

Anales de

Química

de la RSEÖ

La revista de la Real Sociedad Española de Química

• Vol. 122 • N° 3 • 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.

Comité Editorial

Carla Casadevall
*Departamento de Química Física, Universitat Rovira i Virgili,
Institut 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 Uribe
*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 3 · julio-septiembre 2026

SUMARIO



Diseño y maquetación:
Ostraca Servicios editoriales

Ilustración portada:
Eugenio Vázquez Sentís

An. Quím. RSEQ, 2026, 201-268
ISSN: 2792-520X
e-ISSN: 2792-5250
D. L.: M-232-1958

Carta del editor

Juan Á. Casares 204

Carta del presidente

Presentación de la editorial "Libros de la RSEQ"

Fernando P. Cossío 205

Investigación química

Transition metal catalyzed oxidative arene alkenylation: the impact of oxidant identity on reaction rate and selectivity

Aida Abdi, Sophia West, Marc T. Bennett y T. Brent Gunnoe 206

Dispersión, funcionalización química y ensamblaje de los nanotubos de nitruro de boro

Ángel A. Martí 215

El yin y el yang de la química monoelectrónica del níquel

Ana Bahamonde 222

Investigadores menores de 35

Técnicas electroquímicas básicas para la caracterización de materiales pseudocapacitivos: estudio de caso en CPE-K

Óscar Medrano, Samuel Benjamin Baker y Ricardo Javier Vázquez 227

Entrevista

De la molécula al medicamento: química, innovación y desarrollo farmacéutico en Johnson & Johnson.

Entrevista al Dr. Andrés A. Trabanco

María Paulis 235

Enseñanza de la química

Aprender a explicar y diseñar con la química

Vicente Talanquer 239

Percepciones en la implementación de proyectos de aprendizaje basado en problemas en currículo de química avanzada en una escuela secundaria

Kermin J. Martínez-Hernández y Marie LoRe-Geigel 244

Historia de la química

50° Aniversario de la creación de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid

Miguel A. Alario, Rubén Miranda, José L. Sotelo, M. Teresa Villalba, M. Belén Yélamos 251

Noticias 258

Carta del editor

Juan Á. Casares

Este número de Anales está dedicado al 250 aniversario de la Independencia de los Estados Unidos de América. Celebramos la creación de una nación que se fundó sobre los principios de la Ilustración, el imperio de la razón y la ley, y la igualdad entre las personas. De esos principios muy pronto se derivó el respeto por la ciencia, y a finales del siglo XIX los Estados Unidos eran ya una potencia científica de primer orden. La prosperidad de los Estados Unidos ha estado basada en su prosperidad científica y tecnológica, que le ha permitido sobreponerse a otras naciones en tiempos de paz y en tiempos de guerra. En la actualidad los Estados Unidos son, sin lugar a dudas, la primera potencia científica del mundo, y desde luego lo son en química. Resultaría absurdo, por imposible, intentar reflejar todo esto, la variedad de temas de investigación y la cantidad de investigadores sobresalientes, en un solo número de Anales. Eso está lejos de nuestro objetivo. En este número de celebración hemos pretendido simplemente eso, celebrar el 250 aniversario de una nación particularmente comprometida con la ciencia y con la química, y para ello hemos invitado a algunos autores, amigos de la RSEQ que por distintas razones han tenido contacto con nuestra sociedad, a escribir acerca de la investigación que están haciendo.

Empieza el número con un artículo de Brent Gunnoe y colaboradores. Brent Gunnoe es uno de los mejores representantes en la larga y lujosa nómina de investigadores en química organometálica norteamericana y que en ese sector hipercompetitivo de la investigación ha sabido encontrar la dirección en la que se mueve la frontera del conocimiento para mantenerse en ella. Brent Gunnoe es también un ejemplo de la profunda conexión que existe entre los dos países en esta rama de la química: ha sido conferenciante invitado en los Seminarios Itinerantes del Grupo Especializado en Química Organometálica, también lo ha sido en la Escuela Internacional de Química Organometálica Marcial Moreno Mañas, ha acogido en su laboratorio a distintos investigadores españoles como investigadores postdoctorales y mantiene una fluida y constante colaboración con varios grupos de investigación españoles. Su artículo, en el que analiza el papel de los agentes oxidantes en la alquienilación de arenos, muestra un campo en el que la investigación tiene una inmediata repercusión en la industria química.

Ángel A. Martí ha sido muy activo en la promoción de la colaboración entre la ACS y la RSEQ, siempre dispuesto a tender puentes entre las dos orillas del Atlántico. En investigación se mueve en el difícil vértice que une la química inorgánica, el estudio de materiales y la bioquímica. En su artículo nos presenta el estado del arte en la preparación, purificación, funcionalización y estudio de propiedades de los nanotubos de nitruro de boro (NTNB). Sin su colaboración este número no habría sido posible.

Ana Bahamonde es el ejemplo perfecto de cómo el talento creado en España puede asentarse y tener una carrera de éxito haciendo química en el difícil y competitivo sistema de investi-

gación estadounidense. Es también un ejemplo de la excelencia en la formación en química que se produce en nuestras mejores universidades y centros de investigación. En su artículo nos presenta la complejidad y la riqueza de la química orgánica que se deriva del uso de catalizadores de níquel, la dificultad de su estudio y su versatilidad.

En la sección de jóvenes investigadores "Menores de 35", Ricardo Javier Vázquez y colaboradores nos adentran en el vanguardista mundo de los materiales pseudocapacitivos, capaces de almacenar energía electroquímica en ciclos de carga/descarga rápidos y su caracterización.

En este número damos la bienvenida a un nuevo contenido en la sección de entrevistas a representantes de la industria química. Esta sección está coordinada por María Paulis, y en su primera entrega está dedicada a una empresa que representa espléndidamente la colaboración entre los profesionales de la química en Estados Unidos y España, y que está muy implicada en las actividades de la RSEQ: Johnson & Johnson. El personaje entrevistado es Andrés A. Trabanco, director sénior y responsable global de Screening Triage y Química Temprana en Johnson & Johnson.

La sección de Educación recoge dos aportaciones extraordinariamente interesantes desde el punto de vista docente, más en épocas de tribulación e informes PISA. Tenemos la enorme suerte de contar con un artículo del maestro Prof. Vicente Talanquer, referencia incuestionable en didáctica de la química. En su artículo disecciona las bondades de la enseñanza de la química en tanto que razonamiento mecanístico sobre el pensamiento sistémico. A la luz del artículo, quizá debamos reflexionar acerca de la necesidad de usar la enseñanza de la química para mejorar las habilidades y competencias generales, y específicas de otras áreas, ya que parece haber consenso en que estamos necesitados de alternativas. Finalmente, Kermin J. Martínez-Hernández y Marie LoRe-Geigel analizan los resultados de un proyecto de implementación del Aprendizaje Basado en Problemas (ABP) en el currículo de química avanzada de una escuela secundaria. Es un estudio extraordinariamente detallado y riguroso que merece toda la atención de quienes nos dedicamos a la docencia, ya sea preuniversitaria o universitaria.

Cierra el número un artículo sobre la historia de la Facultad de Ciencias de la Universidad Complutense. Por la importancia que en la investigación y la enseñanza de la química en España ha tenido esta institución, no podríamos dejar pasar su 50 aniversario sin reseñarlo, y más cuando su publicación sirve para traernos a la memoria a nuestro querido y recordado Miguel Ángel Alario. Agradezco a los autores, en particular a Belén Yélamos, el habernos hecho llegar este artículo.

En todos los números de Anales la contribución de los Editores Asociados es imprescindible. En este lo ha sido más; desde aquí, mi agradecimiento.

Espero que disfruten de la lectura.

Presentación de la editorial “Libros de la RSEQ”

Fernando P. Cossío

Desde la fundación de la Sociedad Española de Física y Química en 1903, y de la Real Sociedad Española de Química en 1980, la difusión de la Química se ha realizado mediante la revista *Anales* y la difusión digital a través de nuestra web. De forma complementaria a estas actividades, ponemos en marcha la edición de libros bajo la marca “Libros de la RSEQ”. La razón de esta iniciativa es clara: ni el espacio que permiten los artículos de una revista ni la inmediatez de las páginas web permiten abordar detalladamente temas complejos, ni redactar manuales de uso práctico. Por otra parte, con la edición de libros propios pretendemos también alcanzar un público diferente y más amplio. Próximamente saldrá el primero de los volúmenes: “Los trabajos y los días de los químicos españoles: Historia de la química española en el siglo XX”, cuyo autor es Luis A. Oro Giral y en el que Ernesto de Jesús Alcañiz ha actuado como editor. El libro ha sido prologado por José Elguero Bertolini. Con este libro la RSEQ inicia esta nueva etapa en su acción editorial, que esperamos continúe con la edición de otros textos que aborden desde aspectos docentes e investigadores, hasta ensayos y, como en este caso, historia de la química en España e Hispanoamérica.

Este libro del profesor Oro es un excelente punto de partida para esta nueva andadura, ya que constituye un estudio histórico de notable envergadura sobre la evolución de la investigación científica en química en España a lo largo del siglo XX, desde los últimos decenios del siglo XIX hasta la plena integración de la ciencia española en el espacio científico europeo. El arco temporal elegido no es arbitrario: en él se inscriben episodios decisivos para la historia de la ciencia y de las instituciones españolas, como el impulso modernizador de la Junta para Ampliación de Estudios e Investigaciones Científicas (JAE), la devastación institucional provocada por la Guerra Civil y la larga posguerra, y la paulatina recuperación y normalización científica que culminó con la incorporación de España a los organismos y redes científicas de ámbito europeo e internacional.

La obra aborda este itinerario desde una doble perspectiva: la de las instituciones —la JAE, el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), la presencia española en la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC), la Comisión Asesora de Investigación Científica y Técnica (CAICYT), o el marco normativo definido por la Ley de Reforma Universitaria (LRU) y la Ley de la Ciencia— y la de las personas, a través de aproximaciones biográficas breves y accesibles acerca de doscientas figuras de la química española nacidas entre 1850 y 1930. Entre ellas se cuentan nombres tan señeros como Enrique Moles, José María Albareda, Manuel Lora-Tamayo, José Pascual Vila o Antonio Rius Miró, junto a otros menos conocidos cuya recuperación enriquece notablemente el panorama ofrecido.

El resultado es una obra de síntesis rigurosa y bien documentada, que combina el análisis institucional con la historia de las comunidades científicas y la reconstrucción de trayectorias individuales, ofreciendo así una lectura de la química española del siglo XX que atiende simultáneamente a sus dimensiones científica, política y social.

Resulta llamativo —y significativo— que la bibliografía disponible sobre la historia de la química española en el período estudiado sea extraordinariamente escasa, en particular por lo que respecta a las décadas de la dictadura y de la transición democrática. Esta laguna historiográfica no es inocua: implica que procesos cruciales para la formación del sistema científico español contemporáneo han permanecido insuficientemente documentados y analizados, cuando no directamente ignorados en la literatura académica. El presente libro viene a llenar ese vacío con criterio y rigor.

La oportunidad de la obra es doble. Por una parte, historiográfica: existe una necesidad real y reconocida de estudios que articulen, con perspectiva de conjunto, la evolución de la ciencia española en el siglo XX. Por otra, urgente en términos documentales: el autor ha podido acceder a testimonios directos de científicos que vivieron en primera persona los períodos y procesos descritos, cuya memoria viva está próxima a desaparecer. La captación y preservación de ese conocimiento de primera mano representa, por sí sola, una aportación de valor difícilmente repetible.

En este sentido, la obra no solo interesa a los especialistas en historia de la ciencia, sino también a los historiadores del siglo XX español en sentido amplio, y a todos nosotros, los profesionales de la investigación, la docencia y la industria químicas, y a cuantos se interesen por la relación entre ciencia, política e instituciones en la España contemporánea. Por tanto, cumple perfectamente los objetivos de difusión que nos proponemos al iniciar esta labor editorial.

La obra se articula en doce capítulos que recorren la historia de la química española de manera ordenada y coherente. Tras situar el marco institucional en los capítulos iniciales —dedicados al legado de Ramón y Cajal como impulsor de la investigación científica española y a la JAE como primer gran proyecto de modernización científica del país—, el libro analiza con detalle la actividad desarrollada en tiempos de la Junta en las distintas subdisciplinas (química orgánica, inorgánica y física), así como los hitos internacionales representados por los Congresos Internacionales de Química de 1933 y 1934.

El tratamiento de la ruptura producida por la Guerra Civil y la posguerra y dictadura posteriores ocupa un lugar central y es, probablemente, la parte más novedosa de la obra, especialmente para los lectores más jóvenes. Los capítulos dedicados a la depuración y el exilio, a la creación del CSIC y a la relación de este con la universidad y las cátedras universitarias abordan con rigor un período que ha recibido escasa atención en la literatura especializada. El análisis de la química en sus distintas ramas tras la Guerra Civil —orgánica, física, inorgánica, analítica y técnica— permite evaluar tanto las pérdidas ocasionadas por la represión y el exilio como los mecanismos de continuidad y reconstrucción que operaron en condiciones muy adversas.

Los capítulos finales se ocupan de la modernización de la política científica española —a través de la CAICYT, la Ley de la Ciencia y el Plan Nacional de I+D— y de la evolución general de la química española hasta los albores del siglo XXI. La inclusión de un capítulo específico sobre la revista *Anales* de Física y Química resulta especialmente pertinente, dado el papel que esta publicación desempeñó como termómetro y espejo de la actividad científica española a lo largo del período estudiado.

La bibliografía, sólida y actualizada, refleja un manejo amplio de las fuentes disponibles y evidencia el esfuerzo del autor por contrastar y fundamentar documentalmente cada una de sus afirmaciones.

Desde el punto de vista literario, cabe señalar que el texto está escrito con claridad, rigor y precisión, pero también con amenidad y fluidez narrativa: el autor ha sabido hacer accesible una materia técnicamente exigente a un público amplio, sin sacrificar por ello la profundidad del análisis ni la exactitud de los datos. Las semblanzas biográficas, en particular, están construidas con sensibilidad y economía expresiva, logrando que figuras de nombre familiar —o, en ocasiones, quizá desconocido— para el lector general cobren vida y relevancia en el relato. El resultado es un libro que se lee con interés y provecho, capaz de proporcionar información útil a la mayoría de la comunidad química española e hispanoamericana.

Transition metal catalyzed oxidative arene alkenylation: the impact of oxidant identity on reaction rate and selectivity

Alquenilación oxidativa de arenos catalizada por metales de transición: influencia de la naturaleza del oxidante en la velocidad y la selectividad de la reacción

Aida Abdi[†], Sophia West[†], Marc T. Bennett and T. Brent Gunnoe^{*†}

Department of Chemistry, University of Virginia, Charlottesville, Virginia, United States.

KEYWORDS:

Arene
Alkenylation
Alkylation
Late transition metal
Rhodium

ABSTRACT:

Rh-, Pd-, Ir-, and Ru-based catalysts for the oxidative conversion of olefins and arenes to alkenyl arenes have been reported. Proposed mechanisms often invoke arene C–H activation, olefin insertion into M–aryl bonds, β -hydride elimination, and reaction of M–H intermediates with an oxidant. Of central importance is identification of oxidants that do not generate oxidized transition metal complexes that are catalytically inactive. Herein, we overview reported oxidants for arene alkenylation reactions catalyzed by homogeneous late transition metal complexes and their influence on reaction rate and selectivity. This review is limited to reactions involving hydrocarbon olefins and arenes without functionalized directing groups and will not cover the extensive literature on directed arene alkenylation reactions.

PALABRAS CLAVE:

Areno
Alquenilación
Alquilación
Metales del final de las series de transición
Rodio

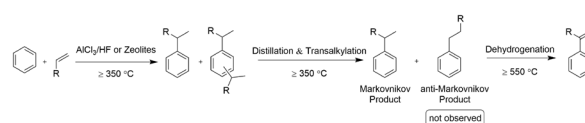
RESUMEN:

Se han descrito catalizadores que contienen Rh, Pd, Ir y Ru para la conversión oxidativa de olefinas y arenos en alquenilarenos. Los mecanismos propuestos suelen incluir la activación del enlace C–H del areno, la inserción de la olefina en los enlaces M–arilo, la β -eliminación de hidrógeno y la reacción de los intermedios M–H con un oxidante. Es de vital importancia identificar oxidantes que no generen productos de reacción catalíticamente inactivos. En este artículo, recogemos ejemplos de oxidantes descritos para las reacciones de alquenilación de arenos catalizadas por complejos de metales del final de las series de transición, y de su influencia en la velocidad de reacción y la selectividad. Esta revisión se limita a las reacciones en las que intervienen olefinas hidrocarbonadas y arenos no funcionalizados con grupos directores, y no abarca la extensa bibliografía sobre reacciones de alquenilación de arenos con dichos grupos directores.

Introduction

Alkenyl and alkyl arenes are fundamental building blocks for various materials such as plastics, fragrances and pharmaceuticals.^[1–3] In 2024, 42 million tons of styrene were produced, and these numbers are expected to grow over the next ten years.^[4] The production of styrene is energy intensive, first requiring the alkylation of benzene and ethylene via Friedel-Crafts catalysis or a zeolite-catalyzed reaction to produce ethylbenzene (Scheme 1).^[5] Benzene alkylation and product purification via distillation is followed by an energy intensive dehydrogenation.^[6] There are many disadvantages to these commercial processes including over alkylation, the production of halogenated waste, the inability to form styrene from benzene in a single step, and catalyst dictated selectivity for reactions of substituted arenes and olefins (Scheme 1).^[7–11]

Transition metal catalyzed oxidative coupling of arenes and olefins to alkenyl arenes offers potential advantages to current



Scheme 1. General synthesis of alkenyl arenes via Friedel-Crafts alkylation followed by dehydrogenation, presenting challenges such as harsh conditions, high temperature, polyalkylation, and non-selectivity for linear alkylated arenes.

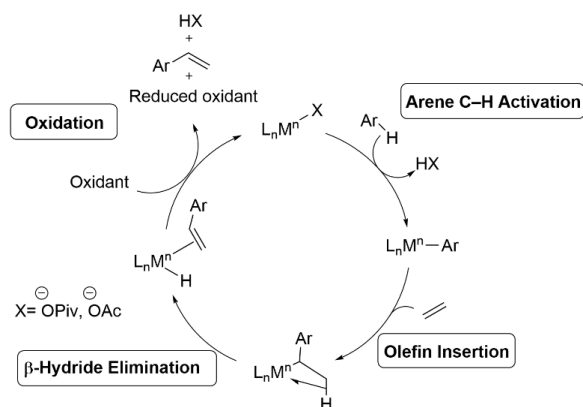
commercial routes. Our group and others have reported Rh,^[12–33] Pd,^[8,14,25,31,34,35] Pt,^[36–39] Ru,^[31,40,41] and Ir catalysts for this transformation.^[31,42] Often, these catalysts have been proposed to operate via C–H activation, olefin insertion, β -hydride elimination, and reaction of M–H intermediates with an in-situ oxidant to regenerate the starting catalyst (Scheme 2).

