIQ, posición

permanente que reconoce la solidez y el impacto de su trayectoria científica. El Dr. Berrocal es autor de más de cincuenta publicaciones en revistas internacionales de alto impacto, así como de varias patentes. Ha recibido, entre otros reconocimientos, la *ERC Starting Grant* (2021), el *Thieme Chemistry Journals Award* (2023), el *Outstanding Young Investigator in Polymers Award* (GEP-RSEQ, 2024), el *PMSE Early Investigator Award* (ACS, 2025) y el Premio Marcial Moreno Mañás (ST-CAT-RSEQ, 2025). ORCID: [0000-0002-3051-3902](https://orcid.org/0000-0002-3051-3902).



Dr. José Augusto Berrocal.



Dr. Marc Garcia-Borràs.

Marc Garcia-Borràs (Sta. Cristina d'Aro, 1988) es profesor de investigación ICREA en el Institut de Química Computacional i Catalàsi (IQCC) de la Universitat de Girona (UdG). Se graduó en Química por la Universitat de Girona, obteniendo el Premio Extraordinario de Grado, y completó el Máster Interuniversitario en Química Teórica y Computacional (Universitat Rovira i Virgili) con Premio Extraordinario. Realizó su tesis doctoral en el IQCC bajo la supervisión de los profesores Miquel Solà y Josep M. Luis, siendo distinguido con el Premio Extraordinario de Doctorado del 2015.

Tras su doctorado, desarrolló su etapa postdoctoral en la *University of California*, Los Angeles (UCLA), en el grupo del Prof. Ken N. Houk, donde trabajó en la aplicación de herramientas computacionales multiescala para el estudio de procesos catalíticos y biocatalíticos, colaborando con grupos experimentales líderes en evolución dirigida y diseño de enzimas. Durante este periodo fue reconocido con el *UCLA Postdoctoral Research Award* del departamento de Química y Bioquímica.

En 2019 regresó a Girona para iniciar su carrera independiente, con una beca Juan de la Cierva primero y con una

Beatriu de Pinós después, centrada en el modelado computacional de procesos biocatalíticos y el diseño racional de enzimas. Posteriormente continuó su carrera como investigador Ramón y Cajal (2022) en la UdG, consiguiendo una plaza como profesor de investigación ICREA en 2026.

Su investigación combina métodos de química computacional para comprender y controlar intermedios reactivos en sistemas enzimáticos, con el objetivo de diseñar e implementar nuevas transformaciones catalíticas de interés en síntesis química y biotecnología.

Ha liderado diversos proyectos competitivos nacionales e internacionales, incluyendo recientemente una ERC

Consolidator Grant (2025) centrada en el control de la reactividad en biocatálisis mediante diseño computacional. Es autor de cerca de un centenar de publicaciones en revistas internacionales de alto impacto y mantiene colaboraciones con destacados grupos internacionales en biocatálisis y diseño de proteínas.

Su trayectoria ha sido reconocida con diversos premios, entre ellos el Premio Lilly-RSEQ al Investigador Joven (2024), el premio al talento científico emergente de la Societat Catalana de Química (2025), o el ACS *Division of Computers in Chemistry Outstanding Junior Faculty Award* de la American Chemical Society (2025). ORCID: [0000-0001-9458-1114](https://orcid.org/0000-0001-9458-1114).

Mónica Giménez Marqués es profesora titular de química inorgánica en la Universidad de Valencia (UV) y directora del *Crystal Engineering Lab* (CEL) en el Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), donde lidera una línea de investigación centrada en el diseño, síntesis y funcionalización de materiales porosos avanzados, incluyendo MOFs, HOFs y sistemas nanohíbridos, con aplicaciones en sostenibilidad ambiental y biomedicina.

Su trayectoria científica se ha desarrollado en el ámbito de la nanociencia y la química de materiales. Tras doctorarse en 2013 en la UV en el campo del magnetismo molecular bajo la dirección de los profesores Eugenio Coronado y Guillermo Mínguez, realizó estancias postdoctorales en Francia en el grupo del Dr. Christian Serre en el *Institut Lavoisier* y el *Institut des Matériaux Poreux* de Paris (ENS y ESPCI) desarrollando MOFs para aplicaciones biomédicas bajo la supervisión de la Dra. Patricia Horcajada y desde 2015 desarrollando catalizadores MOF con una *Marie Skłodowska-Curie Individual Fellowship*.

En 2018 se incorporó al ICMol mediante un contrato Juan de la Cierva, e inició su carrera independiente en 2019 apoyada por programas de excelencia como el *Junior Leader* La Caixa, SEJ1 y el Ramón y Cajal. Desde entonces, ha dirigido un grupo de investigación que actualmente está formado por 21 investigadores en distintas etapas académicas. Ha dirigido 3 tesis doctorales y en la actualidad supervisa otras 5.

Su producción científica incluye 60 publicaciones y 3 patentes. Ha obtenido financiación competitiva como investigadora principal en 13 proyectos regionales, nacionales y europeos.



Dra. Mónica Giménez Marqués.