Our group has shown that oxidant identity can impact reaction kinetics and selectivity for arene alkenylation.^[43] For example,

CÓMO CITAR: A. Abdi, S. West, M. T. Bennett, T. B. Gunnoe. *An. Quím. RSEQ* **2026**, 122, 206-214, <https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2145>

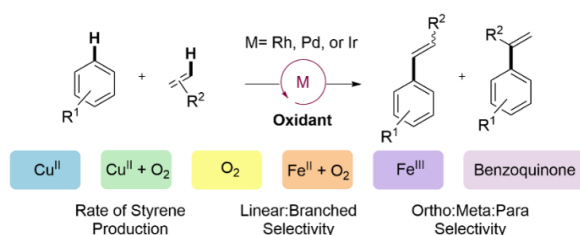
* E-mail: tbgt7h@virginia.edu

[†] Co-first authors who contributed approximately equally to the manuscript.



Scheme 2. General mechanism that is often proposed for transition metal catalyzed oxidative coupling of arenes and olefins to form alkenyl arenes. The stoichiometry of the balanced overall reaction and of some steps in the catalytic cycle depend on the oxidant identity. Thus, it is not possible to show correct stoichiometric for all variations.

in addition to impact on reaction rate for arene alkenylation, when using mono-substituted olefins such as propylene, differences in Markovnikov versus anti-Markovnikov selectivity, also referred to as linear:branched selectivity, based on oxidant identity have been quantified (Scheme 3). Further, when using mono-substituted arenes, *ortho*:*meta*:*para* regioselectivity for arene alkenylation can also vary with oxidant identity (Scheme 3).



Scheme 3. Oxidant identity impacts the rate of arene alkenylation, linear:branched selectivity when using mono-substituted olefins and *ortho*:*meta*:*para* selectivity for alkenylation of mono-substituted arenes.

This review will focus on the effect of in situ oxidant identity on reaction rate and product selectivity. Primarily, we discuss Rh-based catalysis since the majority of detailed mechanistic studies are for such reactions, but we include results from different catalysts as warranted.

Overview of oxidants

We will discuss Cu(II) carboxylates, dioxygen, Fe(III) carboxylates, and benzoquinones as oxidants for transition metal catalysis. While the use of dioxygen as the ultimate oxidant is likely required for the economic viability of any commercial process, there are several potential disadvantages to using it as the sole oxidant including the formation of off-cycle species with low valent metal centers,^[44-46] and the kinetically challenging oxidation of metal hydrides.^[21,47] Thus, use of in situ oxidants that can be recycled by dioxygen is a common strategy. A successful example is the commercial Wacker process in which CuCl₂ is the operative oxidant, and CuCl and HCl are converted back to CuCl₂.^[48] In addition to the Wacker process, Cu(II) carboxylates have been used as oxidants in transition metal catalyzed arene alkenylation reactions including the Fujiwara-Moritani reaction.^[49] Given the precedence for commercial use of Cu(II) for catalytic

ethylene oxidation, we investigated Cu(II) carboxylates under both aerobic and anaerobic conditions for Rh-catalyzed arene alkenylation. Fe(III) has been studied as a catalyst for hydrocarbon oxidation reactions.^[50-53] Additionally, some complexes of Fe(II) are known to undergo oxidation upon reactivation with dioxygen.^[50-54] The oxidative coupling of arenes and electron-deficient olefins catalyzed by Pd(OAc)₂ using benzoquinones as oxidant has been reported by the Bäckvall and Fujiwara groups.^[50-56]

Rate of styrene production

We have quantified the kinetics of benzene ethenylation for each oxidant using 0.001 mol% of the catalyst precursor $[(\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4)_2\text{Rh}(\mu\text{-OAc})_2]$ (relative to benzene per single Rh atom), 960 equiv of HOPiv (relative to single Rh atom), and 70 psig of ethylene at 150 °C.^[25] When using 480 equiv of Cu(OPiv)₂, an initial turnover frequency (TOF) of 0.101(9) s⁻¹ was observed (Table 1, entry 1), which is the highest TOF observed for any oxidant that we studied for Rh-catalyzed styrene formation. When 1 atm of O₂ is added with Cu(OPiv)₂, thus rendering Cu(III) catalytic rather than stoichiometric, the TOF is ~3-fold slower (entry 2). We speculate that the slower rate of catalysis in the presence of O₂ could be due to O₂ reacting with Rh to form off-cycle and catalytically inactive Rh species. When 1 atm O₂ and 480 equiv of Fe(OAc)₂ is used, a TOF of 0.0084(3) s⁻¹ was observed (entry 3), similar to the rate using anaerobic Fe(III) (see below), indicating that dioxygen is not as detrimental as it is with Cu(OPiv)₂. Use of 80 equiv Fe₆(μ-OH)₂(μ₃-O)₂(μ₂-OPiv)₁₂(HOPiv)₂ under anaerobic conditions resulted in a TOF of 0.0073(7) s⁻¹ (entry 4). Use of 1 atm of O₂ as the sole oxidant gave the lowest TOF of 0.0006(1) s⁻¹ (entry 5). We attribute the slow rate to be due in part to the Rh-H oxidation step being kinetically challenging.^[43] Use of Pd catalysis was also compared to Rh using 480 equiv Cu(OPiv)₂ and 960 equiv HOPiv at 120 °C. It was found that using Pd(OAc)₂ as the catalyst precursor is > 20-fold slower than Rh and has 82% selectivity towards styrene, compared to 98% for Rh (entries 6 and 7).

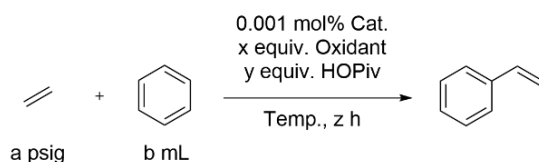
Kinetics of styrene production using benzoquinones was also studied using 0.001 mol% of the catalyst precursor $[(\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4)_2\text{Rh}(\mu\text{-OPiv})_2]$, 960 equiv HOPiv, 70 psig of ethylene, and 240 equiv of benzoquinone derivatives at 170 °C.^[30] We demonstrated that *ortho*-benzoquinones exhibit a faster rate of styrene production than *para*-benzoquinones with the fastest styrene production observed using 1,2-naphthoquinone (entries 8 and 9).

The formation of undesirable side products during styrene production was quantified for each oxidant (Table 2). Use of Cu(OPiv)₂ resulted in 93% selectivity towards styrene with vinyl pivalate, biphenyl, phenyl pivalate, and *trans*-stilbene formed as side products.^[43] When using Cu(OPiv)₂ under aerobic conditions, selectivity towards styrene decreases and more phenyl pivalate is formed in comparison to anaerobic conditions (Entries 1 and 2). The decreased selectivity for styrene is likely due to the suppressed rate of formation of styrene while having less impact on rate of phenyl pivalate formation when using Cu(OPiv)₂/O₂ compared to anaerobic Cu(OPiv)₂.^[57] Use of only O₂ gave the highest selectivity towards styrene, 95%, with the most significant side products observed being benzaldehyde and biphenyl. Use of Fe(OAc)₂ as the oxidant under aerobic conditions results in the elimination of phenyl acetate or phenyl pivalate as a side product, although benzaldehyde production is observed (Entry 4). Use of Fe₆(μ-OH)₂(μ₃-O)₂(μ₂-OPiv)₁₂(HOPiv)₂ as the oxidant under anaerobic conditions results in significant biphenyl production (Entry 5), which is much more prominent than with use of Fe under aerobic conditions.

Table 1. Kinetics of benzene ethenylation to styrene as a function of metal catalyst and oxidant identity. Eq. 1.

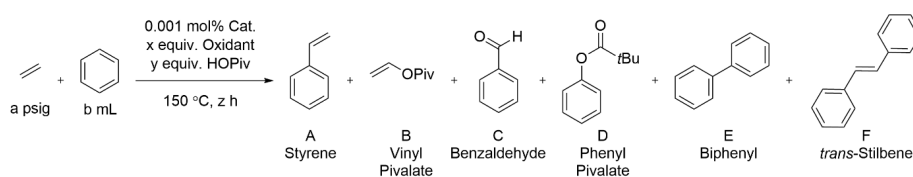
Entry	Catalyst precursor	Oxidant	oxidant (equiv)	O ₂ (atm)	HOPiv (equiv)	Ethylene pressure (psig)	Benzene amount (mL)	Temp (°C)	TOF (s ⁻¹)
1	Rh ^I	Cu(OPiv) ₂	480	–	480	70	7.5	150	0.101(9)
2	Rh ^I	Cu(OPiv) ₂ /O ₂	480	1	480	70	7.5	150	0.045(4)
3	Rh ^I	Fe(OAc) ₂ /O ₂	480	1	480	70	7.5	150	0.0084(6)
4	Rh ^I	Fe ₆ (μ-OH) ₂ (μ ₃ -O) ₂ (μ-OPiv) ₁₂ (HOPiv) ₂	80	–	480	70	7.5	150	0.0073(7)
5	Rh ^I	O ₂	–	1	480	70	7.5	150	0.0006(1)
6	Pd(OAc) ₂	Cu(OPiv) ₂	480	–	960	50	10	120	0.0026(1)
7	Rh ^I	Cu(OPiv) ₂	480	–	960	50	10	120	0.0561(7)
8	Rh ^{II}	1,2-naphthoquinone	240	–	960	70	7.5	170	0.04
9	Rh ^{II}	<i>para</i> -chloranil	240	–	960	70	7.5	170	0.0028

Rh^I = [(η²-C₂H₄)₂Rh(μ-OAc)]₂; Rh^{II} = [(η²-C₂H₄)₂Rh(μ-OPiv)]₂. Detailed reaction conditions can be found in original publications. Each TOF value represents the average of at least three independent experiments, and the values in parentheses represent the standard deviation in the final digit(s).

**Equation 1.****Table 2.** Product selectivity for benzene ethenylation as a function of catalyst precursor and oxidant identity. Eq. 2.

Entry	Catalyst precursor	Oxidant	% Selectivity					
			A	B	C	D	E	F
1	Rh ^I	Cu(OPiv) ₂	93	4	nd	<1	<1	2
2	Rh ^I	Cu(OPiv) ₂ /O ₂	90	1	1	3	1	2
3	Rh ^I	O ₂	95	nd	2	nd	2	nd
4	Rh ^I	Fe(OAc) ₂ /O ₂	92	1	2	nd	1	3
5	Rh ^I	Fe ₆ (μ-OH) ₂ (μ ₃ -O) ₂ (μ-OPiv) ₁₂ (HOPiv) ₂	92	<1	1	nd	5	<1
6	Rh ^I	Cu(OPiv) ₂	97	3	nd	nd	nd	nd
7	Pd(OAc) ₂	Cu(OPiv) ₂	96	4	nd	nd	nd	nd

Rh^I = [(η²-C₂H₄)₂Rh(μ-OAc)]₂; Rh^{II} = [(η²-C₂H₄)₂Rh(μ-OPiv)]₂; Ir^I = [Ir(μ-Cl)(coe)]₂; Fe₆ = Fe₆(μ-OH)₂(μ₃-O)₂(μ-OPiv)₁₂(HOPiv)₂. Detailed reaction conditions can be found in original publications. Use of "nd" indicates that the individual product selectivity's were not reported. L:B ratios represent the average of at least three independent experiments, and the values in parentheses represent the standard deviation in the final digit(s).

**Equation 2.**

Anti-Markovnikov to Markovnikov selectivity for benzene alkenylation using propylene

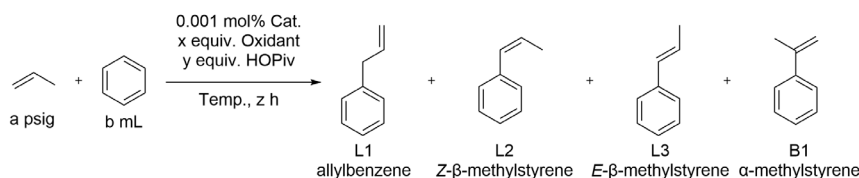
When using propylene as the olefin for alkenylation of benzene, the regioselectivity of propylene insertion into a metal-phenyl bond can dictate whether the Markovnikov (branched) or anti-Markovnikov (linear) product is formed (Scheme 2). Using a 0.001 mol% loading of $[\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4]_2\text{Rh}(\mu\text{-OAc})_2$ as the catalyst precursor and 960 equiv of HOPiv at 150 °C, we probed linear to branched selectivity with 50 psig of propylene as the olefin.^[43] Using 480 equiv of $\text{Cu}(\text{OPiv})_2$ as the sole oxidant (i.e., anaerobic), a linear:branched of 11.0(2):1 was observed (Table 3). The selectivity for linear products significantly decreases to

5.7(1):1 at otherwise identical conditions but in the presence of 1 atm of dioxygen. This finding provides evidence that the active Rh catalyst and/or reaction pathway are likely changed upon introduction of dioxygen. We speculated that this might be attributable to formation of dioxygen-coordinated intermediates. Use of dioxygen as the sole oxidant results in a linear:branched selectivity of 4.6(6):1, indicating the possibility of a distinct active species from the one formed in the presence of $\text{Cu}(\text{OPiv})_2$. In the presence of 1 atm of dioxygen and 480 equiv of $\text{Fe}(\text{OAc})_2$, a linear:branched ratio of 2.21(3):1 was observed, which is substantially lower than observed with the other oxidants. Use of $\text{Fe}_6(\mu\text{-OH})_2(\mu_3\text{-O})_2(\mu\text{-OPiv})_{12}(\text{HOPiv})_2$ as the oxidant

Table 3. Linear to branched selectivity for benzene propenylation as a function of catalyst precursor and oxidant identity. Eq. 3.

Entry	Catalyst precursor	Oxidant	Temp (°C)	% Selectivity				L:B
				L1	L2	L3	B1	
1	Rh ¹	$\text{Cu}(\text{OPiv})_2$	150	44	7	41	8	11.0(2):1
2	Rh ¹	$\text{Cu}(\text{OPiv})_2/\text{O}_2$	150	44	7	34	15	5.7(1):1
3	Rh ¹	$\text{Fe}(\text{OAc})_2/\text{O}_2$	150	7	14	47	32	2.21(3):1
4	Rh ¹	Fe_6	150	8	14	46	32	2.15(1):1
5	Rh ¹	O_2	150	42	7	35	16	4.6(6):1
6	Ir ¹	$\text{Cu}(\text{OHex})_2$	150	–	–	–	–	89(2):1
7	Rh ²	3,5-di- <i>tert</i> -butyl- <i>ortho</i> -benzoquinone	170	19	9	54	18	4.7(4):1
8	Rh ²	<i>o</i> -naphthoquinone	170	19	5	59	17	4.8(1):1
9	Rh ²	9,10-phenanthrenequinone	170	30	3	44	23	3.2(1):1
10	Rh ²	<i>o</i> -chloranil	170	28	11	33	28	2.6(1):1
11	Rh ²	anthraquinone	170	23	8	44	25	3.0(1):1
12	Rh ²	tetramethylquinone	170	34	32	14	20	4.1(4):1
13	Rh ²	2,5-di- <i>tert</i> -butyl- <i>p</i> -quinone	170	14	7	46	33	2.1(1):1
14	Rh ²	<i>p</i> -benzoquinone	170	27	9	38	26	2.85(4):1
15	Rh ²	2-chloroquinone	170	26	11	39	24	3.1(1):1
16	Rh ²	2,5-dichloro- <i>p</i> -benzoquinone	170	26	9	40	25	3.1(1):1
17	Rh ²	<i>p</i> -chloranil	170	27	12	34	27	2.65(7):1
18	Rh ²	<i>p</i> -fluoranil	170	10	5	35	50	1.03(9):1

Rh¹ = $[\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4]_2\text{Rh}(\mu\text{-OAc})_2$; Rh² = $[\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4]_2\text{Rh}(\mu\text{-OPiv})_2$; Ir¹ = $[\text{Ir}(\mu\text{-Cl})(\text{coe})_2]_2$; Fe_6 = $\text{Fe}_6(\mu\text{-OH})_2(\mu_3\text{-O})_2(\mu\text{-OPiv})_{12}(\text{HOPiv})_2$. Detailed reaction conditions can be found in original publications. Use of “–” indicates that the individual product selectivity's were not reported. L:B ratios represent the average of at least three independent experiments, and the values in parentheses represent the standard deviation in the final digit(s).



Equation 3.

under anaerobic conditions gives a similar linear:branched selectivity of 2.15(1):1. The observation that no significant variance in selectivity was observed for processes with Fe-based oxidants under aerobic versus anaerobic conditions could indicate that the active species is likely not sensitive to dioxygen, which contrasts to catalytic reactions using $\text{Cu}(\text{OPiv})_2$.

Linear:branched selectivity was also studied with *tert*-butyl ethylene, styrene and methyl acrylate, and a similar trend in linear:branched selectivity to that observed with propylene was found, linear:branched selectivity changes as a function of oxidant: $\text{Cu}(\text{II}) > \text{Cu}(\text{II})/\text{O}_2 > \text{O}_2 > \text{Fe}(\text{III})/\text{O}_2 \approx \text{Fe}(\text{III})$. While $\text{Cu}(\text{OPiv})_2$ and dioxygen produced trace branched product with electronically biased methyl acrylate or styrene as the olefin, use of $\text{Fe}(\text{III})$ yielded more significant branched product formation.^[43]

Using $\text{Ir}(\text{I})$ in place of $\text{Rh}(\text{I})$ as catalyst precursor results in a significant increase in linear:branched ratio, albeit with a significantly reduced reaction rate. With 0.005 mol% of $[\text{Ir}(\text{COE})_2\text{Ir}(\mu\text{-Cl})_2]$ as the catalyst precursor in benzene and 240 equiv of $\text{Cu}(\text{OHex})_2$ (OHex = 2-ethylhexanoate) (relative to single Ir atom), 960 equiv of HOHex and 30 psig of propylene, a linear:branched selectivity of 18(1.3):1 was observed after heating for three hours at 150 °C.^[42] Upon heating for 42 hours, the selectivity increased to 42(2):1.^[42] After control experiments indicated that the observed increase was not the result of an isomerization or selective decomposition of the branched product, we speculated that an increase in $\text{Cu}(\text{OPiv})$ concentration as the reaction progresses might be the origin of this observation. Use of an initial $\text{Cu}(\text{I}):\text{Cu}(\text{II})$ of 4:1 resulted in a linear:branched selectivity of 65(3):1 after 18 h, and no statistically significant variation was observed over time. From these results, we hypothesized that hetero-multimetallic species of $\text{Cu}(\text{II})$ and/or $\text{Cu}(\text{I})$ can form with Ir and the $\text{Cu}(\text{I})$ containing complexes more selectively form linear propenylbenzene products.^[42] This mirrors findings with Rh ,^[23,25,43] and Pd catalysis that hetero multi-metallic species with $\text{Cu}(\text{II})$ form under the reaction conditions and serve as the likely active catalysts.

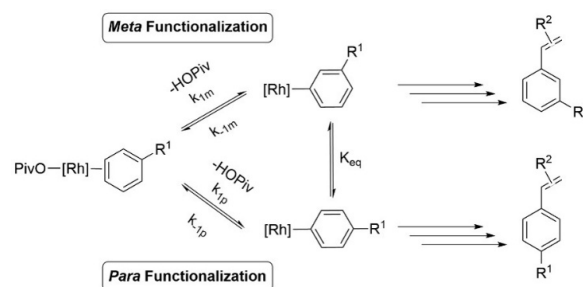
We studied the use of benzoquinone and impact on linear:branched selectivity using $[\text{Ir}(\text{C}_2\text{H}_4)_2\text{Rh}(\mu\text{-OPiv})_2]$ at 170 °C using 240 equiv of *ortho*-benzoquinone derivatives as the in-situ oxidant in the presence of 960 equiv of HOPiv and 50 psig of propylene.^[30] Use of *ortho*-chloranil as the oxidant results in a linear:branched of 2.6(1):1, 9,10-phenanthrene dione gives a selectivity of 3.2(1):1, 1,2-naphthoquinone, 1,2-naphthoquinone 4.8(1):1 and 3,5-di-*tert*-butyl-*ortho*-benzoquinone 4.7(4):1 (Table 3). Since benzoquinone derivatives can react with $\text{Rh}(\text{I})$ to form catecholate or semiquinone complexes, we speculated that ligand effects of the quinones might be the origin of the selectivity variation. Quinone donor ability was approximated using DFT-calculated $\text{p}K_{\text{a}1}$ values, and it was found that linear selectivity increases as ligand donor ability is increased.^[58] Notably, the selectivity did not correlate with quinone oxidizing ability, indicating that ligand effects, rather than Rh-H oxidation kinetics, likely dictate selectivity patterns.^[30] With *para*-benzoquinones, a linear:branched selectivity between ~1:1 and 4:1 were determined with no clear trend as a function of benzoquinone donor or oxidizing ability. We attributed this observation to *para*-benzoquinones either not

coordinating to Rh or not having a significant influence on linear:branched selectivity if coordinated.^[30]

Regioselectivity for alkenylation of mono-substituted arenes

Toluene ethenylation reactions were studied at 150 °C using 0.112 mM of $[\text{Ir}(\text{C}_2\text{H}_4)_2\text{Rh}(\mu\text{-OAc})_2]$ (relative to single Rh atom) as the catalyst precursor with 480 equiv of HOPiv and 45 psig of ethylene.^[43] With each oxidant, trace *ortho*-functionalization was observed. In the presence of 240 equiv of $\text{Cu}(\text{OPiv})_2$ under anaerobic conditions, a meta:para ratio of 1.4(1):1 was observed, and addition of 1 atm of air in combination with $\text{Cu}(\text{OPiv})_2$ results in a 1.1(1):1 meta:para ratio (Table 4). Consistent with studies of linear:branched selectivity using mono-substituted olefins (see above), the difference between aerobic and anaerobic conditions with $\text{Cu}(\text{OPiv})_2$ is significant. Use of 1 atm dioxygen as the sole oxidant yielded a 1.4(1):1 meta:para ratio. In the combination of $\text{Fe}(\text{OAc})_2$ and 1 atm dioxygen, a meta:para of 1.6(1):1 was observed, while use of $\text{Fe}_6(\mu\text{-OH})_2(\mu_3\text{-O})_2(\mu\text{-OPiv})_2(\text{HOPiv})_2$ under anaerobic conditions gave a 1.9(1):1 ratio.^[28] Similar trends were observed with *tert*-butylbenzene and chlorobenzene: trace or no *ortho* functionalization with meta:para ratios between ~1:1 and 2:1 were observed. With anisole as the olefin, $\text{Cu}(\text{II})$ carboxylates gave more significant *ortho* functionalization, possibly as a result of a weak directing effect from the oxygen atom.^[28]

In a previous report, we found that meta:para selectivity using $\text{Cu}(\text{OPiv})_2$ as the oxidant with $[\text{Ir}(\text{C}_2\text{H}_4)_2\text{Rh}(\mu\text{-OAc})_2]$ as the catalyst precursor for the alkenylation of mono-substituted arenes (e.g., toluene, ethylbenzene, *tert*-butylbenzene) with mono-substituted olefins (e.g., ethylene, propylene, vinyl cyclohexane) under anaerobic conditions is likely controlled by a combination of thermodynamic and kinetic contributions (Scheme 4).^[24] Since arene C-H activation is reversible, under conditions with high $[\text{HOPiv}]$ and low $[\text{C}_2\text{H}_4]$, an equilibrium between meta and para Rh-aryl intermediates likely contributes to the observed *ortho*:meta:para regioselectivity with ratios close to ~2:1. In contrast, reactions performed with low $[\text{HOPiv}]$ and high $[\text{C}_2\text{H}_4]$ give meta:para ratios close to ~1:1. We attributed this to *para* C-H activation being kinetically favored due to sterics with higher ethylene concentration decreasing the reversibility of toluene C-H activation by increasing the rate of ethylene insertion.^[24] This effect was particularly pronounced with anisole as the arene, which we studied in detail in a subsequent study.^[26]

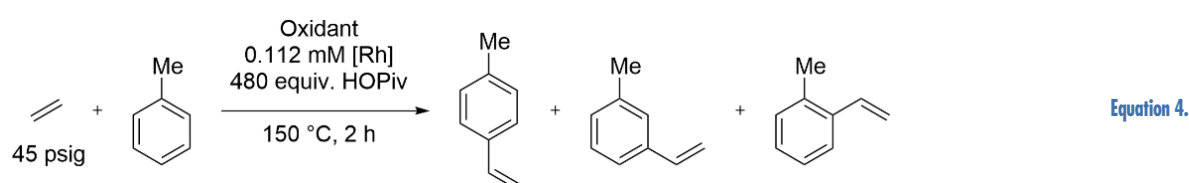


Scheme 4. Proposed equilibria and reactions that contribute to *ortho*:meta:para regioselectivity for Rh catalyzed alkenylation of mono-substituted arenes.

Table 4. *meta:para* regioselectivity for toluene ethenylation reactions under different conditions with different oxidants. Eq. 4.

Entry	Catalyst precursor	Oxidant	% Selectivity		
			<i>Ortho</i> functionalization	<i>Meta</i> functionalization	<i>Para</i> functionalization
1	Rh ^I	Cu(OPiv) ₂	Trace	58	42
2	Rh ^I	Cu(OPiv) ₂ /O ₂	Trace	52	48
3	Rh ^I	Fe(OAc) ₂ /O ₂	Trace	61.5	38.5
4	Rh ^I	Fe ₆	Trace	65.5	34.5
5	Rh ^I	O ₂	Trace	58	42
6	Pd(OAc) ₂	Cu(OPiv) ₂	20	40	40

Rh^I = $[\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4]_2\text{Rh}(\mu\text{-OAc})_2$; Fe₆ = Fe₆(μ-OH)₂(μ₃-O)₂(μ-OPIV)₁₂(HOPIV)₂. Detailed reaction conditions can be found in original publications.

**Table 5.** Comparison of *ortho:meta:para* regioselectivity in reported Pd(OAc)₂-catalyzed nondirected C–H alkenylation of toluene with acrylate coupling partners. Detailed reaction conditions can be found in original publications.

Entry	Arene	Olefin	Catalyst precursor	Oxidant	Ligand/Additive	Time (h)	Temp (°C)	<i>o:m:p</i> ratio
1	toluene	ethyl acrylate	Pd(OAc) ₂	PhCO ₃ tBu	Pyridine	6	100	1:1.2:1.3
2	toluene	ethyl acrylate	Pd(OAc) ₂	<i>t</i> -BuOOH & Benzoquinone	–	12	90	1:1:3
3	toluene	butyl acrylate	Pd(OAc) ₂	Benzoquinone/O ₂	Fe(II) phthalocyanine	24	90	1:1:2.5
4	toluene	methyl acrylate	Pd(OAc) ₂	(NH ₄) ₂ S ₂ O ₈	–	24	rt	1.3:1:2.9

Using Pd(OAc)₂ as the catalyst precursor under otherwise identical conditions to the Rh catalysis with Cu(OPiv)₂ as the oxidant was performed in the presence of 1 atm of air. For the reaction of toluene with ethylene an *ortho:meta:para* selectivity of ~0.5:1.0:1.0 was observed. The greater predilection towards *ortho* functionalization observed for Pd catalysis was attributed to the C–H activation step containing significant electrophilic character for Pd, whereas Rh catalysis possibly activates C–H bonds through an oxidative addition pathway, a rationalization that is consistent with Density Functional Theory (DFT) calculations.^[25] The Sanford group studied toluene alkenylation with ethyl acrylate using Pd(OAc)₂ as the catalyst precursor in the presence of pyridine ligands using PhCO₃tBu as the oxidant and observed an *ortho:meta:para* ratio of ~1:1.2:1.3, a greater predilection towards *ortho*-functionalization than observed with Cu(OPiv)₂ as the oxidant.^[11] Fujiwara and coworkers reported Pd(OAc)₂ catalyzed arene alkenylation in the presence of *tert*-butylhydroperoxide and benzoquinone with a reported 1:1:3 *ortho:meta:para* ratio for alkenylation of toluene with ethyl acrylate.^[56] Similarly, with Pd(OAc)₂ as the catalyst precursor, Bäckvall and coworkers reported around a 1:1:2.5 selectivity for reaction of butyl acrylate with toluene using benzoquinone as the direct oxidant and Fe(II) phthalocyanine as a catalyst

to re-oxidize hydroquinone to benzoquinone with dioxygen.^[55] You and coworkers reported Pd(OAc)₂-catalyzed conversion of arenes with electron-deficient olefins using (NH₄)₂S₂O₈ as the oxidant, and observed around a 1.3:1.0:2.9 *ortho:meta:para* ratio for reaction of toluene with methyl acrylate.^[59]

Meta to *para* regioselectivity with quinones was studied with *tert*-butylbenzene as the arene substrate and ethylene as the olefin using 0.112 mM of $[\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4]_2\text{Rh}(\mu\text{-OPiv})_2$ as the catalyst precursor, 240 equiv of quinone (relative to single Rh atom), 70 psig of ethylene and 960 equiv of HOPIV at 170 °C.^[30] Variation of *para*-benzoquinone identity resulted in *meta:para* selectivity between 1.31(2):1 and 1.78(6):1 with no observation of *ortho* product. These ratios did not strongly correlate with quinone oxidizing ability or donor ability of putative Rh-coordinated ligands. In contrast, *meta* selectivity with *ortho*-benzoquinones increased as quinone donor ability increased. Use of *ortho*-chloranil as the oxidant resulted in a *meta:para* of 1.49(4):1, 9,10-phenanthrene dione gave 2.03(7):1 selectivity, 1,2-naphthoquinone 2.0(1):1 and 3,5-di-*tert*-butyl-*ortho*-benzoquinone 2.8(1):1. We attributed this to an *ortho*-chloranil semi-quinone or catecholate ligand forming an electron-deficient Rh complex, which results in a more electrophilic C–H activation process, favoring the *para* position. In contrast to the case

of *ortho*-chloranil, a comparatively electron-rich Rh complex forms upon reaction with 3,5-di-*tert*-butyl-*ortho*-benzoquinone, and a classical concerted metalation-deprotonation could occur, favoring the meta position.^[30]

To provide more definitive evidence for differences in C–H activation mechanism, our group has performed intermolecular competition arene ethenylation experiments with equimolar quantities of toluene and *a,a,a*-trifluorotoluene.^[25,30,43] For Rh catalysis using Cu(II) carboxylates as the oxidant under both anaerobic and aerobic conditions, toluene and *a,a,a*-trifluorotoluene undergo ethenylation at statistically identical rates.^[25,43] In contrast, for catalysis using Pd(OAc)₂ as catalyst precursor, toluene reacts ~10-fold faster than electron-deficient *a,a,a*-trifluorotoluene, strengthening evidence for the C–H activation containing electrophilic character for the Pd-based catalysis.^[25] For Rh catalysis with dioxygen as the oxidant, toluene reacts more rapidly than *a,a,a*-trifluorotoluene, also consistent with its C–H activation step containing at least some electrophilic character. Use of Fe(OAc)₂ under aerobic conditions results in *a,a,a*-trifluorotoluene reacting slightly faster than toluene, which is potentially consistent with a classical concerted metalation-deprotonation, which favors acidic C–H bonds, occurring.^[43] Similarly, with 3,5-di-*tert*-butyl-*ortho*-benzoquinone as the oxidant, *a,a,a*-trifluorotoluene reacts faster than toluene, indicating significant deprotonation character in the C–H activation step. Use of 9,10-phenanthrene dione results in approximately identical rates of toluene and *a,a,a*-trifluorotoluene alkenylation, and *ortho*-chloranil ethenylated toluene faster than *a,a,a*-trifluorotoluene. These results indicate that when coordinated to Rh, *ortho*-quinone ligands can control C–H activation mechanism on a continuum from concerted metalation deprotonations with electrophilic character to those without electrophilic character.^[30,60,61]

Conclusions

Herein, we have overviewed the effect of oxidant identity on catalytic arene alkenylation with a primary focus on our group's studies of Rh-catalyzed arene alkenylation and added discussion of Pd- and Ir-based catalysis. We discussed Cu(II) carboxylates, Fe(III) carboxylates, dioxygen and benzoquinones and their influence on reaction rate and selectivity. Overall, we conclude:

- The rate of styrene production follows the trend Cu(II) > Cu(II)/O₂ > Fe(III)/O₂ = Fe(III) > O₂ for Rh-catalysis. Selectivity for styrene follows the trend O₂ > Cu(II) > Fe(III)/O₂ > Fe(III) > Cu(II)/O₂. In addition, *ortho*-benzoquinones generally give a faster rate of catalysis compared to *para*-benzoquinones.
- For Pd-catalysis with a Cu(II) oxidant, styrene production is increased under aerobic conditions; however selectivity for styrene decreases.
- Linear:branched selectivity follows the trend Cu(II) > Cu(II)/O₂ > O₂ > Fe(III)/O₂ ≈ Fe(III) for Rh-catalysis when using propylene as the olefin. *Ortho*-benzoquinones gave linear:branched selectivities ranging between 2.6:1-4.8:1, while *para*-benzoquinones ranged between 1:1-4:1.
- With Ir-catalysis with a Cu(II) oxidant an increase in linear:branched ratio is observed over time, which we speculate is due to the increase in Cu(II) concentration as the reaction progresses. As a result, Cu(II)-containing hetero multi-metallic complexes are thought to form under the reaction conditions and favor the production of linear alkenyl arenes.
- For Rh-catalyzed alkenylation of mono-substituted arenes, distinct *ortho*/*meta*/*para* regioselectivity is observed as a function of oxidant identity. Cu(II) and Cu(II)/O₂ have sig-

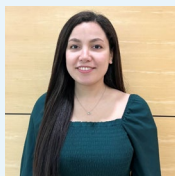
nificantly different regioselectivities, indicating there is a difference in mechanistic pathway and/or catalyst identity. With Pd catalysis, the regioselectivity for alkenylation of substituted olefins is more sensitive to arene substituent than Rh catalysis, and greater *ortho* and *para* functionalization is observed with electron-rich arenes compared to Rh catalysis.

- For mono-substituted arenes, meta selectivity increases as *ortho*-quinone donor ability increases.

References

- [1] H. S. Cho, J. S. Chung, J. H. Han, Y. G. Ko, W. Y. Lee *J. Appl. Polym. Sci.* **1998**, *70*, 1707-1715, [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-4628\(19981128\)70:9<1707::AID-APP8>3.0.CO;2-%23](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-4628(19981128)70:9<1707::AID-APP8>3.0.CO;2-%23).
- [2] L. A. Goj, T. B. Gunnoe, *Curr. Org. Chem.* **2005**, *9*, 671-685, <https://doi.org/10.2174/1385272053765051>.
- [3] J. R. Andreatta, B. A. McKeown, T. B. Gunnoe, *J. Organomet. Chem.* **2011**, *696*, 305-315, <https://doi.org/10.1016/j.jorganchem.2010.09.030>.
- [4] S&P Global Energy, *Chemical Economics Hand-book: Styrene*, S&P Global, New York, **2025**.
- [5] C. Perego, P. Ingallina, *Catal. Today* **2002**, *73*, 3-22, [https://doi.org/10.1016/S0920-5861\(01\)00511-9](https://doi.org/10.1016/S0920-5861(01)00511-9).
- [6] H. X. Fan, A. Rajendran, W. Y. Li, in *Industrial Arene Chemistry: Markets, Technologies, Sustainable Processes and Cases Studies of Aromatic Commodities* (Eds.: J. Mortier), Wiley-VCH, Weinheim, Germany, **2023**, 1293-1325, <https://doi.org/10.1002/9783527827992.ch42>.
- [7] N. A. Foley, J. P. Lee, Z. Ke, T. B. Gunnoe, T. R. Cundari, *Acc. Chem. Res.* **2009**, *42*, 585-597, <https://doi.org/10.1021/ar800183j>.
- [8] W. Zhu, T. B. Gunnoe, *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 6746-6766, <https://doi.org/10.1021/jacs.1c01810>.
- [9] T. B. Gunnoe, W. L. Schinski, X. Jia, W. Zhu, *ACS Catalysis* **2020**, *10*, 14080-14092, <https://doi.org/10.1021/acscatal.0c03494>.
- [10] A. Corma, H. García, *Chem. Rev.* **2003**, *103*, 4307-4366, <https://doi.org/10.1021/cr030680z>.
- [11] A. Kubota, M. H. Emmert, M. S. Sanford, *Org. Lett.* **2012**, *14*, 1760-1763, <https://doi.org/10.1021/ol300281p>.
- [12] B. A. Vaughan, M. S. Webster-Gardiner, T. R. Cundari, T. B. Gunnoe, *Science* **2015**, *348*, 421-424, <https://doi.org/10.1126/science.aaa2260>.
- [13] D. Taube, R. Periana, T. Matsumoto, (Catalytica Advanced Technologies, Inc.), U.S. Patent 6,127,590, **2000**.
- [14] T. Matsumoto, R. A. Periana, D. J. Taube, H. Yoshida, *J. Catal.* **2002**, *206*, 272-280, <https://doi.org/10.1006/jcat.2001.3471>.
- [15] J. Chen, R. J. Nielsen, W. A. Goddard, B. A. McKeown, D. A. Dickie, T. B. Gunnoe, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 17007-17018, <https://doi.org/10.1021/jacs.8b07728>.
- [16] M. S. Webster-Gardiner, J. Chen, B. A. Vaughan, B. A. McKeown, W. Schinski, T. B. Gunnoe, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 5474-5480, <https://doi.org/10.1021/jacs.7b01165>.
- [17] W. Zhu, Z. Luo, Z. J. Chen, C. Liu, L. Yang, D. A. Dickie, N. Liu, S. Zhang, R. J. Davis, T. B. Gunnoe, *ACS Catal.* **2019**, *9*, 7457-7475, <https://doi.org/10.1021/acscatal.9b01480>.
- [18] N. S. Liebov, W. Zhu, J. Chen, M. S. Webster-Gardiner, W. L. Schinski, T. B. Gunnoe, *Organometallics* **2019**, *38*, 3860-3870, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.9b00535>.
- [19] W. Zhu, T. B. Gunnoe, *Acc. Chem. Res.* **2020**, *53*, 920-936, <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.0c00036>.
- [20] X. Jia, L. I. Frye, W. Zhu, S. Gu, T. B. Gunnoe, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 10534-10543, <https://doi.org/10.1021/jacs.0c03935>.