Su excelencia investigadora ha sido reconocida con diversos premios, entre ellos el Premio Joven Investigador "Postdoctoral" de la RSEQ (2023), la Beca Leonardo de la Fundación BBVA (2022), Talento Joven Comunidad Valenciana (2019) y el XIV Premio Científico-técnico «Ciudad de Algemesí» (2018). ORCID: [0000-0002-4931-5711](https://orcid.org/0000-0002-4931-5711).



**XLVI Reunión del Grupo
Especializado de Electroquímica de la
Real Sociedad Española de Química
(46 GEE-RSEQ)**

Barcelona, del 7 al 10 de julio de 2026

Premio Joven Investigador – Modalidad “Investigador Postdoctoral”



Dr. Antonio Domínguez Alfaro.

Antonio Domínguez Alfaro (Huelva, 1991) se graduó en Ingeniería Técnica Industrial, especialidad Química, por la Universidad de Huelva (2013), donde también cursó el máster en Química y el máster en Ingeniería Industrial. Inició su actividad investigadora en el grupo de Síntesis y Fotoquímica Orgánica (SIFO) del Prof. Uwe Pischel. Posteriormente, realizó su tesis doctoral en San Sebastián bajo la supervisión de los Prof. David Mecerreyes

Sergio Gámez Valenzuela (Málaga, 1994) obtuvo su grado en Química por la Universidad de Málaga (UMA) en 2016, donde un año después completó el máster en Química Aplicada y Nanotecnología. Realizó su tesis doctoral (2018-2023) en Química y Tecnologías Químicas en la UMA disfrutando de un contrato FPU, bajo la supervisión de las profesoras M. C. Ruiz Delgado y R. Ponce Ortiz. Durante este periodo, llevó a cabo estancias de investigación en la Universidad de Stuttgart (Alemania, Prof. S. Ludwigs) y en el Instituto de Ciencias de los Materiales de Madrid (Prof. J. Martínez Ruiz). Su tesis, distinguida con sobresaliente cum laude y mención internacional, se centró en el uso de semiconductores orgánicos en dispositivos electrónicos y en la comprensión de sus propiedades de transporte de carga mediante técnicas espectroscópicas y cálculos químico-cuánticos. Este trabajo fue galardonado con el premio Accésit a la Mejor Tesis Doctoral del Grupo Especializado en Nanociencia y Materiales Moleculares de la RSEQ, así como con el Premio Extraordinario de Doctorado de la UMA.

En 2023 se incorporó como investigador postdoctoral a la *Southern University of Science and Technology* (Shenzhen, China), en el grupo del Prof. X. Guo, donde inició una línea de investigación en estrategias de dopaje molecular orientadas a la optimización de dispositivos termoeléctricos orgánicos. En 2025 obtuvo financiación altamente competitiva a través de los programas Juan de la Cierva y Marie Skłodowska-Curie Actions, incorporándose finalmente a este

(POLYMAT) y Maurizio Prato (CIC biomaGUNE), obteniendo la calificación de cum laude en 2021. Su investigación se centró en el desarrollo de materiales tridimensionales, porosos y conductores para ingeniería de tejidos, con especial énfasis en la reconexión de tejido nervioso dañado. Posteriormente, llevó a cabo una etapa postdoctoral en el grupo de la Prof. Aitziber Cortajarena, donde desarrolló tintas conductoras biobasadas compuestas por proteínas recombinantes y polímeros conductores. En 2023 obtuvo una beca Margarita Salas para incorporarse a la Universidad de Cambridge, donde continuó como *Research Associate* en el grupo de Bioelectrónica del Prof. George Malliaras, trabajando en el diseño, síntesis y fabricación de conductores mixtos iónico-electrónicos para dispositivos bioelectrónicos portables e implantables. En 2024 se incorporó al Instituto de Microelectrónica de Sevilla (IMSE-CNM-CSIC) con una beca Momentum, dentro del grupo de Neuromórfica liderado por el Prof. Bernabé Linares-Barranco. En 2025 fue galardonado con un contrato Ramón y Cajal. Actualmente, su objetivo es desarrollar una línea de investigación en electrónica impresa que integre química de polímeros, ciencia de materiales y fabricación avanzada para aplicaciones biomédicas. Ha publicado más de 50 artículos en revistas de alto impacto (*Adv. Funct. Mater.*, *JACS*, *Adv. Sci.*), siete como autor de correspondencia, y ha sido reconocido como *Early Career Researcher* por la *European Polymer Federation* y la *Royal Society of Chemistry* en dos ediciones especiales (*J. Mater. Chem. C* 2024 y *Nanoscale* 2026). ORCID: [0000-0002-3215-9732](https://orcid.org/0000-0002-3215-9732).



Dr. Sergio Gámez Valenzuela.

último. Desde agosto de 2025 desarrolla su proyecto europeo OASYS en el grupo del Prof. S. Fabiano de la Universidad de Linköping (Suecia), donde desarrolla dispositivos electroquímicos basados en materiales dopados capaces de emular funciones neuronales.