- [21] W. Zhu, T. B. Gunnoe, *ACS Catal.* **2020**, *10*, 11519-11531, <https://doi.org/10.1021/acscatal.0c03439>.
- [22] T. B. Gunnoe, W. L. Schinski, X. Jia, W. Zhu, *ACS Catal.* **2020**, *10*, 14080-14092, <https://doi.org/10.1021/acscatal.0c03494>.
- [23] C. B. Musgrave, W. Zhu, N. Coutard, J. F. Ellena, D. A. Dickie, T. B. Gunnoe, W. A. Goddard, *ACS Catal.* **2021**, *11*, 5688-5702, <https://doi.org/10.1021/acscatal.1c01203>.
- [24] M. T. Bennett, C. W. Reid, C. B. Musgrave, W. A. Goddard, T. B. Gunnoe, *Organometallics* **2023**, *42*, 908-920, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.3c00073>.
- [25] M. T. Bennett, X. Jia, C. B. Musgrave, W. Zhu, W. A. Goddard, T. B. Gunnoe, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 15507-15527, <https://doi.org/10.1021/jacs.3c04295>.
- [26] C. W. Reid, T. B. Gunnoe, *Organometallics* **2024**, *43*, 1362-1376, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.4c00155>.
- [27] M. T. Bennett, K. A. Park, C. B. Musgrave, J. W. Brubaker, D. A. Dickie, W. A. Goddard, T. B. Gunnoe, *ACS Catal.* **2024**, *14*, 10295-10316, <https://doi.org/10.1021/acscatal.4c02355>.
- [28] M. T. Bennett, K. X. Park, T. B. Gunnoe, *Organometallics* **2024**, *43*, 2113-2131, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.4c00327>.
- [29] C. W. Reid, C. Zhang, L. E. Baptiste, K. N. Houk, W. A. Goddard, T. B. Gunnoe, *Organometallics* **2025**, *44*, 2579-2591, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.5c00379>.
- [30] M. T. Bennett, M. Goupalova, C. M. Chapman, D. A. Dickie, T. B. Gunnoe, *Organometallics* **2026**, *45*, 504-515, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.5c00500>.
- [31] H. E. Ketcham, M. T. Bennett, C. W. Reid, T. B. Gunnoe, en *Advances in Organometallic Chemistry*, (Eds.: Pérez, P. J.), Academic Press, Cambridge, **2023**, pp. 93-176.
- [32] B. A. Vaughan, S. K. Khani, J. B. Gary, J. D. Kammert, M. S. Webster-Gardiner, B. A. McKeown, R. J. Davis, T. R. Cundari, T. B. Gunnoe, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 1485-1498, <https://doi.org/10.1021/jacs.6b10658>.
- [33] Z. Luo, C. A. Whitcomb, N. Kaylor, Y. Zhang, S. Zhang, R. J. Davis, T. B. Gunnoe, *ChemCatChem* **2021**, *13*, 260-270, <https://doi.org/10.1002/cctc.202001526>.
- [34] X. Jia, A. M. Foley, C. Liu, B. A. Vaughan, B. A. McKeown, S. Zhang, T. B. Gunnoe, *Organometallics* **2019**, *38*, 3532-3541, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.9b00349>.
- [35] C. B. Musgrave, M. T. Bennett, J. F. Ellena, D. A. Dickie, T. B. Gunnoe, W. A. Goddard, *Organometallics* **2022**, *41*, 1988-2000, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.2c00183>.
- [36] B. A. McKeown, H. E. Gonzalez, M. R. Friedfeld, A. M. Brosnahan, T. B. Gunnoe, T. R. Cundari, M. Sabat, *Organometallics* **2013**, *32*, 2857-2865, <https://doi.org/10.1021/om400306w>.
- [37] B. A. McKeown, H. E. Gonzalez, T. B. Gunnoe, T. R. Cundari, M. Sabat, *ACS Catal.* **2013**, *3*, 1165-1171, <https://doi.org/10.1021/cs400231f>.
- [38] A. M. Brosnahan, A. Talbot, B. A. McKeown, S. E. Kalman, T. B. Gunnoe, D. H. Ess, M. Sabat, *J. Organomet. Chem.* **2015**, *793*, 248-255, <https://doi.org/10.1016/j.jorganchem.2015.03.019>.
- [39] B. A. McKeown, H. E. Gonzalez, T. Michaelos, T. B. Gunnoe, T. R. Cundari, R. H. Crabtree, M. Sabat, *Organometallics* **2013**, *32*, 3903-3913, <https://doi.org/10.1021/om400390e>.
- [40] H. Weissman, X. Song, D. Milstein, *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 337-338, <https://doi.org/10.1021/ja003361n>.
- [41] X. Jia, J. B. Gary, S. Gu, T. R. Cundari, T. R. Gunnoe, *Isr. J. Chem.* **2017**, *57*, 1037-1046, <https://doi.org/10.1002/ijch.201700099>.
- [42] H. Ketcham, W. Zhu, T. B. Gunnoe, *Organometallics* **2024**, *43*, 774-786, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.4c00030>.
- [43] M. T. Bennett, K. A. Park, T. B. Gunnoe, *Organometallics* **2024**, *43*, 2113-2131, <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.4c00327>.
- [44] H. Baumgarth, T. Braun, B. Braun, R. Laubenstein, R. Herrmann, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2015**, 3157-3168, <https://doi.org/10.1002/ejic.201500384>.
- [45] J. Chen, R. J. Nielsen, W. A. Goddard, B. A. McKeown, D. A. Dickie, T. B. Gunnoe, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 17007-17018, <https://doi.org/10.1021/jacs.8b07728>.
- [46] L. Vilella-Arribas, M. García-Melchor, D. Balcells, A. Lledós, J. A. López, S. Sancho, B. E. Villarroya, M. P. del Río, M. A. Ciriano, C. Tejedor, *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 5232-5243, <https://doi.org/10.1002/chem.201605959>.
- [47] A. N. Campbell, S. S. Stahl, *Acc. Chem. Res.* **2012**, *45*, 851-863, <https://doi.org/10.1021/ar2002045>.
- [48] Chemical & Engineering News, *Chem. Eng. News* **1961**, *39*, 52-55, <https://doi.org/10.1021/cen-v039n016.p052>.
- [49] Y. Fujiwara, I. Moritani, S. Danno, R. Asano, S. Teranishi, *J. Am. Chem. Soc.* **1969**, *91*, 7166-7169, <https://doi.org/10.1021/ja01053a047>.
- [50] M. Zhao, B. Helms, E. Slonkina, S. Friedle, D. Lee, J. DuBois, B. Hedman, K. O. Hodgson, J. M. J. Fréchet, S. J. Lippard, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 4352-4363, <https://doi.org/10.1021/ja076817a>.
- [51] M. N. M. Milunovic, L. M. D. R. S. Martins, E. C. B. A. Alegria, A. J. L. Pombeiro, R. Krachler, G. Trettenhahn, C. Turta, S. Shova, V. B.; Arion, *Dalton Trans.* **2013**, *42*, 14388-14401, <https://doi.org/10.1039/C3DT50966D>.
- [52] G. Trettenhahn, M. Nagl, N. Neuwirth, V. B. Arion, W. G. Jary, P. Pöchlauer, W. Schmid, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2006**, *45*, 2794-2798, <https://doi.org/10.1002/anie.200504406>.
- [53] N. Nagarjun, A. Dhakshinamoorthy, *Mol. Catal.* **2019**, *463*, 54-60, <https://doi.org/10.1016/j.mcat.2018.11.012>.
- [54] R. Çelenligil-Çetin, R. J. Staples, P. Stavropoulos, *Inorg. Chem.* **2000**, *39*, 5838-5846, <https://doi.org/10.1021/ic000261>.
- [55] B. P. Babu, X. Meng, J.-E. Bäckvall, *Chem. Eur. J.* **2013**, *19*, 4140-4145, <https://doi.org/10.1002/chem.201300100>.
- [56] C. Jia, W. Lu, T. Kitamura, Y. Fujiwara, *Org. Lett.* **1999**, *1*, 2097-2100, <https://doi.org/10.1021/ol991148u>.
- [57] F. Kong, S. Chen, J. Chen, C. Liu, W. Zhu, D. A. Dickie, W. L. Schinski, S. Zhang, S. D. H. Ess, T. B. Gunnoe, *Sci. Adv.* **2022**, *8*, eadd1594, <https://doi.org/10.1126/sciadv.add1594>.
- [58] X.-Q. Zhu, C.-H. Wang, H. Liang, *J. Org. Chem.* **2010**, *75*, 7240-7257, <https://doi.org/10.1021/jo101455m>.
- [59] Z. She, Y. Shi, Y. Huang, Y. Cheng, F. Song, J. You, *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 13914-13916, <https://doi.org/10.1039/c4cc05827e>.
- [60] S. Kaltenberger, M. van Gemmeren, *Acc. Chem. Res.* **2023**, *56*, 2459-2472, <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.3c00354>.
- [61] L. Wang, B. P. Carrow, *ACS Catal.* **2019**, *9*, 6821-6836, <https://doi.org/10.1021/acscatal.9b01195>.



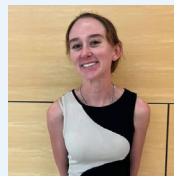
Aida Abdi

Department of Chemistry, University of Virginia, Charlottesville, Virginia, United States

C-e: bfk9nj@virginia.edu

ORCID: 0009-0000-4175-7024

Aida received her B.S. in Applied Chemistry and M.S. in Organic Chemistry from K. N. Toosi University of Technology. She is currently a Ph. D. candidate in Chemistry at the University of Virginia under the supervision of Prof. T. Brent Gunnoe. Her research focuses on organometallic chemistry and homogeneous catalysis, particularly transition-metal-catalyzed C–H activation and oxidative arene alkenylation. Her current work investigates the effects of substrate structure, oxidant identity, and reaction conditions on the reactivity and selectivity of Rh-catalyzed C–H functionalization.



Sophia West

Department of Chemistry, University of Virginia, Charlottesville, Virginia, United States

C-e: usn6kk@virginia.edu

ORCID: 0009-0000-9141-9437

Sophia received her B.S. in chemistry from Emory University in 2024. As an undergraduate, she worked under Dr. Andrey Ivanov studying small molecule inhibitors for the MKK3-MYC protein-protein interaction in triple-negative breast cancer. Sophia joined the Gunnoe group in the fall of 2024, and her research focuses on catalysis for arene alkenylation.



Marc T. Bennet

Department of Chemistry, University of Virginia, Charlottesville, Virginia, United States

C-e: mtb9em@virginia.edu

ORCID: 0000-0002-1449-0923

Marc is a postdoctoral researcher in the Gunnoe group at the University of Virginia. His work is focused on development of homogeneous catalysts based on Rh, Pd, Ir and Ru for the conversion of alkenes and arenes to alkenyl arenes. He obtained his Ph. D. in organometallic chemistry in 2024, also under the mentorship of T. Brent Gunnoe.



T. Brent Gunnoe

Department of Chemistry, University of Virginia, Charlottesville, Virginia, United States

C-e: tbg7h@virginia.edu

ORCID: 0000-0001-5714-3887

Brent is the Commonwealth Professor of Chemistry and Associate Dean for Graduate Education in the College of Arts and Sciences at the University of Virginia. In addition, he serves as Executive Editor for *ACS Catalysis*. His research is focused on molecular organometallic chemistry and homogeneous catalysis. In 2022, he was awarded the ACS George Olah Award in Hydrocarbon or Petroleum Chemistry and in was named a 2025 GEQO Fellow by the Spanish Royal Society of Chemistry. Brent serves on the International Advisory Board for the International Symposium on Homogeneous Catalysis and is the Scientific Program Director for the Organic Reactions Catalysis Society Symposium.

Dispersión, funcionalización química y ensamblaje de los nanotubos de nitruro de boro

Dispersion, chemical functionalization and assembly of boron nitride nanotubes

Ángel A. Martí

Departamento de Química, Rice University, Houston, EE. UU.

PALABRAS CLAVE:

Nanotubos de nitruro de boro
Surfactantes
Reacción de Billups-Birch
Cristales líquidos
Materiales con orden

RESUMEN:

Nanomateriales unidimensionales en el área de la química, como los nanotubos, ofrecen oportunidades excepcionales para numerosas aplicaciones de interés, entre ellas la detección analítica, la catálisis, la remoción de contaminantes y el desarrollo de materiales funcionales. En particular, los nanotubos de nitruro de boro (NTNB) presentan un conjunto de propiedades atractivas, entre las que destacan su elevada fuerza tensil, su extraordinaria estabilidad térmica y química, y una amplia banda prohibida. En esta revisión se resumen las contribuciones de nuestro equipo de investigación colaborativo en el área de la funcionalización covalente y no covalente de los NTNB, su individualización y dispersión en distintos disolventes, así como su organización tanto en disolución como en materiales macroscópicos.

KEYWORDS:

Boron nitride nanotubes
Surfactants
Billups-Birch reaction
Liquid crystals
Ordered materials

ABSTRACT:

One-dimensional nanomaterials, such as nanotubes, provide exceptional opportunities for modern chemical applications, including sensing, catalysis, contaminant removal, and the development of functional materials. In particular, boron nitride nanotubes (BNNTs) exhibit outstanding properties, including high tensile strength, thermal and chemical stability, and a large bandgap. This review highlights the work of our collaborative team on the non-covalent and covalent functionalization of BNNTs, their individualization and dispersion in various solvents, and their organization in both solution and macroscopic materials.

Introducción

El campo de la nanotecnología ha avanzado de manera extraordinaria en los últimos treinta años, dando lugar a una variedad de materiales con dimensiones discretas inferiores a 100 nanómetros. Entre las primeras nanoestructuras estudiadas y caracterizadas en profundidad destacan los clústeres de carbono conocidos como fullerenos,^[1] cuyo descubrimiento dio lugar al Premio Nobel de Química en 1996, el cual fue otorgado a Richard Smalley, Harold Kroto y Robert Curl.^[2] Posteriormente, otras nanoestructuras han emergido, incluyendo las unidimensionales como los nanotubos de carbono (NTC), las bidimensionales, como el grafeno (que puede describirse como una lámina individual de grafito), y las tridimensionales, como el nanodiamante.^[3] Los nanotubos de carbono pueden imaginarse como una lámina de grafito enrollada y unida al otro borde de forma continua hasta formar un tubo.^[4] Estos nanotubos presentan diámetros de unos pocos nanómetros y longitudes con rangos desde unos pocos ángstroms hasta escalas mucho mayores. Sus propiedades son excepcionales, incluyendo una fuerza tensil superior a la del acero, conductividad eléctrica mayor que la del cobre y conductividad térmica superior a la del diamante.^[5-7] Durante las tres últimas décadas, numerosos grupos, incluido el nuestro, han estudiado cómo organizar NTC

para obtener materiales macroscópicos, como películas, fibras, aerogeles y otros sistemas avanzados.^[8]

A pesar de estas propiedades sobresalientes, los NTC presentan una estabilidad térmica y química limitada en determinadas condiciones, sus propiedades dependen del tipo de nanotubo (dictado por la conectividad) y poseen bandas prohibidas relativamente estrechas.^[8,11] El desarrollo de la química de los nanotubos de nitruro de boro (NTNB) ha venido a cubrir esta brecha de propiedades y ampliar nuestra caja de herramientas en ciencia de materiales. Los NTNB poseen una estructura análoga a la de los NTC, pero, en lugar de estar formados exclusivamente por carbono, presentan una red de enlaces alternos boro-nitrógeno (Figura 1).^[12] Dado que el enlace C-C es isoelectrónico con el enlace B-N, existen varios análogos estructurales a los materiales de carbono, como el nitruro de boro cúbico (c-BN), análogo al diamante, y el nitruro de boro hexagonal (h-BN), análogo al grafeno. Sin embargo, aun con similitud estructural, los NTNB muestran propiedades que contrastan con las de los NTC. Entre ellas se incluyen una amplia banda prohibida, la cual es independiente del tipo de nanotubo (el tipo de tubo está dictado por cómo se cierra la lámina de h-BN para formar el tubo y está definido por los índices (n,m) descritos en la Figura 1),^[13] una elevada estabilidad

térmica y química,^[14] y propiedades análogas a las de los NTC, como alta fuerza tensil y elevada conductividad térmica.^[15] Por lo tanto, los NTNБ complementan el repertorio de bloques de construcción de una dimensión al aportar propiedades distintas y, en muchos casos, complementarias a las de los NTC.

En este artículo, presentamos una descripción general de nuestros esfuerzos para purificar, dispersar, funcionalizar y modular las propiedades de los NTNБ. También mostramos cómo estos nanotubos pueden ordenarse en solución para formar cristales líquidos, y cómo dicho orden puede aprovecharse para fabricar materiales en los que los nanotubos están alineados. Esta línea de investigación sobre la caracterización, dispersión, procesamiento y ensamblaje de NTNБ representa un programa conjunto, co-dirigido entre los grupos de investigación de Martí y Pasquali en Rice University y que incluye colaboraciones con científicos como Yeshayahu Talmon (Technion), Cheol Park (NASA Langley), así como asociaciones con compañías como BNNT, LLC.

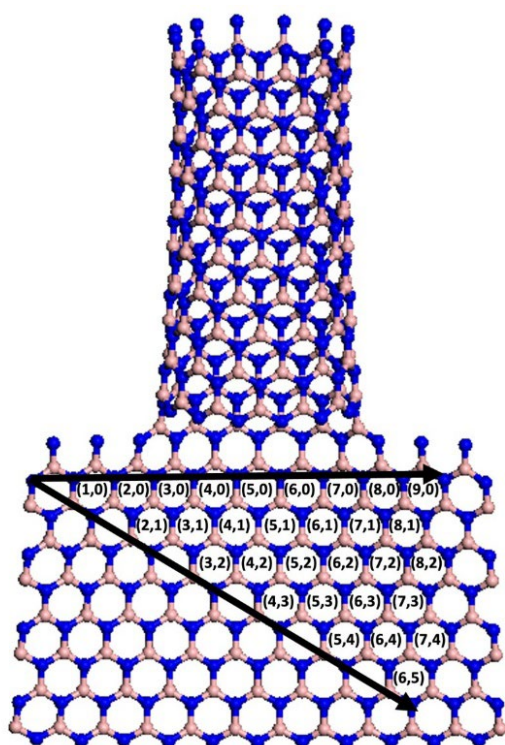


Figura 1. Nanotubo de nitruro de boro (NTNB) e índices (n,m) los cuales definen el tipo de nanotubo.

Purificación

Los NTNБ se han sintetizado mediante diversos métodos, entre ellos, plasma acoplado por inducción de presión extendida, ablación láser, deposición química en fase de vapor, molino de bolas, descarga por arco y síntesis de alta temperatura y presión.^[16,17] Aunque estas metodologías pueden producir NTNБ con distintas relaciones de aspecto, tipos y diámetros, también suelen generar subproductos, como h-BN y capsulas de nitruro de boro. Estos subproductos poseen propiedades similares a las de los NTNБ, lo que dificulta su eliminación o el ataque químico selectivo sin afectar al material tubular deseado. Varios grupos han abordado este problema utilizando técnicas como cromatografía, extracción selectiva y reacciones químicas. Un enfoque especialmente atractivo y escalable consiste en la degradación química selectiva de los materiales no tubulares, pre-

servando los NTNБ. Aunque esta estrategia se ha utilizado con éxito en nanotubos de carbono, la elevada estabilidad química de los NTNБ representa un reto adicional.

Para superar esta dificultad, en colaboración con el grupo de Pasquali, se utilizó vapor de agua a alta temperatura para degradar selectivamente h-BN y los subproductos de boro elemental, obteniendo así un material enriquecido en NTNБ (Figura 2A).^[18] Este método aprovecha la alta concentración de defectos en los bordes de h-BN, las cuales son centros reactivos frente al vapor de agua a alta temperatura, lo que da lugar a productos como ácido bórico y amoníaco, los cuales son fáciles de eliminar. Experimentos a diferentes temperaturas muestran que, a medida que aumenta la temperatura, la proporción de NTNБ aumenta, mientras que el rendimiento total disminuye (Figura 2B). La reacción con vapor de agua a 715 °C provee rendimientos cercanos al 10 %, con impurezas mínimas de nitruro de boro no tubulares.

Recientemente, encontramos que era posible atacar selectivamente otras impurezas, como las nanocápsulas de nitruro de boro, usando ácido fosfórico (Figura 2C).^[19] Las nanocápsulas de nitruro de boro son estructuras con capas concéntricas parecidas a una cebolla que se forman junto con los NTNБ durante la síntesis a alta temperatura y presión. Inspirados por estudios previos del grupo de Tom Mallouk,^[20] en los que se demostró que el ácido fosfórico puede intercalarse en h-BN, inicialmente exploramos el uso de este ácido para separar las nanocápsulas de nitruro de boro de los NTNБ y, posteriormente, segregarlas por densidad. Sin embargo, durante estos experimentos observamos una transformación completa del nitruro de boro en fosfato de boro. Mediante el ajuste de las condiciones de reacción, identificamos parámetros (como el tiempo de reacción) que permitían la descomposición selectiva de las nanocápsulas de nitruro de boro, preservando los NTNБ (Figura 2D). La formación de estructuras esféricas, como las nanocápsulas, requiere la presencia de pentágonos. Debido a la alternancia obligada de átomos de boro y nitrógeno en las estructuras estables de BN, la formación de esferas implica la presencia de defectos que pueden reaccionar preferentemente con el ácido fosfórico. Una disolución acuosa de ácido fosfórico al 25%, con HCl 0,7 M, a 150 °C durante 24 h, permitió el ataque selectivo de las nanocápsulas de nitruro de boro y resultó en rendimientos de NTNБ de hasta el 30%.

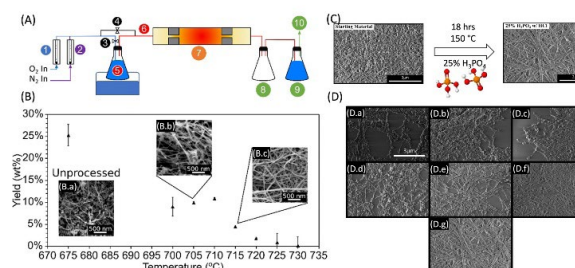


Figura 2. (A) Diagrama esquemático de la purificación de NTNБ con vapor de agua y (B) porcentaje de material restante luego de 24 h de reacción a diferentes temperaturas. Los recuadros (B.a - B.c) muestran imágenes de microscopía electrónica de barrido (SEM) a tres temperaturas representativas. (C) Descomposición selectiva de las nanocápsulas de nitruro de boro. (D) Imágenes de microscopía electrónica de barrido de la reacción de NTNБ con ácido fosfórico a diferentes tiempos de reacción: (D.a) 2 horas, (D.b) 6 horas, (D.c) 12 horas, (D.d) 18 horas, (D.e) 24 horas, (D.f) 30 horas y (D.g) 36 horas. Partes (A) y (B) adaptadas de Ref. [18]. Copyright 2019 con permiso de American Chemical Society. Partes (C) y (D) adaptadas de Ref. [19]. Copyright 2024 con permiso de American Chemical Society.

Dispersión y exfoliación en fases líquidas

La dispersión de NTNB en fase líquida constituye un paso fundamental para la fabricación de materiales, sensores, nanotransistores y muchas otras aplicaciones. Una estrategia popular consiste en emplear moléculas anfífilas, como los surfactantes, que favorezcan la exfoliación del nanomaterial.^[21,22] La parte hidrofóbica del surfactante interactúa con el plano basal del NTNB, mientras que la parte hidrofílica interactúa con las moléculas de agua para estabilizar la dispersión. Dado que los NTNB forman agregados estables debido a fuerzas de van der Waals y a interacciones electrostáticas, se emplean estrategias como la sonicación para deshacer los agregados y facilitar la interacción de los surfactantes con los NTNB. La dispersión de NTNB en solución acuosa se logró en presencia de surfactantes iónicos y no iónicos, los cuales decoran de forma no covalente la superficie de los nanotubos, favoreciendo la dispersión y evitando la reagregación (Figura 3A).^[23] En esta investigación observamos que los surfactantes no iónicos, como el Pluronic 108, resultaron los más eficaces para dispersar NTNB en agua, con una eficacia de dispersión de aproximadamente el 10%. Aunque los surfactantes iónicos, como el bromuro de hexadeciltrimetilamonio (CTAB), proporcionaron rendimientos más bajos, mostraron una mejor individualización de los NTNB, y menor formación de agregados, según se evaluó mediante microscopía de fuerza atómica (AFM). Estos resultados son similares a los obtenidos anteriormente por el grupo de Smalley para los NTC.^[24]

Estudios análogos a los de NTNB con h-BN demuestran que los surfactantes también son eficaces para exfoliar materiales laminares de nitrato de boro.^[22] Para h-BN, los surfactantes Pluronic proporcionaron una mayor efectividad de dispersión, mientras que los surfactantes iónicos favorecieron una mejor individualización y exfoliación.^[25] Curiosamente, también se observó que el h-BN podía dispersarse en agua en ausencia de surfactantes. Sin embargo, la exfoliación sin surfactante era deficiente y producía partículas grandes con escasa delaminación. Concluimos que los bordes de las láminas apiladas en partículas de h-BN, contienen abundantes grupos amino y ácido bórico, los cuales generan una superficie hidrofílica que permite cierta dispersión en agua. No obstante, este mecanismo no es eficaz en monoláminas, en las que las funcionalidades en los bordes resultan insuficientes para estabilizar la nanopartícula laminar en agua.

La difusión de nanomateriales de nitrato de boro dispersados con surfactantes puede estudiarse mediante microscopía de fluorescencia. No obstante, debido a sus amplias bandas prohibidas, los espectros de absorción y emisión de los NTNB y del h-BN quedan fuera del rango operativo de los microscopios convencionales. Para abordar esta limitación, se sintetizaron surfactantes fluorescentes derivados de rodamina B mediante la reacción del dodecanol con el ácido carboxílico de la rodamina B a través de una reacción de esterificación.^[26] Este surfactante fluorescente permitió dispersar y visualizar los NTNB en solución.^[27] Los vídeos de microscopía de fluorescencia mostraron la difusión de varios NTNB mediante movimiento browniano cuando el desplazamiento en el eje z se limitaba a 2 μm (Figura 3B). Esta información se utilizó para determinar la translación del centro de masa en función del tiempo (Figura 3C) y los coeficientes de difusión traslacional (Figura 3D) y rotacional (Figura 3E) en función de la longitud de los nanotubos. Los valores obtenidos concuerdan con los valores teóricos predichos para partículas rígidas con dimensiones cilíndricas.

La dispersión de nanoláminas de h-BN con surfactantes fluorescentes permitió monitorizar su difusión en dos dimensiones utilizando microscopía de fluorescencia.^[28] La difusión traslacional de las nanoláminas de h-BN mostró una dependencia

exponencial con el área de la lámina, lo cual es consistente con la teoría de Kramers. Esto implica que la difusión de láminas requiere superar una energía de activación asociada a sus interacciones con las paredes de la laminilla. Estudios en grafeno muestran una energía de activación similar a la del h-BN, dado que la superficie de ambas láminas está decorada con el mismo surfactante fluorescente.

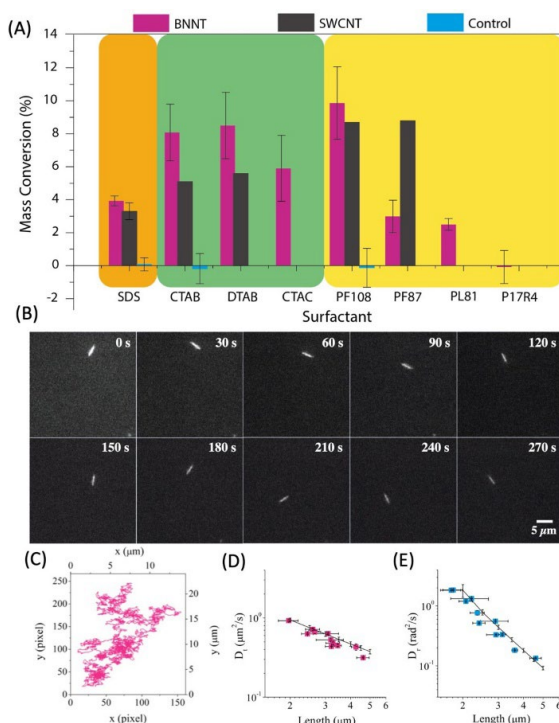


Figura 3. (A) Eficacia de dispersión de los NTNB con varios surfactantes y comparación con NTC (datos de obtenidos de la referencia 23). (B) Imágenes a diferentes tiempos de NTNB dispersados con surfactantes fluorescentes; la difusión en el eje z está confinada a 2 μm . (C) Trayectoria del centro de masa de un NTNB de 3.6 μm de longitud. Difusión (D) traslacional y (E) rotacional de NTNB con diferentes longitudes. La línea sólida representa los valores predichos por la teoría, bajo confinamiento de 2 μm . Parte (A) reproducida de Ref. [23], copyright 2019 con permiso de la Royal Society of Chemistry (a través de Copyright Clearance Center) Partes (B) – (E) adaptadas de Ref. [27], copyright 2020 con permiso de la American Chemical Society.

Funcionalización covalente

La dispersión de NTBB en disolventes orgánicos puede lograrse directamente en medios como N,N-Dimetilacetamida (DMAc) y N,N-dimetilformamida (DMF).^[29] Sin embargo, la cantidad de material dispersado es limitada y la individualización no alcanza la calidad descrita por surfactantes. Una metodología eficaz para mejorar la exfoliación en disolventes orgánicos es la funcionalización covalente, la cual también permite modular las propiedades físicas de los NTNB.

La estabilidad química de los NTNB los hace más difíciles de funcionalizar que los nanotubos de carbono, por lo que su modificación suele requerir métodos químicos más agresivos. Por ejemplo, mediante la reacción de Billups-Birch, hemos demostrado que los NTNB pueden modificarse con grupos alifáticos (Figura 4A).^[30] Esta reacción emplea litio metálico en amoníaco líquido para generar electrones solvatados. Cuando los NTNB y los haluros de alquilo se introducen en esta mezcla, se forman radicales alquílicos que reaccionan con los átomos

de boro en la superficie de los NTNB para producir materiales alquilados. La funcionalización se caracterizó mediante diversas técnicas, incluidas FTIR, XPS, TGA y STEM-EELS. Figura 4B muestra parte de la caracterización gravimétrica, donde se aprecia mayor pérdida de masa en la muestra funcionalizada. Estudios de microscopía electrónica de transmisión de barrido por campo oscuro anular de alto ángulo (HAADF-STEM) y análisis de línea de espectroscopía de pérdida de energía de electrones (STEM-EELS) muestran una mayor presencia de carbono en el exterior del tubo (Figura 4C), lo cual es consistente con la funcionalización externa. Los NTNB modificados químicamente muestran una mayor solubilidad en dodecano y cetano que en agua o en isopropanol. Estudios de AFM muestran que la dispersión de NTNB en estos solventes producen nanotubos individualizados. Además, demostramos que las funcionalidades alquílicas pueden ser removidas mediante un tratamiento térmico a 600 °C sin comprometer su integridad estructural.

También demostramos que el h-BN puede funcionalizarse mediante este procedimiento, y que el grado de funcionalización puede ajustarse variando la relación litio/h-BN (Figura 4D).^[32] No obstante, es importante señalar que debe evitarse por completo el uso de politetrafluoroetileno (PTFE) en barras de agitación.^[31] Las barras de agitación cubiertas con PTFE reaccionan bajo las condiciones de reacción de Billups-Birch. Esto puede llevar a conclusiones erróneas sobre el grado de funcionalización y producir contaminación en las muestras. Este problema se puede evitar utilizando barras agitadoras cubiertas de vidrio.

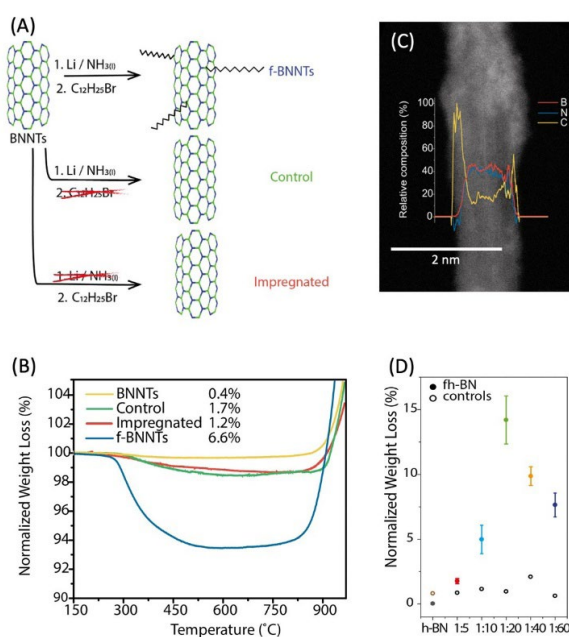


Figura 4. (A) Diagrama que describe la funcionalización de los NTNB (BNNTs en la ilustración) con litio metálico en amoníaco. (B) Análisis de gravimetría termal (TGA) que muestra un contenido de grupos alifáticos de aproximadamente 6,6% en masa. TGAs de los NTNB tratados con litio metálico en amoníaco sin añadir bromuro de alquilo (curva verde) o impregnados con bromuro de alquilo y lavados (curva roja) muestran mínima pérdida de masa. (C) Microscopía electrónica de transmisión de barrido por campo oscuro anular de alto ángulo (HAADF-STEM) y análisis de línea de espectroscopía de pérdida de energía de electrones en STEM (STEM-EELS) para NTNB funcionalizados. (D) Eficiencia de la funcionalización de h-BN con 1-bromododecano en función de la proporción h-BN:litio. Partes (A) – (C) adaptadas de Ref. [30], copyright 2018 con permiso de la American Chemical Society. Parte (D) adaptada de Ref. [31], copyright 2019 con permiso de la American Chemical Society.

Cristales líquidos y materiales

La organización supramolecular de nanotubos en solventes líquidos es esencial para crear materiales macroscópicos con nanotubos alineados. La teoría de Onsager establece que la pérdida en entropía debido a la orientación de los tubos es compensada con un aumento en la entropía por la exclusión de volumen a altas concentraciones de los nanotubos.^[34] Algunos informes iniciales habían sugerido la formación de cristales líquidos de NTNB a concentraciones elevadas, la birrefringencia de esas fases no se había observado mediante microscopía óptica de luz polarizada (*vide infra*).^[34] La pre-organización de estructuras tubulares en cristales líquidos es de importancia para facilitar la producción de materiales macroscópicos con orden a nivel molecular.

La primera demostración clara de fases líquido-cristalinas se logró dispersando NTNB en ácido clorosulfónico (CSA).^[35] El CSA es un superácido, más fuerte que el ácido sulfúrico al 100%, capaz de protonar las paredes de los NTNB. La protonación confiere cargas positivas en la superficie de los nanotubos, lo que induce repulsión electrostática y favorece una exfoliación eficiente en CSA. A medida que aumenta la concentración de NTNB en CSA, los nanotubos se empaquetan de forma más eficiente y reducen su volumen efectivo cuando se orientan en una misma dirección, en comparación con una distribución isotrópica. La formación de cristales líquidos se monitorea mediante microscopía óptica de luz polarizada. Con los polarizadores cruzados, una imagen oscura (ausencia de luz) indica una dispersión isotrópica, sin embargo, una imagen con estructura (birrefringencia) indica la formación de cristales líquidos. Los NTNB disueltos en CSA muestran buena dispersabilidad, exfoliación eficiente y concentraciones elevadas, lo que permite la formación de fases líquido-cristalinas liotrópicas a concentraciones superiores a 170 ppm en masa. La Figura 5A muestra la formación de tactoides, es decir, microgotas de cristal líquido, que se fusionan en dominios líquido-cristalinos continuos tras sonicación (Figura 5B). Estudios más recientes mediante cryo-EM han demostrado que NTNB y CNT pueden mezclarse de forma homogénea en distintas fases, incluidas fases isotrópica y nemáticas líquido-cristalinas. Esta compatibilidad, sin segregación aparente, resulta sorprendente y abre la posibilidad de fabricar materiales híbridos ordenados que contengan diferentes proporciones de NTNB y CNT.^[36]

Las dispersiones acuosas estabilizadas con surfactantes también pueden dar lugar a cristales líquidos. Por ejemplo, utilizamos desoxicolato sódico (SDC) en agua para estabilizar dispersiones de NTNB de hasta un 15% en peso, que mostraban birrefringencia bajo polarizadores cruzados.^[37] Estudios con diferentes concentraciones de SDC y NTNB permitieron construir un diagrama de fases que describe la transición entre (1) una fase isotrópica, sin alineamiento, (2) una fase bifásica, en la que coexisten regiones isotrópica y alineadas, y (3) una fase nemática líquido-cristalina, en la que los NTNB están alineados. Estos resultados fueron confirmados mediante estudios criogénicos usando microscopios electrónicos de barrido (SEM) y de transmisión (TEM). Recientemente utilizamos ultrasonidos de alta frecuencia para producir dispersiones acuosas de NTNB de alta calidad y alta concentración, empleando dodecilsulfato sódico (SDS).^[38] La sonicación genera burbujas de cavitación que colapsan y producen aumentos locales significativos de temperatura y presión, así como diversas especies reactivas de oxígeno. La sonicación de alta frecuencia produce burbujas de cavitación pequeñas y menos agresivas para los nanotubos que otros métodos de sonicación, lo que reduce la generación de defectos, y el corte de los nanotubos. Estas disoluciones se concentraron

por evaporación y dieron lugar a fases nemáticas completas a concentraciones tan bajas como 7 mg/mL (Figura 5 c-d).