Actualmente, el Dr. Sergio Gámez Valenzuela es coautor de 42 publicaciones en revistas internacionales de alto impacto (incluyendo *Nature Chemistry*, *Nature Materials*, *Nature Communications*, *Journal of the American Chemical Society* y *Angewandte Chemie*, entre otras), autor de 3

Javier López-Cabrelles obtuvo el máster y doctorado en Nanociencia y Nanotecnología Molecular en el grupo de Eugenio Coronado bajo la supervisión de Guillermo Minguez Espallargas. Su trabajo se centró en el desarrollo de polímeros de coordinación magnéticos y redes metal-orgánicas porosas mediante métodos sintéticos libres de disolvente basados en el uso del catión Fe(II). Su investigación abordó principalmente dos áreas: materiales moleculares bidimensionales con propiedades magnéticas y redes zeolíticas basadas en imidazol y en Fe(II). Su trabajo fue reconocido con el Premio Extraordinario de doctorado de la Universitat de València (2022) y el premio "Científicotecnico de la Ribera" para jóvenes investigadores (2021).

Posteriormente, se incorporó como investigador postdoctoral al *Institute for Integrated Cell-Material Sciences (iCeMS)* de *Kyoto University* con una beca postdoctoral de la "Japan Society for the Promotion of Science", en el grupo del Prof. Shuhei Furukawa. Su trabajo se orientó al diseño y al autoensamblaje supramolecular de moléculas metal-orgánicas poliédricas (MOPs). A partir de esta investigación, desarrolló un nuevo marco conceptual basado en teselaciones moleculares dinámicas construidas mediante polígonos moleculares rígidos, capaces de generar materiales bidimensionales dinámicos y cristalinos mediante interacciones no covalentes direccionales.

Su trabajo se centra actualmente en el desarrollo de superestructuras supramoleculares bidimensionales dinámicas y de materiales porosos con respuesta estructural y mecánica. En 2024 fue promovido a profesor asistente en *Kyoto University*



Dra. Idaira Pacheco-Fernández.

Idaira Pacheco-Fernández (Tenerife, 1992), se graduó en Química en la Universidad de La Laguna, donde también cursó el Máster en Química. Completó el Doctorado en Química (cum laude) en la misma universidad (2021) bajo la supervisión de la Prof. Verónica Pino y el Prof. Juan H. Ayala, con mención internacional tras realizar una estancia en el grupo del Prof. Jared L. Anderson en *Iowa State University* (Estados Unidos).

patentes internacionales, y ha presentado su trabajo en 18 conferencias nacionales e internacionales, 2 de ellas como ponente invitado. Ha participado en más de 10 proyectos de investigación y participa activamente en actividades de divulgación científica. ORCID: [0000-0002-2690-2331](https://orcid.org/0000-0002-2690-2331).



Dr. Javier López-Cabrelles.

y obtuvo financiación KAKENHI del Ministerio de Educación, Cultura, Deporte, Ciencia y Tecnología de Japón como investigador principal para desarrollar su línea de investigación independiente sobre materiales moleculares bidimensionales dinámicos. ORCID: [0000-0001-7443-4635](https://orcid.org/0000-0001-7443-4635).

Su tesis doctoral fue reconocida con el Premio Extraordinario de Doctorado, así como con diversos premios nacionales y regionales, entre ellos el Premio Miguel Valcárcel de la Sociedad Española de Química Analítica. Enmarcada en el campo de la química analítica, su tesis doctoral se centró en el desarrollo de métodos de análisis utilizando materiales avanzados, como los líquidos iónicos y las redes metal-orgánicas.

Idaira comenzó su carrera postdoctoral en la Universidad de Kioto (Japón, 2021-2023), en el grupo del Prof. Shuhei Furukawa, gracias a una ayuda de la *Japan Society for the Promotion of Science* y al programa Margarita Salas. Durante esta etapa, trabajó en el diseño de membranas porosas mediante estrategias de química supramolecular, aplicadas posteriormente al análisis medioambiental. A continuación, se incorporó al grupo del Prof. Hélder A. Santos en la Universidad Médica de Groninga (Países Bajos, 2023-2025) con una beca postdoctoral Marie Skłodowska-Curie, donde desarrolló su investigación en el entorno biomédico, evaluando el uso de redes metal-orgánicas para análisis clínico y aplicaciones en inmunoterapia.

Actualmente, es investigadora Ramón y Cajal en el Departamento de Química de la Universidad de La Laguna, donde desarrolla su actividad en el grupo de investigación MAT4LL (*Materials for Chemical Analysis*). Su trayectoria presenta un marcado carácter multidisciplinar, integrando química analítica, ciencia de materiales y biomedicina. Así, en esta nueva etapa, su investigación se centra en el diseño de materiales basados en redes metal-orgánicas para el desarrollo de métodos de análisis de muestras biológicas más accesibles, sencillos y eficientes, con el objetivo de facilitar el diagnóstico temprano y el seguimiento de enfermedades. ORCID: [0000-0002-1608-5374](https://orcid.org/0000-0002-1608-5374).

Premio a la Tarea Educativa

José Plaza Catalán es licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de Valencia (1995), en la especialidad de Química Orgánica. Ha realizado su labor docente durante 27 años en el Colegio San José de la Montaña de Cheste (Valencia), donde ha desempeñado distintos cargos de gestión, entre ellos la jefatura del Departamento de Ciencias y coordinador de Educación Secundaria. José es miembro de sociedades científicas como la RSEQ y la RSEF, dentro del grupo GEDH, manteniendo siempre un especial interés por la enseñanza y divulgación de la Química.

Además de su labor docente, ha destacado por la tutoría de numerosos proyectos de innovación didáctica e investigación, muchos de ellos reconocidos en certámenes nacionales y autonómicos como Reacciona (RSEQ STVAL), Premios Sapiencia, Ciencia en Acción, VilaCiencia y concursos en áreas afines, como Feria Experimenta (UV). Muchos de estos proyectos han sido publicados en plataformas educativas y divulgativas, siendo recursos educativos accesibles para otros docentes y estudiantes.

A lo largo de su trayectoria ha impulsado especialmente el fomento de las vocaciones científicas e investigadoras, con atención particular a las vocaciones femeninas. También ha promovido el acercamiento entre la Universidad y la Educación Secundaria mediante colaboraciones con las Facultades de Química y Farmacia de la Universitat de València y con el Instituto de Tecnología Química (ITQ-UPV), integrando al alumnado en proyectos científicos reales. Asimismo, ha ejercido como tutor de prácticas del Máster de Profesorado de Secundaria, contribuyendo a la formación de futuras generaciones de docentes.

Además, elabora situaciones de aprendizaje propias, cercanas al entorno cotidiano del alumnado y con un marcado



José Plaza Catalán.

componente experimental, fomentando el aprendizaje práctico de la Química y la integración de los Objetivos de Desarrollo Sostenible. Actualmente colabora con el Centro de Recursos Educativos de la ONCE de Alicante en la adaptación de experiencias prácticas de Química y Física para alumnado con discapacidad visual.

Su trayectoria docente y divulgativa ha sido reconocida previamente con los Premios a la Labor Educativa y Divulgativa concedidos por la RSEQ-STVAL y el GEDH en 2023.

Premio Elhúyar-Goldschmidt (Alemania)

Bettina V. Lotsch es directora del Departamento de Nanoquímica del *Max Planck Institute for Solid State Research* en Stuttgart, Alemania. Estudió Química en la *Ludwig-Maximilians-Universität* de Múnich y en la Universidad de Oxford. Obtuvo el diploma en 2002 y el doctorado por la *Ludwig-Maximilians-Universität* de Múnich en 2006. Tras una estancia post-



Prof.ª Bettina V. Lotsch.

doctoral en la Universidad de Toronto, en 2009 se incorporó a la *Ludwig-Maximilians-Universität* de Múnich como profesora asociada *tenure track* de Materiales Funcionales, obteniendo la plaza permanente en 2014. Paralelamente, fue líder de grupo independiente en el *Max Planck Institute for Solid State Research* entre 2011 y 2017. En 2017 fue nombrada directora del Departamento de Nanoquímica de dicho instituto. Además, es profesora honoraria en la *Ludwig-Maximilians-Universität* de Múnich y en la Universidad de Stuttgart.

Su investigación se centra en el desarrollo de materiales de nueva generación para conversión y almacenamiento de energía y tecnologías de la información, combinando herramientas de química molecular, química del estado sólido y nanoquímica. Sus líneas actuales incluyen el desarrollo de materiales reticulares para (foto)electrocatalisis, electrolitos sólidos para baterías de estado sólido y materiales optoiónicos para baterías solares, "fotocatalisis oscura" y dispositivos fotomemristivos.

Es *Fellow* de la *Royal Society of Chemistry* desde 2014 y miembro de la Academia Nacional Alemana de Ciencia e Ingeniería desde 2025 y de la Academia Nacional Alemana de Ciencias Leopoldina desde 2026. Su trayectoria ha sido reconocida con diversos galardones, entre ellos una ERC Starting Grant en 2014, el EU-40 *Materials Prize* de la *European Materials Research Society* en 2017 y el Premio Leibniz de la DFG en 2025. Es coautora de más de 350 publicaciones científicas y cuenta con un índice h de 91. ORCID: [0000-0002-3094-303X](https://orcid.org/0000-0002-3094-303X).

Premio González-Ciamician (Italia)

Luigi Cavallo es profesor de Química en la *King Abdullah University of Science and Technology* (KAUST, Arabia Saudí), institución a la que está vinculado desde 2011. Se doctoró en la Universidad de Nápoles bajo la supervisión de Paolo Corradini, figura clave en el desarrollo de la polimerización estereoespecífica y colaborador de Giulio Natta. Posteriormente completó su formación en química teórica en la Universidad de Calgary, en el grupo de Tom Ziegler, uno de los investigadores que contribuyó de forma decisiva a la introducción de la teoría del funcional de la densidad como herramienta para la química. Antes de incorporarse a KAUST, desarrolló su carrera académica en las universidades de Nápoles y Salerno, donde alcanzó la cátedra de Química Industrial.