Inspirados por el procesamiento en fase líquida de los NTC para fabricar materiales con orden desarrollado en el grupo de Pasquali,^[39,40] utilizamos la preorganización presente en los cristales líquidos de NTNB para producir materiales macroscópicos alineados.^[41] El control de fases líquido-cristalinas puede emplearse para fabricar materiales con NTNB orientados. Por ejemplo, fibras con NTNB alineadas fueron formadas a partir de dispersiones líquido-cristalinas en CSA.^[35] Los cristales líquidos se inyectaron a través de un tubo fino de acero inoxidable, en un baño de agua y se recogieron en un tambor rotatorio de teflón. El flujo a través del tubo de acero inoxidable alineó los dominios líquido-cristalinos en la dirección del flujo, mientras que la inyección en el baño de agua desprotonó los nanotubos, que colapsaron para formar una fibra continua. Estas fibras mostraron alineamiento y una fuerza tensil de 15,7 MPa, con un módulo de Young de 1,46 GPa, en fibras de 27 μm de diámetro. También se han producido películas alineadas de NTNB mediante alineamiento por cizallamiento a partir de dispersiones en CSA y de dispersiones estabilizadas con desoxicolato sódico.^[35,37] Estas películas delgadas muestran cambios en la intensidad de la luz polarizada transmitida al rotar la orientación de la película en el microscopio, con una transmisión máxima a 45°, lo cual es consistente con la teoría. Estos resultados representan avances importantes en la fabricación de materiales macroscópicos alineados.

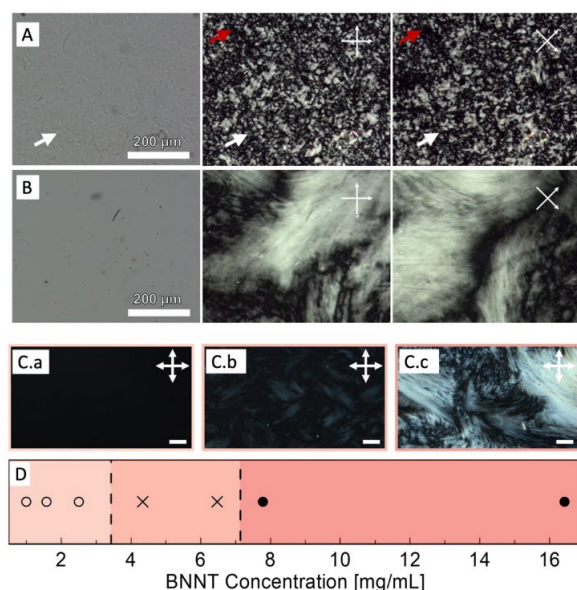


Figura 5. (A) Microscopía de polarizadores cruzados de una dispersión de NTNB en ácido clorosulfónico con concentración de 7260 ppm (por masa); imagen de campo claro (izquierda), imagen con polarizador cruzado (centro), e imagen de polarizador cruzado (rotado a 45°). La flecha indica la presencia de un tactoide. (B) Solución en (A) luego de 5 segundos de exposición a ultrasonido; imagen de campo claro (izquierda), imagen con polarizador cruzado (centro), e imagen de polarizador cruzado (rotado a 45°). (C) Microscopía de polarizadores cruzados de tres dispersiones de NTNB con el surfactante SDS en agua: (C.a) 1 mg/mL – no birrefringencia; (C.b) 4.3 mg/mL – birrefringencia débil; (C.c) 16.5 mg/mL – birrefringencia notable. Barra de escala 100 mm. (D) Diagrama de fases líquido como función de la concentración mostrando las diferentes fases observadas en la microscopía de polarizadores cruzados: O – isotrópica; x – bifásica; • – nemática continua. Partes (A) y (B) adaptadas de Ref. [35], bajo los términos de la licencia CC BY. Partes (C) y (D) reproducidas de Ref. [38], copyright 2018 con permiso de la Royal Society of Chemistry (a través de Copyright Clearance Center).

Además de la investigación descrita anteriormente, hemos participado en diversos proyectos colaborativos que han revelado nuevas aplicaciones de los nanomateriales de nitrato de boro, entre ellas materiales dieléctricos para dispositivos de electroluminiscencia,^[42] magnetismo,^[43,44] materiales híbridos para conversión de energía solar,^[45] y fotodegradación de contaminantes.^[46]

Conclusiones y direcciones futuras

Los materiales tubulares unidimensionales, como los NTC y los NTNB, presentan propiedades útiles para numerosas aplicaciones tecnológicas, entre ellas el desarrollo de materiales ligeros para la fabricación de vehículos terrestres y aeroespaciales, sensores, sistemas de purificación de agua y muchas otras. En particular, los NTNB han venido a complementar las propiedades de los NTC, aportando características particulares como amplias bandas prohibidas, alta resistencia química y térmica, así como una alta fuerza tensil y una excelente conductividad térmica. Nuestro equipo de investigación, integrado por grupos de la Universidad de Rice (Martí y Pasquali), Technion (Talmon), NASA (Park) y NTNB LLC (Scammell), lleva años estudiando estos nanomateriales. Específicamente, hemos estudiado a profundidad la dispersión de NTNB utilizando varios surfactantes, tanto iónicos como no iónicos, así como diferentes estrategias de sonicación, entre ellas la sonicación en baño, con sonda y focalizada. Este tipo de funcionalización no covalente permite dispersar y exfoliar los nanotubos en disolución acuosa con mínimas alteraciones a sus propiedades físicas. Por el contrario, la funcionalización covalente permite incorporar grupos funcionales a la superficie de los NTNB, lo que conlleva modificaciones en sus propiedades químicas y físicas. Igualmente, la dispersión de NTNB en ácido clorosulfónico da lugar a disoluciones altamente concentradas capaces de formar fases líquido-cristalinas. Estas fases pueden alinearse mediante un flujo y luego inyectarse en agua para generar fibras continuas y orientadas. Además, hemos demostrado que surfactantes como el dodecilsulfato sódico y el desoxicolato sódico favorecen la formación de fases líquido-cristalinas.

A pesar de que estos avances están facilitando la incorporación de estos materiales en aplicaciones tecnológicas cada vez más avanzadas, todavía persisten importantes retos por resolver. Por ejemplo, aunque los métodos de purificación disponibles permiten obtener muestras enriquecidas en NTNB con un contenido mínimo de impurezas, durante el proceso se pierde una fracción significativa del material, generalmente sobre el 50%. Además, resulta necesario desarrollar técnicas que permitan purificar grandes cantidades de material de manera ecosostenible. La funcionalización química de los NTNB no solo es esencial para mejorar su dispersabilidad en distintos medios, sino también para incrementar su compatibilidad con otras matrices y facilitar la obtención de materiales compuestos avanzados. Por lo tanto, es necesario seguir desarrollando estrategias que permitan incorporar nuevas funcionalidades químicas, aumentar el rendimiento de las reacciones y controlar de manera precisa el grado de funcionalización. Por otra parte, la organización de los NTNB en materiales macroscópicos sigue siendo un área en desarrollo. La optimización de parámetros como la velocidad de flujo, el disolvente empleado, la velocidad de recogida de la fibra y la temperatura, entre otros, requiere una investigación más exhaustiva. Se espera que una mejor alineación de los NTNB resulte en una mejora significativa de las propiedades de los materiales obtenidos; por otro lado, estas propiedades también dependen de la longitud y del grado de cristalinidad de los nanotubos. En consecuencia, a medida que

avancen las técnicas de síntesis capaces de producir NTN más largos y con menor densidad de defectos, se espera una mejora sustancial en las propiedades de los materiales resultantes. Esperamos que importantes avances en los próximos años permitan ampliar de forma significativa el rango de aplicaciones y propiedades de estos nanomateriales así como su uso en nuevas tecnologías de uso diario.

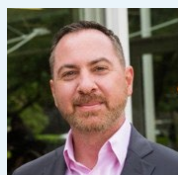
Agradecimientos

Esta investigación ha sido financiada por más de una década por la National Science Foundation (CHE 1610175, CHE-1807737, CHE-2108838, NSF-BSF 2404270), la AFOSR (FA9550-18-1-0014) y la Welch Foundation (C-1668 and C-2152). El autor agradece el apoyo de ChatGPT (OpenAI) en la traducción de ciertos pasajes y términos al español, y en la mejora del estilo del manuscrito. Todo el contenido científico, su interpretación y las conclusiones presentadas son responsabilidad exclusiva del autor.

Bibliografía

- [1] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, *Nature* **1985**, 318, 162, <https://doi.org/10.1038/318162a0>.
- [2] R. F. Curl, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, 36, 1566, <https://doi.org/10.1002/anie.199715661>.
- [3] V. Georgakilas, J. A. Perman, J. Tucek, R. Zboril, *Chem. Rev.* **2015**, 115, 4744, <https://doi.org/10.1021/cr500304f>.
- [4] S. Iijima, *Nature* **1991**, 354, 56, <https://doi.org/10.1038/354056a0>.
- [5] B. G. Demczyk, Y. M. Wang, J. Cumings, M. Hetman, W. Han, A. Zettl, R. O. Ritchie, *Mater. Sci. Eng., A* **2002**, 334, 173, [https://doi.org/10.1016/s0921-5093\(01\)01807-x](https://doi.org/10.1016/s0921-5093(01)01807-x).
- [6] M. Fujii, X. Zhang, H. Xie, H. Ago, K. Takahashi, T. Ikuta, H. Abe, T. Shimizu, *Phys. Rev. Lett.* **2005**, 95, 065502, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.065502>.
- [7] J. Suhr, P. Victor, L. Ci, S. Sreekala, X. Zhang, O. Nalamasu, P. M. Ajayan, *Nat. Nanotechnol.* **2007**, 2, 417, <https://doi.org/10.1038/nnano.2007.186>.
- [8] K. J. Hughes, K. A. Iyer, R. E. Bird, J. Ivanov, S. Banerjee, G. Georges, Q. A. Zhou, *ACS Appl. Nano Mater.* **2024**, 7, 18695, <https://doi.org/10.1021/acsnm.4c02721>.
- [9] N. Manikandan, V. P. Suresh Kumar, S. Siva Murugan, G. Rathis, K. Vishnu Saran, T. K. Shabariganesh, *Mater. Today: Proc.* **2021**, 47, 4682, <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.05.543>.
- [10] C. Jiang, A. Saha, A. A. Martí, *Nanoscale* **2015**, 7, 15037, <https://doi.org/10.1039/c5nr03504j>.
- [11] J.-C. Charlier, X. Blase, S. Roche, *Rev. Mod. Phys.* **2007**, 79, 677, <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.79.677>.
- [12] A. Rubio, J. L. Corkill, M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **1994**, 49, 5081, <https://doi.org/10.1103/physrevb.49.5081>.
- [13] X. Blasé, A. Rubio, S. G. Louie, M. L. Cohen, *Europhys. Lett.* **1994**, 28, 335, <https://doi.org/10.1209/0295-5075/28/5/007>.
- [14] Y. Chen, J. Zou, S. J. Campbell, G. Le Caer, *Appl. Phys. Lett.* **2004**, 84, 2430, <https://doi.org/10.1063/1.1667278>.
- [15] M. B. Jakubinek, K. S. Kim, M. J. Kim, A. A. Martí, M. Pasquali, *J. Mater. Res.* **2022**, 37, 4403, <https://doi.org/10.1557/s43578-022-00841-6>.
- [16] K. S. Kim, M. J. Kim, C. Park, C. C. Fay, S.-H. Chu, C. T. Kingston, B. Simard, *Semicond. Sci. Technol.* **2016**, 32, <https://doi.org/10.1088/0268-1242/32/1/013003>.
- [17] D. Bae, K. H. Lee, M. J. Kim, *Nanoscale* **2024**, 16, 3817, <https://doi.org/10.1039/d3nr06070e>.
- [18] D. M. Marincel, M. Adnan, J. Ma, E. A. Bengio, M. A. Trafford, O. Kleinerman, D. V. Kosynkin, S.-H. Chu, C. Park, S. J. A. Hocker, C. C. Fay, S. Arepalli, A. A. Martí, Y. Talmon, M. Pasquali, *Chem. Mater.* **2019**, 31, 1520, <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.8b03785>.
- [19] K. R. Shumard, J. A. I. Acapulco, M. Pasquali, A. A. Martí, *Chem. Mater.* **2024**, 36, 157, <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.3c01424>.
- [20] N. I. Kovtyukhova, Y. Wang, R. Lv, M. Terrones, V. H. Crespi, T. E. Mallouk, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 8372, <https://doi.org/10.1021/ja403197h>.
- [21] A. D. S. McWilliams, C. Martínez-Jiménez, K. R. Shumard, M. Pasquali, A. A. Martí, *J. Mater. Res.* **2022**, 37, 4459, <https://doi.org/10.1557/s43578-022-00696-x>.
- [22] C. Martínez-Jiménez, A. Chow, A. D. Smith McWilliams, A. A. Martí, *Nanoscale* **2023**, 15, 16836, <https://doi.org/10.1039/d3nr03941b>.
- [23] A. D. Smith McWilliams, C. A. de los Reyes, L. Liberman, S. Ergülen, Y. Talmon, M. Pasquali, A. A. Martí, *Nanoscale Adv.* **2019**, 1, 1096, <https://doi.org/10.1039/c8na00315g>.
- [24] V. C. Moore, M. S. Strano, E. H. Haroz, R. H. Hauge, R. E. Smalley, J. Schmidt, Y. Talmon, *Nano Lett.* **2003**, 3, 1379, <https://doi.org/10.1021/nl034524j>.
- [25] A. D. Smith McWilliams, C. Martínez-Jiménez, A. Matatyaho Ya'akobi, C. J. Ginestra, Y. Talmon, M. Pasquali, A. A. Martí, *ACS Appl. Nano Mater.* **2021**, 4, 142, <https://doi.org/10.1021/acsnm.0c02437>.
- [26] A. D. Smith McWilliams, S. Ergülen, M. M. Ogle, C. A. de los Reyes, M. Pasquali, A. A. Martí, *Pure Appl. Chem.* **2020**, 92, 26, <https://doi.org/10.1515/pac-2019-0219>.
- [27] A. D. Smith McWilliams, Z. Tang, S. Ergülen, C. A. de los Reyes, A. A. Martí, M. Pasquali, *J. Phys. Chem. B* **2020**, 124, 4185, <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c03663>.
- [28] U. Umezaki, A. D. Smith McWilliams, Z. Tang, Z. M. S. He, I. R. Siqueira, S. J. Corr, H. Ryu, A. B. Kolomeisky, M. Pasquali, A. A. Martí, *ACS Nano* **2024**, 18, 2446, <https://doi.org/10.1021/acsnano.3c11053>.
- [29] A. L. Tiano, L. Gibbons, M. Tsui, S. I. Applin, R. Silva, C. Park, C. C. Fay, *Nanoscale* **2016**, 8, 4348, <https://doi.org/10.1039/c5nr08259e>.
- [30] C. A. de los Reyes, K. L. Walz Mitra, A. D. Smith, S. Yazdi, A. Loredó, F. J. Frankovsky, E. Ringe, M. Pasquali, A. A. Martí, *ACS Appl. Nano Mater.* **2018**, 1, 2421, <https://doi.org/10.1021/acsnm.8b00633>.
- [31] C. A. de los Reyes, K. Hernández, C. Martínez-Jiménez, K. L. Walz Mitra, C. Ginestra, A. D. Smith McWilliams, M. Pasquali, A. A. Martí, *J. Phys. Chem. C* **2019**, 123, 19725, <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b05416>.
- [32] C. A. de los Reyes, A. D. Smith McWilliams, K. Hernández, K. L. Walz-Mitra, S. Ergülen, M. Pasquali, A. A. Martí, *ACS Omega* **2019**, 4, 5098, <https://doi.org/10.1021/acsomega.8b03677>.
- [33] L. Onsager, *Ann. N.Y. Acad. Sci.* **2006**, 51, 627, <https://doi.org/10.1111/j.1749-6632.1949.tb27296.x>.
- [34] V. R. Kode, M. E. Thompson, C. McDonald, J. Weicherding, T. D. Dobrila, P. S. Fodor, C. L. Wirth, G. Ao, *ACS Appl. Nano Mater.* **2019**, 2, 2099, <https://doi.org/10.1021/acsnm.9b00088>.
- [35] C. J. Simonsen Ginestra, C. Martínez-Jiménez, A. Matatyaho Ya'akobi, O. S. Dewey, A. D. Smith McWilliams, R. J. Headrick, J. A. Acapulco, L. R. Scammell, M. W. Smith, D. V. Kosynkin, D. M. Marincel, C. Park, S. H. Chu, Y. Talmon, A. A. Martí, M. Pasquali, *Nat. Commun.* **2022**, 13, 3136, <https://doi.org/10.1038/s41467-022-30378-5>.
- [36] A. Matatyaho Ya'akobi, C. J. S. Ginestra, J. F. Khoury, A. A. Martí, M. Pasquali, Y. Talmon, *Langmuir* **2025**, 41, 27737, <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.5c02961>.