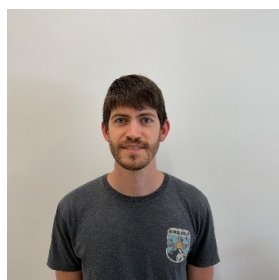
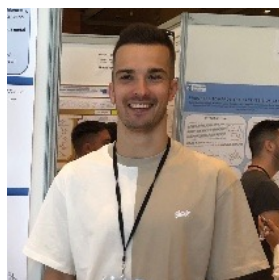
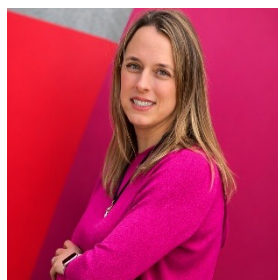
La trayectoria científica del Prof. Cavallo se ha centrado en comprender, a escala atómica, los factores que gobiernan la actividad y selectividad de los catalizadores. Sus primeros trabajos sobre polimerización estereoselectiva de olefinas contribuyeron a racionalizar cómo la geometría del catalizador determina la arquitectura de la cadena polimérica. También ha realizado contribuciones relevantes al estudio mecanístico de la metátesis de olefinas, con impacto en el desarrollo de catalizadores aplicados en síntesis farmacéutica. Una de sus aportaciones más influyentes ha sido la introducción de los conceptos de volumen enterrado y mapas estéricos, descriptores que permiten visualizar y cuantificar el entorno tridimensional de un centro catalítico y que se han convertido en herramientas ampliamente utilizadas en catálisis homogénea, incluyendo enfoques actuales basados en análisis de datos y aprendizaje automático. Más recientemente, ha extendido esta aproximación mecanística al campo de la catálisis fotorredox.



Prof. Luigi Cavallo.

Su labor ha sido reconocida, entre otros méritos, con el *Ziegler-Natta Lectureship Award* de la Sociedad Alemana de Química. Es *Fellow* de la *European Academy of Sciences* y de *Academia Europaea*. A lo largo de su carrera ha mantenido una intensa colaboración con instituciones europeas y ha contribuido a la formación de investigadores que hoy lideran grupos independientes en Europa, Asia y América. ORCID: [0000-0002-1398-338X](https://orcid.org/0000-0002-1398-338X).

Premiados en la XXIV edición de los Premios de Investigación RSEQ Lilly 2026.



Premiados en la XXIV edición de los Premios de Investigación RSEQ Lilly 2026.

La Real Sociedad Española de Química y Lilly han concedido los Premios de Investigación RSEQ Lilly 2026, que alcanzan este año su XXIV edición y reconocen el talento de jóvenes investigadores en química, tanto en etapas iniciales de carrera independiente como durante el desarrollo de la tesis doctoral.

En esta edición, el Premio de Investigación *Early Career Researcher* ha sido otorgado a Irene Marco Rius, del *Institute for Bioengineering of Catalonia* (IBEC), por una línea de investigación centrada en el desarrollo de metodologías analíticas avanzadas para estudiar el metabolismo en tiempo real y de forma no invasiva, con aplicaciones de interés biomédico.

Los Premios de Investigación para Alumnos de Doctorado han reconocido a Sergio Barbeira Arán, de la Universidad de Santiago de Compostela; Albert Gallego Gamo, de la Universidad Autónoma de Barcelona, y Víctor Manuel Amador Luna, del Consejo Superior de Investigaciones Científicas. Sus trabajos abordan distintas áreas de la química con potencial impacto en salud, sostenibilidad y nuevas tecnologías, desde la síntesis sostenible y la fotocatalisis hasta el desarrollo de ingredientes neuroprotectores a partir de recursos naturales y subproductos agroalimentarios.

El proyecto doctoral de Sergio Barbeira Arán se centra en el desarrollo de nuevas metodologías catalíticas y fotocatalíticas para transformar hidrocarburos en compuestos de interés mediante estrategias sostenibles. Albert Gallego Gamu trabaja en la síntesis de materiales para fotocatalisis y en métodos impulsados por la luz con aplicaciones potenciales en la producción de combustibles solares y la síntesis de fármacos. Por su parte, Víctor Manuel Amador Luna desarrolla ingredientes neuroprotectores mediante tecnologías sostenibles, con especial atención a compuestos bioactivos con potencial frente a enfermedades neurodegenerativas.

Los galardones cuentan con una dotación total de 10.000 euros, distribuidos en 4.000 euros para el Premio *Early Career Researcher* y 2.000 euros para cada uno de los tres Premios para Alumnos de Doctorado. En esta edición se presentaron 26 candidaturas al Premio *Early Career Researcher* y 38 a los Premios de Investigación para Alumnos de Doctorado.

Con estos premios, la RSEQ y Lilly refuerzan su compromiso con el impulso al talento químico joven y con la visibilización de investigaciones emergentes con potencial impacto científico, tecnológico y social.

CAMBIOS EN EL CONSEJO EDITORIAL DE ANALES DE QUÍMICA DE LA RSEQ

María Paulis Lumbreras se ha incorporado al Consejo Editorial de *Anales de Química* de la RSEQ como Editora Asociada, con el objetivo de reforzar la presencia de contenidos relacionados con el sector empresarial de la química.

María Paulis se formó como química en la Facultad de Química de la Universidad del País Vasco / Euskal Herriko Unibertsitatea (EHU), donde se licenció en 1995. Realizó su tesis doctoral en catálisis heterogénea para la eliminación de compuestos orgánicos volátiles, bajo la dirección del Prof. Mario Montes. Tras un periodo de investigación postdoctoral, en 2002 se reincorporó a la Facultad de Química de la EHU, donde actualmente es catedrática de Ingeniería Química.

Desde 2020 dirige el Instituto Universitario de Materiales Poliméricos, POLYMAT. Tanto desde su actividad investigadora como desde su labor de gestión, ha mantenido una estrecha relación con empresas químicas nacionales e internacionales, especialmente en el ámbito de los polímeros en fase dispersa. Su trayectoria incluye la participación y dirección de proyectos colaborativos con la industria, así como una amplia actividad científica centrada en la polimerización en medio disperso, la formación de películas a partir de dispersiones poliméricas, la incorporación de monómeros biobasados o biodegradables y la mejora de la sostenibilidad de los procesos de producción.

Con esta incorporación, *Anales de Química* de la RSEQ refuerza su voluntad de ampliar la presencia de contenidos vinculados a la transferencia de conocimiento, la innovación y la actividad del sector químico empresarial.



Prof.ª María Paulis Lumbreras.

NOTICIAS GRUPOS ESPECIALIZADOS

Premios del Grupo Especializado de Química Orgánica (GEQOR) 2026

- **Medalla Fèlix Serratosa:** Dr. Antoni Riera Escalé – Universidad de Barcelona

Antoni Riera se doctoró en Química por la Universidad de Barcelona (UB), bajo la dirección de los Profs. F. Serratosa y M. A. Pericàs. Tras una estancia posdoctoral en la Universidad de Pensilvania bajo la supervisión del profesor Amos B. Smith III, en 1988 regresó al Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Barcelona como profesor asociado. En 2003 fue promovido a catedrático en la misma universidad.

Desde 2005 es líder del Grupo de Síntesis Asimétrica del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona), y su trabajo ha sido reconocido con el Premio a la Excelencia Investigadora de la RSEQ (2017). Es (co)autor de más de 250 publicaciones y ha dirigido 35 tesis doctorales. Su actividad investigadora se centra en metodología sintética y catálisis, así como en la síntesis de compuestos biológicamente activos. Es cofundador de Enantia, S.L., una *spin-off* creada en 2003 dedicada al desarrollo de nuevos procesos sintéticos para productos farmacéuticos.



Prof. Antoni Riera.

- **Medalla Ignacio Ribas:** Dr. Israel Fernández López – Universidad Complutense de Madrid

Israel Fernández se doctoró en Química en 2005 por la Universidad Complutense de Madrid (UCM) bajo la supervisión del Prof. M. A. Sierra. Tras una estancia posdoctoral en la *Philipps-Universität Marburg*, en el grupo de Química Teórica y Computacional del Prof. Gernot Frenking, donde investigó la naturaleza del enlace químico y los mecanismos de reacción en compuestos orgánicos y organometálicos, regresó a la Universidad Complutense de Madrid para iniciar su carrera investigadora independiente como investigador Ramón y Cajal en 2008. Posteriormente fue nombrado profesor titular (2018) y es catedrático desde 2023.

Su trabajo ha sido reconocido con el Premio Joven Investigador de la RSEQ, el Premio Julián Sanz del Río (2011), la Medalla Barluenga (2020), y fue nombrado *Chemistry Europe Fellow* (promoción 2024–2025). Es (co)autor de más de 425 artículos científicos, ocho capítulos de libro y editor de dos volúmenes. Su actividad investigadora se centra en el estudio computacional del enlace químico y de la reactividad de compuestos orgánicos, organometálicos y de elementos del grupo principal, con especial interés en los procesos de activación de enlaces.



Prof. Israel Fernández.

- **Medalla José Barluenga:** Dr. Arjan W. Kleij – Instituto Catalán de Investigación Química (ICIQ)

Arjan W. Kleij se doctoró en Química por la Universidad de Utrecht bajo la dirección del Prof. Gerard van Koten. En el año 2000 se trasladó a la industria y trabajó durante más de tres años, primero en Avantium y posteriormente en *Hexion Specialty Chemicals*. En 2002 se incorporó como investigador postdoctoral al grupo del Prof. J. de Mendoza en la UAM, y posteriormente al grupo del Prof. J. Reek en la Universidad de Ámsterdam trabajando en el campo de la catálisis supramolecular. En 2006 fue nombrado *Group Leader* en el ICIQ y, en 2011, fue promovido a profesor ICREA.