- [37] J. F. Khoury, A. Matatyaho Ya'akobi, A. Chow, E. Khabushev, I. Davidovich, D. Cavuto, M. Gong, L. R. Scammell, C. Park, Y. Talmon, A. A. Martí, M. Pasquali, *Langmuir* **2025**, *41*, 15270, <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.5c00563>.
- [38] A. Chow, J. F. Khoury, K. Shumard, C. S. Ginestra, A. B. Sanchez-Alvarado, C. Park, L. R. Scammell, M. Pasquali, A. A. Martí, *Nanoscale* **2026**, *18*, 15107, <https://doi.org/10.1039/d6nr00896h>.
- [39] V. A. Davis, A. N. Parra-Vasquez, M. J. Green, P. K. Rai, N. Behabtu, V. Prieto, R. D. Booker, J. Schmidt, E. Kesselman, W. Zhou, H. Fan, W. W. Adams, R. H. Hauge, J. E. Fischer, Y. Cohen, Y. Talmon, R. E. Smalley, M. Pasquali, *Nat Nanotechnol* **2009**, *4*, 830, <https://doi.org/10.1038/nnano.2009.302>.
- [40] N. Behabtu, C. C. Young, D. E. Tsentlovich, O. Kleinerman, X. Wang, A. W. Ma, E. A. Bengio, R. F. ter Waarbeek, J. J. de Jong, R. E. Hoogerwerf, S. B. Fairchild, J. B. Ferguson, B. Maruyama, J. Kono, Y. Talmon, Y. Cohen, M. J. Otto, M. Pasquali, *Science* **2013**, *339*, 182, <https://doi.org/10.1126/science.1228061>.
- [41] L. W. Taylor, O. S. Dewey, R. J. Headrick, N. Komatsu, N. M. Peraca, G. Wehmeyer, J. Kono, M. Pasquali, *Carbon* **2021**, *171*, 689, <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.07.058>.
- [42] B. K. Gupta, S. Singh, G. Kedawat, Kanika, P. Kumar, A. K. Gangwar, T. N. Narayanan, A. A. Martí, R. Vajtai, P. M. Ajayan, *Nanoscale* **2017**, *9*, 5002, <https://doi.org/10.1039/c6nr09302g>.
- [43] A. L. M. Reddy, B. K. Gupta, T. N. Narayanan, A. A. Martí, P. M. Ajayan, G. C. Walker, *J. Chem. Phys. C* **2012**, *116*, 12803, <https://doi.org/10.1021/jp210597m>.
- [44] S. Radhakrishnan, D. Das, A. Samanta, C. A. de los Reyes, L. Deng, L. B. Alemany, T. K. Weldeghiorghis, V. N. Khabashesku, V. Kochat, Z. Jin, P. M. Sudeep, A. A. Martí, C. W. Chu, A. Roy, C. S. Tiwary, A. K. Singh, P. M. Ajayan, *Sci Adv* **2017**, *3*, e1700842, <https://doi.org/10.1126/sciadv.1700842>.
- [45] S. Radhakrishnan, J. H. Park, R. Neupane, C. A. de los Reyes, P. M. Sudeep, M. Paulose, A. A. Martí, C. S. Tiwary, V. N. Khabashesku, O. K. Varghese, B. A. Kaipparattu, P. M. Ajayan, *Part. Part. Syst. Charact.* **2018**, *36*, <https://doi.org/10.1002/ppsc.201800346>.
- [46] Y. Zhu, Y. Feng, Y. Yan, Z. Wang, X. Zhang, S. Faraji, Q. Ai, T. Xie, X. Weng, L. Zhou, T. Zhai, Y. Liu, X. Huang, C.-y. Lin, S. Glass, B. Shin, Y. Han, A. A. Martí, P. M. Ajayan, M. Liu, Q. Li, J. Lou, *Mater. Today* **2025**, *91*, 253, <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2025.11.004>.



Ángel A. Martí

Departamento de Química, Rice University,
Houston, TX 77005 EE. UU.

C-e: amarti@rice.edu

ORCID: 0000-0003-0837-9855

Ángel A. Martí ocupa la Cátedra Harry C. & Olga K. Wiess en Química y es director del Departamento de Química de Rice University. Obtuvo su doctorado en la Universidad de Puerto Rico, Río Piedras, y realizó estudios posdoctorales en la Columbia University en Nueva York. Desde 2008 desarrolla investigaciones en fotoquímica aplicadas a la agregación de proteínas, la temperatura celular y los nanomateriales. Es autor de más de 140 publicaciones y ha recibido numerosos reconocimientos. Es Fellow de la Royal Society of Chemistry, la American Chemical Society y la American Association for the Advancement of Science.

El yin y el yang de la química monoelectrónica del níquel

The yin and yang of nickel's single electron chemistry

Ana Bahamonde

Departamento de Química, Universidad de California Riverside, Riverside, California, EE. UU.

PALABRAS CLAVE:

Níquel
Mecanismos de reacción
Catálisis
Química organometálica

RESUMEN:

La excepcional versatilidad del níquel reside en su capacidad para acceder a múltiples estados de oxidación y participar en procesos de uno y dos electrones; sin embargo, esto también complica la interpretación de sus mecanismos. En esta perspectiva analizamos la formación de enlaces $C(sp^2)$ -heteroátomo y el acoplamiento cruzado electrofílico $C(sp^2)$ - $C(sp^3)$, ambas catalizadas por níquel. Aunque estas reacciones se utilizan ampliamente, sus mecanismos siguen siendo objeto de debate. Destacamos cómo el ligando, el reductor y la identidad del nucleófilo pueden alterar la vía catalítica dominante. Este análisis enfatiza que comprender la divergencia mecanística no es un asunto académico, sino que impacta directamente la reactividad, la selectividad y el diseño de catalizadores, siendo crucial para el desarrollo de futuras transformaciones.

KEYWORDS:

Nickel
Reaction mechanisms
Catalysis
Organometallic chemistry

ABSTRACT:

Nickel's exceptional versatility is linked to its capacity to access multiple oxidation states and to participate in both single- and two-electron processes, but this also complicates mechanistic understanding. Here, we present a mechanistic overview of two classes of nickel-catalyzed transformations: $C(sp^2)$ -heteroatom bond formation and cross-electrophile $C(sp^2)$ - $C(sp^3)$ coupling. While both reaction families are widely used, their underlying mechanisms remain actively debated with competing proposals often invoked. We highlight how factors such as ligand environment, reductant strength, and nucleophile identity can shift the dominant catalytic pathway. This perspective emphasizes that understanding mechanistic divergence is not merely an academic issue but one that directly impacts reactivity, selectivity, and catalyst design, and will be crucial for achieving predictive control in nickel-catalyzed transformations.

Introducción

El uso de catalizadores de níquel ha experimentado un resurgimiento en las últimas dos décadas en paralelo al reconocimiento de la utilidad sintética de las reacciones catalizadas por este metal.^[1-4] La reactividad que facilita el uso de catalizadores de níquel de hecho, sobrepasa las reacciones accesibles cuando utilizamos sus compañeros del grupo 10, paladio o platino. Una distinción clave entre el níquel y el paladio radica en la capacidad única del níquel para participar tanto en procesos de uno como de dos electrones. Este comportamiento es característico de la mayoría de los metales de transición de la primera fila y, entre otras razones, surge de las menores separaciones de campo ligando en comparación con los metales de segunda y tercera fila, que generalmente están restringidos a química de dos electrones debido a mayores separaciones de campo ligando.

Esta diferencia permite que el níquel no solo facilite transformaciones análogas a las posibles para el paladio, sino también acceder a nuevos patrones de reactividad, incluidos modos de acoplamiento alternativos y mecanismos de reacción que no están disponibles para metales de transición más pesados. Junto con la mayor abundancia natural de los metales de transición de

primera fila en comparación con sus contrapartes de segunda y tercera fila, estas características hacen que el desarrollo de reacciones catalizadas por níquel sea particularmente atractivo.

Desafortunadamente, la flexibilidad redox del níquel, que le permite acceder fácilmente a estados de oxidación desde Ni(0) hasta Ni(III), también presenta desafíos. Si bien abre la puerta a una reactividad novedosa, complica la comprensión y estudio de los mecanismos de reacción, lo que a menudo conduce a interpretaciones contrapuestas o controvertidas.^[3-5] De esta manera, las cualidades del níquel reflejan una dualidad similar a la del Yin y el Yang: su habilidad para adoptar múltiples estados de oxidación es, simultáneamente, su mayor virtud y su mayor limitación.

Esta perspectiva expone ejemplos de reacciones químicas muy similares en las que se han propuesto mecanismos de reacción distintos y cómo cambios sutiles en las condiciones de reacción pueden dar lugar a cambios en el mecanismo. Ilustramos estos conceptos mediante dos ejemplos: un acoplamiento cruzado entre haluros de arilo y heteroátomos y un acoplamiento cruzado $C(sp^2)$ - $C(sp^3)$ entre electrófilos. El objetivo de esta perspectiva es fomentar una mayor investigación sobre los fundamentos mecanísticos de estas transformaciones, en última

instancia permitiendo un desarrollo más racional y predictivo de las reacciones catalizadas por níquel.

Reacciones de acoplamiento cruzado entre $C(sp^2)$ y heteroátomos facilitados por luz visible

El níquel puede mediar el acoplamiento de haluros de arilo y vinilo a través de reacciones térmicas que recuerdan la aminación de Buchwald–Hartwig catalizada por paladio.^[6,7] Estos procesos utilizan tanto ligandos fosfina como carbenos *N*-heterocíclicos (NHC) y suelen proceder mediante un ciclo catalítico Ni(0)/Ni(II). El paso lento en estas reacciones es la formación del enlace $C(sp^2)$ –heteroátomo, que ocurre a través de una eliminación reductora desde un intermedio de Ni(III). Al igual que en la química correspondiente del Pd, la formación de estos enlaces a menudo requiere temperaturas elevadas y bases fuertes, particularmente cuando se utilizan nucleófilos menos reactivos.

En contraste, el grupo de Hillhouse demostró que estas eliminaciones reductoras, que requieren temperaturas altas cuando utilizamos Ni(II), pueden ocurrir rápidamente a temperatura ambiente cuando se accede a intermedios de níquel en estados de oxidación más altos, como Ni(III).^[8,9] Estos estudios estequiométricos iniciales sirvieron como punto de partida para que el grupo de Johannes y una colaboración entre los laboratorios de MacMillan y Buchwald,^[10-12] demostraran años más tarde de forma independiente que similares complejos de Ni(III), capaces de acelerar la eliminación reductora, pueden generarse en condiciones catalíticas. Para ello, estos grupos desarrollaron sistemas que usan conjuntamente catalizadores de níquel y fotocatalizadores de iridio. Estos avances establecieron un nuevo campo en el que el uso de los complejos de iridio y luz visible permite acceder a estados de oxidación impares del níquel que facilitan la formación de enlaces $C(sp^2)$ –heteroátomo a temperatura ambiente. Estos sistemas emplean predominantemente ligandos bipyridina y se han aplicado con éxito al acoplamiento de una amplia gama de reactivos incluyendo nucleófilos de nitrógeno, oxígeno y azufre.^[6,13]

Sucesivamente, estudios mecanísticos publicados por los grupos de Nocera y MacMillan propusieron que estas reacciones operan a través de un ciclo catalítico Ni(I)/Ni(III) (Figura 1a).^[14,15] Estos procesos son análogos a las reacciones de cadena radicalaria en los que el fotocatalizador actúa como iniciador de la cadena radicalaria (ciclo catalítico en este caso) y no está involucrado en cada ciclo. En este mecanismo, el fotocatalizador reduce complejos de Ni(III) que se encuentran fuera del ciclo catalítico para generar un complejo reactivo de Ni(I) (**1**), que empieza en el ciclo catalítico. En el mecanismo propuesto por Nocera, el complejo Ni(I) sufre una adición oxidante con el haluro de arilo para generar un intermedio Ni(III) (**1** → **2**). A continuación, sustitución de uno de los haluros por el nucleófilo forma el complejo de Ni(III) (**3**) que contiene ambos sustratos del acoplamiento. Este intermedio es muy inestable y rápidamente sufre una eliminación reductora que forma el enlace $C(sp^2)$ –heteroátomo.^[14]

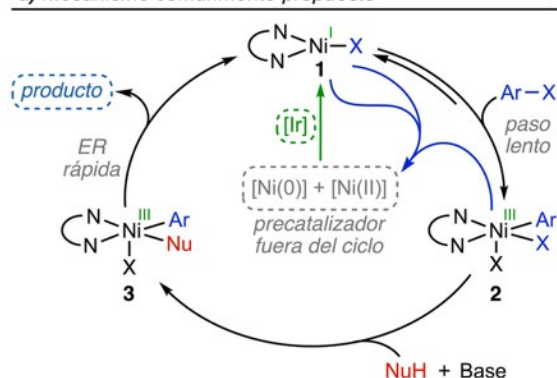
La clave de esta química reside en que la luz y el fotocatalizador permiten generar y regenerar las especies de níquel que participan en el ciclo catalítico. Los estados de valencia impar (Ni(I) y Ni(III)) conducen a la formación de producto, pero también son intrínsecamente inestables y tienden a decaer hacia los estados más estables de Ni(0) y Ni(II) mediante procesos de comproporciónación y desproporciónación (flechas azules). Esto provoca la continua desactivación del sistema, representada en el centro de la figura como “[Ni(0)] + [Ni(II)]”. Por ello, aunque el fotocatalizador teóricamente solo sería necesario

inicialmente para activar los precatalizadores de níquel (generalmente sales de Ni(II)), la irradiación constante es necesaria para regenerar las especies activas y compensar la continua formación de Ni(II) durante la reacción.

Para el desarrollo de esta química fue fundamental identificar fotocatalizadores cuyos potenciales redox estuvieran alineados con los de los complejos de Ni(II) (que deben ser reducidos para iniciar el ciclo catalítico) pero sin interferir con el resto de las etapas del proceso. Los complejos de Ir han sido los fotocatalizadores más utilizados para este propósito; sin embargo, también se han desarrollado estrategias basadas en fotocatalizadores más económicos, incluyendo compuestos orgánicos y otros fotocatalizadores organometálicos.^[16] Además de estos métodos fotoquímicos, el grupo de Nocera demostró que la generación de las especies activas de níquel puede lograrse mediante el empleo de reductores estequiométricos,^[17] mientras que el grupo de Baran desarrolló una estrategia electroquímica para promover la formación de los complejos de Ni(I) y Ni(III).^[18,19]

Si bien este mecanismo Ni(I)/Ni(III) es ampliamente aceptado,^[6,20] nuestro laboratorio ha demostrado que escenarios mecanísticos alternativos también son viables (Figura 1b). En particular, hemos mostrado que la especie inicial de Ni(I) (**1**) puede primero interactuar con el nucleófilo para formar un complejo alternativo de Ni(I) (**4**), que posteriormente sufre adición oxidante con el haluro de arilo.^[21] Esta vía se estableció estudiando reacciones con nucleófilos de indol, pero podría ser más general, dada la inestabilidad de intermedios de Ni(III) como **2**. De acuerdo con la propuesta de Nocera,^[14] estos complejos de Ni(III) deberían favorecer un cambio de ligando que ocurre mediante un proceso bimolecular (**2** + NuH → **3**) en lugar de eliminación reductora unimolecular (**2** → **1**) en cada ciclo catalítico para permitir la catálisis. En contraste, las especies Ni(I) propuestas en nuestro mecanismo alternativo son más es-

a) Mecanismo comúnmente propuesto



b) Mecanismo alternativo

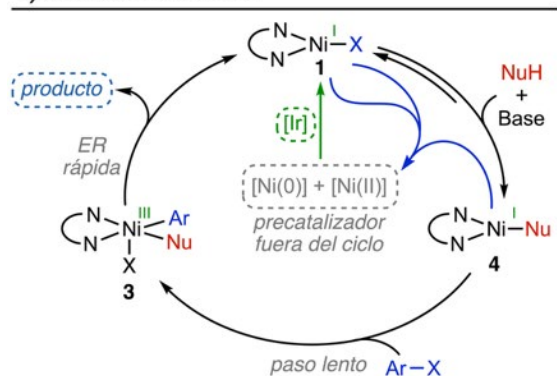


Figura 1. Mecanismos propuestos para el acoplamiento cruzado de haluros de arilo y heteroátomos. ArX = haluro de arilo, NuH = nucleófilo y ER = eliminación reductora.

tables termodinámica y cinéticamente,^[22] lo que potencialmente permite una persistencia suficiente para facilitar los pasos bimoleculares como la adición oxidante (**4** → **3**), que típicamente es el paso determinante de la velocidad en estas reacciones.

Distinguir si estas reacciones proceden a través del mecanismo representado en la Figura 1a o 1b es crucial, ya que cada vía implica un intermedio distinto como responsable del paso de adición oxidante que es el determinante de la velocidad: el complejo Ni(I) **1** o el complejo Ni(II) **4**, respectivamente. Esta distinción tiene implicaciones directas para el diseño de catalizadores y la optimización de la reacción. Por ejemplo, los esfuerzos dirigidos a reducir la carga de catalizador o a mejorar la frecuencia de recambio catalítico requerirían optimizar propiedades fundamentalmente distintas dependiendo de qué complejo controla el paso lento, ya sea ajustando la reactividad de un ciclo "clásico" de adición oxidante por el complejo de Ni(I) (**1**) o, alternativamente, optimizando un intermedio de Ni(II) ligado al nucleófilo (**4**) que precede a la adición oxidante.

Efecto del nucleófilo en el mecanismo de la reacción

El mecanismo propuesto por Nocera también sugiere que la velocidad de reacción y la eficiencia deberían ser en gran medida independientes de la identidad del nucleófilo, dado que éste se introduce únicamente después del paso de adición oxidante.^[14] En contraste, el mecanismo propuesto por nuestro laboratorio predice una fuerte dependencia de la estructura y capacidad de coordinación del nucleófilo, ya que éste se involucra tempranamente y actúa como ligando del níquel en la especie que sufre la adición oxidante determinante de la velocidad de reacción.^[21] Bajo este modelo, variaciones en la electrónica, el impedimento estérico y la capacidad de coordinación del nucleófilo podrían influir significativamente tanto en la estabilidad del intermedio Ni(II) como en la barrera de adición oxidante, impactando directamente la velocidad de reacción y los substratos que se pueden utilizar en estos acoplamientos.

En este contexto, nuestro laboratorio ha demostrado que cuando se emplean amidas como nucleófilos, el mecanismo de estas transformaciones cambia por completo (Figura 2).^[23] Bajo estas condiciones, en lugar de seguir cualquiera de las vías descritas previamente (Figura 1), no hay complejos de Ni(II) que contribuyan a la formación del producto. En su lugar, la formación del complejo clave de Ni(III) (**3b'**) se obtiene a través

de la oxidación de un intermedio de Ni(II) (**5**), dando lugar en conjunto a un ciclo catalítico alternativo Ni(0)/Ni(II)/Ni(III).

Además de evidenciar cómo la naturaleza del nucleófilo puede dictar el mecanismo de estas reacciones, resulta particularmente sorprendente que, a pesar de la similitud casi idéntica en los valores de pKa entre amidas e indoles (ambos sistemas estudiados por nuestro laboratorio),^[21,23] la *N*-arilación de estos dos tipos de nucleófilos proceda mediante rutas mecanísticas distintas. Cómo cambios tan pequeños en el sustrato pueden influir de manera tan drástica en el mecanismo de reacción es una pregunta que aún no tiene respuesta.