Es (co)autor de alrededor de 240 publicaciones científicas, 6 solicitudes de patente y su trabajo ha sido reconocido, entre otros premios, con el Premio a la Excelencia Investigadora de la RSEQ (2020), *Fellow* de la *Royal Society of Chemistry* (2021), el *European Sustainable Chemistry Award* (2023) y el Premio a la Excelencia Científica de la Societat Catalana de Química (2023). En 2019 se incorporó como *Associate Editor* a *Organic Chemistry Frontiers* (RSC). Ha sido profesor invitado en la Universidad de Tokio (2022) y profesor visitante en la Universidad de Salerno (Italia) en 2024. Su actividad científica se centra principalmente en la catálisis para la valorización del CO₂, el desarrollo de nuevas reactividades basadas en el uso de carbonatos orgánicos como precursores modulares y el empleo de heterociclos



Prof. Arjan W. Kleij.

funcionales para llevar a cabo transformaciones estereoselectivas complejas.

Otras Noticias

OTRAS NOTICIAS

Entrega de los Premios Nacionales de Investigación 2025

El Palacio Real de Pedralbes, en Barcelona, acogió el 4 de mayo de 2026 el acto de entrega de los Premios Nacionales de Investigación 2025 y de los Premios Nacionales de Investigación para Jóvenes 2025, presidido por S. M. el Rey. Al acto asistieron también la ministra de Ciencia, Innovación y Universidades, Diana Morant; el presidente de la Generalitat de Catalunya, Salvador Illa, y el alcalde de Barcelona, Jaume Collboni.

Entre las personas galardonadas se encuentran tres miembros de la RSEQ: la Prof.^a María del Carme Rovira Virgili, presidenta del Grupo Especializado de Química y Computación; el Dr. Jesús Campos Manzano, vocal de la Junta de Gobierno de la RSEQ, y la Prof.^a María Soledad Martín González.

La Prof.^a María del Carme Rovira Virgili ha recibido el Premio Nacional de Investigación "Enrique Moles", en el área de Ciencia y Tecnología Químicas; la Prof.^a María Soledad Martín González ha sido distinguida con el Premio Nacional de Investigación "Juan de la Cierva", en el área de Transferencia del Conocimiento; y el Dr. Jesús Campos Manzano ha recibido el Premio Nacional de Investigación para Jóvenes "María Teresa Toral", en el área de Ciencia y Tecnología Químicas.

La concesión de estos galardones destaca la relevancia de la química dentro del sistema científico español y reconoce tanto trayectorias consolidadas como el talento emergente en esta área. Los premios, otorgados por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades, constituyen una de las principales distinciones científicas en España.



Acto de entrega de los Premios Nacionales de Investigación 2025 en el Palacio Real de Pedralbes, Barcelona.

Samuel Sánchez y Alfonso Saiz-López, galardonados con los Premios Rei Jaume I 2026

Los Profs. Samuel Sánchez y Alfonso Saiz-López han sido galardonados en la 38.ª edición de los Premios Rei Jaume I, en las categorías de Nuevas Tecnologías y Protección del Medio Ambiente, respectivamente. Estos premios reconocen trayectorias científicas, tecnológicas y emprendedoras de especial impacto, desarrolladas en gran parte en España.

Samuel Sánchez, profesor de investigación ICREA en el *Institute for Bioengineering of Catalonia* (IBEC), ha sido reconocido por sus contribuciones al desarrollo de nanomotores autopropulsados y robótica biohíbrida, con aplicaciones biomédicas. Su investigación ha impulsado plataformas tecnológicas basadas en nanosistemas activos y ha dado lugar a iniciativas de transferencia como *Nanobots Therapeutics*, empresa de la que es cofundador.

Por su parte, Alfonso Saiz-López, profesor de investigación en el Instituto de Química Física Blas Cabrera del CSIC, ha recibido el premio por sus contribuciones al estudio de la química atmosférica y su impacto en el cambio climático. Su trayectoria ha contribuido a comprender mejor los procesos

químicos que tienen lugar en la atmósfera y su relación con el clima.

Estos reconocimientos ponen de relieve la contribución de la química española a ámbitos de gran impacto científico y social, desde las nanotecnologías biomédicas hasta la comprensión de los procesos atmosféricos relacionados con el cambio climático.



Profs. Samuel Sánchez y Alfonso Saiz-López.

Avelino Corma, galardonado en los Premios XLSemanal 2026

Avelino Corma, investigador del Instituto de Tecnología Química (ITQ, CSIC-UPV), ha sido galardonado en la categoría de Ciencia e Innovación en la cuarta edición



Prof. Avelino Corma.

de los Premios XLSemanal. La ceremonia se celebró el 4 de junio de 2026 en la Real Academia de Bellas Artes de San Fernando, en Madrid. En esta edición también fueron reconocidos Isabel Coixet, en la categoría de Creación; Paloma O'Shea, en la categoría de Valores; y José Antonio Marina, en la categoría de Pensamiento.

El galardón reconoce la excelencia investigadora de Avelino Corma y su destacada contribución a la transferencia de conocimiento. Su trayectoria incluye más de 200 patentes, de las cuales 24 han llegado a explotarse comercialmente, así como una amplia actividad de investigación aplicada con impacto internacional. A lo largo de su carrera ha recibido algunas de las distinciones científicas más relevantes, entre ellas el Premio Príncipe de Asturias, el Premio Fronteras del Conocimiento, el Premio al Mejor Inventor Europeo y la Medalla de Oro de Eu-ChemS.

Este nuevo galardón se suma a una trayectoria ampliamente reconocida por sus contribuciones a la catálisis, la innovación tecnológica y la transferencia de conocimiento.

Primera edición del Basque Catalysis Symposium (BasKAT)

El Auditorio del Aulario Barriola, en Donostia-San Sebastián, acogió recientemente la primera edición del Basque Catalysis Symposium (BasKAT), un encuentro dedicado a la catálisis y áreas afines que reunió a investigadores e investigadoras del ecosistema científico vasco.

La jornada se planteó como un foro para el intercambio de conocimientos, la presentación de líneas de investigación actuales y el fomento de nuevas colaboraciones en el ámbito de la catálisis. El programa contó con una conferencia plenaria de apertura a cargo de Avelino Corma (ITQ-CSIC), así como con las contribuciones de Ignacio Piquero (CFM-MPC, Ikerbasque), Ana Beloqui (POLYMAT, Ikerbasque), Luca Salassa (DIPC, Ikerbasque), Elisa Jiménez-Izal (EHU) y Fernando López-Gallego (CIC biomaGUNE, Ikerbasque).

El encuentro fue presidido y organizado por Ester Verde (CFM-MPC, Ikerbasque), Martina Corso (CFM-CSIC), Aurelio Mateo-Alonso (POLYMAT, Ikerbasque, EHU) y Jon Mattin Matxain Beraza (EHU, DIPC). Asimismo, contó con el respaldo institucional del CFM-CSIC, la Facultad de Química de la EHU, POLYMAT, el DIPC y la Sección Territorial del País Vasco de la Real Sociedad Española de Química.

Tras la buena acogida de esta primera edición, la iniciativa nace con vocación de continuidad y con el objetivo de incorporar en futuras ediciones la participación y colaboración de centros de investigación de Bizkaia y Álava.



Participantes en la primera edición del Basque Catalysis Symposium (BasKAT).

II Simposio Científico IQAR-UAH

El pasado 14 de mayo se celebró el II Simposio Científico IQAR-UAH, organizado por el Instituto de Investigación Química «Andrés M. del Río» (IQAR) de la Universidad de Alcalá. Este instituto reúne a los grupos de investigación que desarrollan su actividad en el ámbito de la Química y disciplinas afines dentro de la universidad.

La jornada se planteó como un foro para el intercambio de ideas, la promoción de la colaboración científica y la creación de sinergias entre investigadores. Las principales líneas de

investigación del IQAR, Energía y Sostenibilidad y Salud y Alimentos, estructuraron el contenido del simposio.

El encuentro contó con la participación de más de cien asistentes y con las conferencias invitadas del Prof. José Manuel Pingarrón, de la Universidad Complutense de Madrid, y la Prof.^a Inés Corral, de la Universidad Autónoma de Madrid. Asimismo, se presentaron cuatro comunicaciones orales a cargo de jóvenes investigadores pertenecientes a diversos grupos del instituto.



Participantes en el II Simposio Científico IQAR-UAH, celebrado el 14 de mayo en la Universidad de Alcalá.

XXXIX Olimpiada Española de Química 2026

La Universidad de Alicante acogió, del 24 al 26 de abril de 2026, la fase nacional de la XXXIX Olimpiada Española de Química, organizada por la Real Sociedad Española de Química a través de su Sección Territorial de Alicante. En esta edición participaron 115 estudiantes procedentes de todas las comunidades autónomas.

El acto de apertura contó con representantes de la Universidad de Alicante, del Ministerio de Educación, Formación Profesional y Deportes y de la RSEQ, e incluyó un reconocimiento a Pelayo Rubido Muñiz por su contribución pionera al desarrollo de las Olimpiadas de Química en Galicia y en España. La conferencia inaugural fue impartida por Eugenio Coronado Miralles, catedrático de Química Inorgánica de la Universidad de Valencia y director del Instituto de Ciencia Molecular. Al día siguiente, la Facultad de Ciencias acogió

las pruebas de la competición, mientras que el profesorado acompañante participó en la IX Jornada de Química para Profesorado de Secundaria.

El ganador absoluto de esta edición fue Víctor Zhou, alumno del Colegio Internacional Ausiàs March de Picassent, que repite como ganador por segundo año consecutivo. El resto de medallas de oro correspondieron a Mateo Domenech Ibáñez, Antso Vidondo Aguirrebalzategui, Javier Romero Hermosel, Sergio Carbonero Muñoz, Carlos Celada Esteve, Adrián Ligorred Obedé, Sergio Rastrilla Tabernero, Pablo Garzón Cobo y David Lago Alonso. La ganadora femenina fue Carolina González Zapata, seguida de Carla Acosta García.

Los vencedores representarán a España en las olimpiadas supranacionales de química, Internacional e Iberoamericana, que se celebrarán en julio y octubre de 2026.



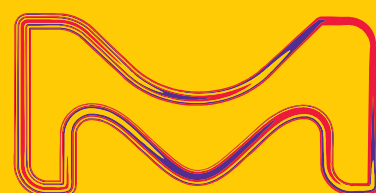
Participantes en la fase nacional de la XXXIX Olimpiada Española de Química, celebrada en la Universidad de Alicante.



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