Reacciones de acoplamiento cruzado entre dos electrófilos

Como segundo ejemplo que ilustra tanto el potencial como los desafíos asociados a la multiplicidad de estados de oxidación accesibles para los catalizadores de Ni, nos centramos en las reacciones de acoplamiento cruzado entre electrófilos. Estas transformaciones, popularizadas por el grupo de Weix, se han convertido rápidamente en herramientas valiosas tanto en laboratorios académicos como industriales, ya que permiten la síntesis eficiente de una amplia variedad de productos a partir de materiales de partida simples.^[24-26]

A diferencia de los acoplamientos cruzados tradicionales catalizados por Pd, estos métodos emplean dos electrófilos y proporcionan el producto de acoplamiento bajo condiciones reductoras. De esta manera, se pueden sintetizar productos similares sin necesidad de emplear reactivos organometálicos, como los ácidos borónicos o los reactivos de Grignard. Esto no sólo reduce el costo, sino que además evita un paso adicional, ya que dichos reactivos se suelen preparar a partir de haluros de arilo.

Estas reacciones se han extendido más allá de la formación de enlaces C(sp²)-C(sp²) e incluyen acoplamientos más difíciles como la formación de enlaces C(sp²)-C(sp³) e incluso C(sp³)-C(sp³). En esta sección, nos centramos en dos mecanismos comúnmente propuestos para los acoplamientos C(sp²)-C(sp³), que pueden transcurrir tanto de manera racémica como enantioenriquecida, siendo esta última generalmente lograda mediante el uso de ligandos derivados de oxazolina.^[24-28]

En contraste con el ejemplo anterior, donde la gran mayoría de las propuestas mecanísticas coinciden en la predominancia de vías Ni(II)/Ni(III) (Figura 1a), en estas reacciones el consenso es significativamente menor. Esto se debe en gran medida al mayor número de posibilidades mecanísticas que pueden explicar razonablemente a la formación del producto. No obstante, una característica común entre las distintas propuestas es que el paso de eliminación reductora tiene lugar desde un complejo de Ni(III) (**9**) (Figura 3). Esto es análogo a la química discutida previamente, en la cual el paso crítico de formación del enlace C(sp²)-heteroátomo también ocurre en el estado de oxidación Ni(III). El acceso a estados de oxidación más altos para facilitar eliminaciones reductoras no es una estrategia limitada a los catalizadores de níquel sino que es general para toda la química organometálica. Los metales en estados de oxidación más altos son más pobres en electrones lo que les hace ser más propensos a ser reducidos y, por lo tanto, a experimentar eliminaciones reductoras más fácilmente.

Además de los dos mecanismos discutidos aquí, también se han propuesto rutas alternativas que sugieren transmetalaciones entre dos complejos de níquel.^[3,20,24-26] Sin embargo, estas propuestas son menos comunes, por lo que en esta discusión nos centraremos en las dos vías mostradas en la Figura 3. Por simplicidad, la formación del radical alquilo se omite tanto en la figura como en la discusión. Existen múltiples estrategias para

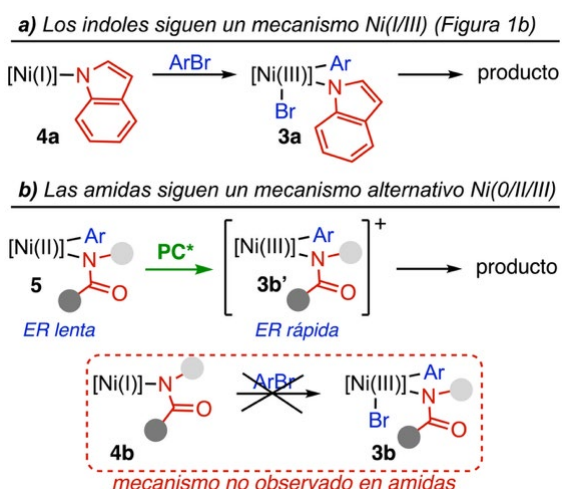


Figura 2. Mecanismos propuestos para el acoplamiento cruzado de haluros de arilo e indoles o amidas. ArBr = bromuro de arilo y ER = eliminación reductora. PC* = fotocatalizador excitado.

generar estos intermedios que han sido ampliamente explorados dependiendo del tipo de acoplamiento específico que se quiera obtener.^[24-26]

Actualmente el mecanismo más ampliamente aceptado es la propuesta delineada en la Figura 3a donde la reacción se inicia mediante la adición oxidante de una especie de Ni(I) al haluro de arilo o alqueno, dando lugar a un complejo de Ni(III) (**7**).^[27, 29-30] A continuación, este intermedio es reducido para formar el complejo de Ni(II) **8**, que es más estable. Dicha reducción puede realizarse usando un agente reductor externo o mediante comproporción con especies de Ni(I) presentes en la disolución. El intermedio de Ni(II) resultante, que porta el fragmento C(sp²), es lo suficientemente estable como para acumularse en la disolución y atrapar el radical de alquilo que es generado a partir de la activación del segundo electrófilo (el fragmento C(sp³)). Este paso conduce a la formación de un complejo de Ni(III) que contiene ambos fragmentos del acoplamiento (**9**); el cual, como se ha discutido anteriormente, fácilmente experimenta una eliminación reductora para dar el producto deseado y regenerar el catalizador activo.

El mecanismo alternativo mostrado en la Figura 3b,^[28, 31] comienza con un complejo de Ni(0) (**10**) que fácilmente reacciona con el haluro de arilo o alqueno para dar el complejo de Ni(II) **8**, un intermedio común a ambos ciclos. Al igual que antes, en este punto se propone que el radical alquilo es atrapado para formar una especie de Ni(III) (**9**), lo que finalmente conduce a la formación del producto (**8** → **9** → **6**).

La principal discrepancia con la propuesta anterior radica en la necesidad de reducir el complejo de Ni(II) resultante (**6**) de nuevo a Ni(0) para reiniciar el ciclo catalítico. Dependiendo de la reacción específica, este Ni(II) puede también estar implicado en la activación del haluro de alquilo, pero eventualmente, en todos los casos de reacciones que siguen este mecanismo una especie de níquel en un estado de oxidación superior debe reducirse de nuevo a Ni(0) para que esta vía sea operativa.

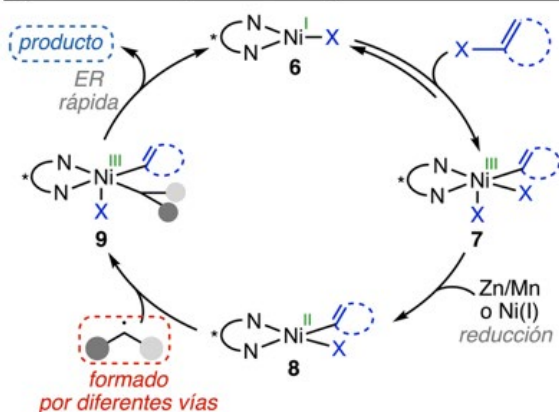
Esta reducción para reformar complejos de Ni(0) sigue siendo objeto de debate. Específicamente, la capacidad de los reductores para llevar a cabo esta transformación depende tanto del propio reductor como del ligando del Ni, y aún no está claro si reductores como Zn o Mn son lo suficientemente enérgicos para lograrla. En reacciones con reductores más potentes, típicamente fotocatalizadores, esta propuesta mecanística es más prevalente y más generalmente aceptada.

Comprender cuándo cada uno de estos mecanismos es operativo tiene múltiples consecuencias. En primer lugar, permite determinar si el mecanismo de reacción depende únicamente del reductor. En segundo lugar, averiguar las razones que llevan a esta química a tomar distintas vías nos puede ayudar a esclarecer en qué situaciones resulta deseable cada escenario y cómo cada vía influye en la reactividad. Es perfectamente posible que el primer mecanismo (Figura 3a) sea óptimo para un sistema de acoplamiento determinado, mientras que el alternativo (Figura 3b) resulte más ventajoso con diferentes electrófilos. En la actualidad, el punto en el que ocurre este cambio sigue sin estar claro, debería preferirse un mecanismo sobre el otro, un conocimiento al que deberíamos aspirar.

Conclusiones

Los ejemplos discutidos aquí ilustran tanto el poder como la complejidad mecanística aún no resuelta de las transformaciones catalizadas por níquel. Éstas y otras transformaciones sitúan la catálisis de níquel en la intersección entre oportunidad y complejidad. Su capacidad para acceder a múltiples estados de oxidación permite una reactividad que va más allá de los

a) Mecanismo empezando en Ni(I)



b) Mecanismo empezando en Ni(0)

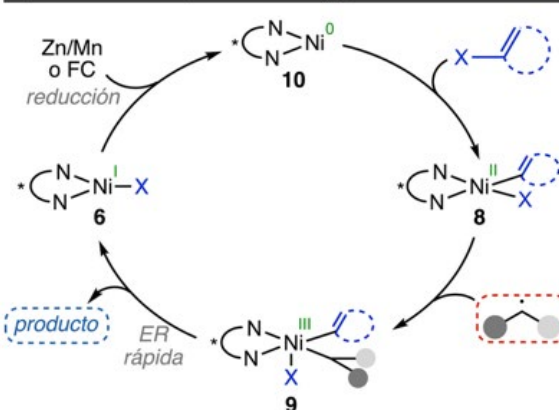


Figura 3. Mecanismos simplificados propuestos para el acoplamiento cruzado asimétrico de electrófilos que forma enlaces C(sp²)-C(sp³). FC = fotocatalizador y ER = eliminación reductora.

paradigmas clásicos de acoplamiento cruzado; sin embargo, esta misma característica da lugar a la competición entre distintas vías mecanísticas.

En las reacciones de acoplamiento C(sp²)-heteroátomo y el acoplamiento cruzado electrófilo C(sp²)-C(sp³), resulta evidente que no existe un único marco mecanístico universalmente aplicable. En su lugar, la vía operativa es muy sensible a cambios sutiles en los parámetros de reacción, incluyendo la identidad del ligando, la fuerza del reductor y la estructura del sustrato, factores que pueden favorecer que el sistema prefiera distintos estados de oxidación.

La importancia de entender esta divergencia mecanística no es simplemente una curiosidad sino que tiene consecuencias directas sobre el rendimiento catalítico. Resolver estas cuestiones requerirá una combinación de enfoques experimentales y computacionales capaces de capturar intermedios transitorios bajo condiciones catalíticas. En última instancia, el establecimiento de relaciones claras entre la estructura y el mecanismo será clave para avanzar la catálisis de níquel desde un desarrollo empírico hacia un diseño racional y predictivo.

Bibliografía

- [1] C. Vila, *Chem. Cat. Chem.* **2015**, 7, 1790-1793, <https://doi.org/10.1002/cctc.201500258>.
- [2] S. Z. Tasker, E. A. Standley, T. F. Jamison, *Nature* **2014**, 509, 299-309, <https://doi.org/10.1038/nature13274>.
- [3] J. B. Diccianni, T. Diaio, *Trends Chem.* **2019**, 1, 830-844,

- <https://doi.org/10.1016/j.trechm.2019.08.004>.
- [4] V. P. Ananikov, *ACS Catal.* **2015**, 5, 1964-1971, <https://doi.org/10.1021/acscatal.5b00072>.
 - [5] P. Sabatier, *Catalysis in organic chemistry*, D. Van Nostrand Company, New York, **1922**.
 - [6] O. R. Taylor, P. J. Saucedo, A. Bahamonde, *J. Org. Chem.* **2024**, 89, 16093-16105, <https://doi.org/10.1021/acs.joc.3c02353>.
 - [7] C. M. Lavoie, P. M. MacQueen, N. L. Rotta-Loria, R. S. Sawatzky, A. Borzenko, A. J. Chisholm, B. K. Hargreaves, R. McDonald, M. J. Ferguson, M. Stradiotto, *Nat. Comm.* **2016**, 7, 11073, <https://doi.org/10.1038/ncomms11073>.
 - [8] K. Koo, G. L. Hillhouse, *Organometallics* **1995**, 14, 4421-4423, <https://doi.org/10.1021/om00009a054>.
 - [9] R. Han, G. L. Hillhouse, *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, 119, 8135-8136, <https://doi.org/10.1021/ja9714999>.
 - [10] M. S. Oderinde, N. H. Jones, A. Juneau, M. Frenette, B. Aquila, S. Tentarelli, D. W. Robbins, J. W. Johannes, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, 55, 13219-13223, <https://doi.org/10.1002/anie.201604429>.
 - [11] E. B. Corcoran, M. T. Pirnot, S. Lin, S. D. Dreher, D. A. DiRocco, I. W. Davies, S. L. Buchwald, D. W. C. MacMillan, *Science* **2016**, 353, 279-283, <https://doi.org/10.1126/science.aag0209>.
 - [12] J. A. Terrett, J. D. Cuthbertson, V. W. Shurtleff, D. W. MacMillan, *Nature* **2015**, 524, 330-334, <https://doi.org/10.1038/nature14875>.
 - [13] C. Zhu, H. Yue, J. Jia, M. Rueping, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 17810-17831, <https://doi.org/10.1002/anie.202013852>.
 - [14] R. Sun, Y. Qin, S. Rucolo, C. Schnedermann, C. Costentin, D. G. Nocera, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 89-93, <https://doi.org/10.1021/jacs.8b11262>.
 - [15] N. A. Till, L. Tian, Z. Dong, G. D. Scholes, D. W. MacMillan, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, 142, 15830-15841, <https://doi.org/10.1021/jacs.0c05901>.
 - [16] T. J. Megna, A. Bahamonde, *Trends Chem.* **2025**, 7, 637-639, <https://doi.org/10.1016/j.trechm.2025.08.003>.
 - [17] R. Sun, Y. Qin, D. G. Nocera, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 9527-9533, <https://doi.org/10.1002/anie.201916398>.
 - [18] Y. Kawamata, J. C. Vantourout, D. P. Hickey, P. Bai, L. Chen, Q. Hou, W. Qiao, K. Barman, M. A. Edwards, A. F. Garrido-Castro, J. N. deGruyter, H. Nakamura, K. Knouse, C. Qin, K. J. Clay, D. Bao, C. Li, J. T. Starr, C. Garcia-Irizarry, N. Sach, H. S. White, M. Neurock, S. D. Minter, P. S. Baran, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 6392-6402, <https://doi.org/10.1021/jacs.9b01886>.
 - [19] C. Li, Y. Kawamata, H. Nakamura, J. C. Vantourout, Z. Liu, Q. Hou, D. Bao, J. T. Starr, J. Chen, M. Yan, P. S. Baran, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56, 13088-13093, <https://doi.org/10.1002/anie.201707906>.
 - [20] D. A. Cagan, D. Bim, N. P. Kazmierczak, R. G. Hadt, *ACS Catal.* **2024**, 14, 9055-9076, <https://doi.org/10.1021/acscatal.4c02036>.
 - [21] K. J. Liang, O. R. Taylor, A. L. López, R. J. Woo, A. Bahamonde, *Chem. Eur. J.* **2024**, 30, e202402524, <https://doi.org/10.1002/chem.202402524>.
 - [22] T. J. Raab, A. G. Doyle, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, 147, 33991-34000, <https://doi.org/10.1021/jacs.5c11247>.
 - [23] R. D. Bradley, B. McManus, J. G. Yam, V. Carta, A. Bahamonde, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, e202310753, <https://doi.org/10.1002/anie.202310753>.
 - [24] L. E. Ehehalt, O. M. Beleh, I. C. Priest, J. M. Mouat, A. K. Olszewski, B. N. Ahern, A. R. Cruz, B. K. Chi, A. J. Castro, K. Kang, J. Wang, D. J. Weix, *Chem. Rev.* **2024**, 124, 13397-13569, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.4c00524>.
 - [25] M. J. Goldfogel, L. Huang, D. J. Weix, en *Nickel Catalysis in Organic Synthesis: Methods and Reactions* (Eds.: S. Ogoshi) Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, **2020**, 183-222, <https://doi.org/10.1002/9783527813827.ch9>.
 - [26] D. J. Weix, *Acc. Chem. Res.* **2015**, 48, 1767-1775, <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.5b00057>.
 - [27] L.-M. Chen, S. E. Reisman, *Acc. Chem. Res.* **2024**, 57, 751-762, <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.3c00775>.
 - [28] W. Xu, T. Xu, *Acc. Chem. Res.* **2024**, 57, 1997-2011, <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.4c00309>.
 - [29] D. A. Cagan, Á. Péter, B. P. Vokits, M. Chan, P. S. Baran, D. G. Blackmond, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, 148, 677-691, <https://doi.org/10.1021/jacs.5c15506>.
 - [30] R. F. Turro, J. L. Wahlman, Z. J. Tong, X. Chen, M. Yang, E. P. Chen, X. Hong, R. G. Hadt, K. Houk, Y.-F. Yang, S. E. Reisman, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, 145, 14705-14715, <https://doi.org/10.1021/jacs.3c02649>.
 - [31] H. Wang, P. Zheng, X. Wu, Y. Li, T. Xu, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, 144, 3989-3997, <https://doi.org/10.1021/jacs.1c12424>.



Ana Bahamonde

Departamento de Química, Universidad de California Riverside, Riverside, EE. UU.

E-mail: ana.bahamonde@ucr.edu

ORCID: 0000-0002-7713-1901

Ana nació en Gijón y obtuvo su licenciatura en Química por la Universidad de Oviedo en 2012. Posteriormente, hizo la tesis doctoral en Tarragona en el Instituto de Investigación Química de Cataluña (IIQ) en el grupo de Paolo Melchiorre. Tras obtener el doctorado, se mudó a Estados Unidos para trabajar como investigadora postdoctoral en la Universidad de Utah (2017-2020) en el grupo de Matthew Sigman. Actualmente, es profesora en la Universidad de California Riverside, donde su grupo se centra en el estudio de reacciones catalizadas por níquel.

Investigadores menores de 35

Ricardo Javier Vázquez



Posición: Catedrático Auxiliar

Entidad: Universidad de Indiana

Web: <https://vazquez.lab.indiana.edu/>

ORCID: 0000-0003-3245-8123

Formación: Bachillerato: Universidad de Puerto Rico – Río Piedras. Doctorado: Universidad de Michigan – Ann Arbor. Postdoctorado: Universidad Nacional de Singapur
Líneas de Investigación: Materiales Orgánicos, Fotofísica, Fotoquímica, Qubits and Qudits, Espectroscopía Resuelta en Tiempo, Electroquímica, Microscopía

Aficiones: Cocinar, ver deportes (béisbol y baloncesto), leer de vez en cuando y disfrutar de las cosas pequeñas de la vida.

Perfil personal del investigador

Mi investigación en una frase: Integramos la síntesis de materiales orgánicos con espectroscopía y electroquímica para abordar y resolver problemas relacionados con: 1) direccionabilidad cuántica, 2) biosensores y 3) transducción de energía/bioelectrónica.

Ciencia en lo cotidiano

Mi ejemplo favorito de química/ciencia en la vida diaria es la reacción de Maillard; deliciosa.

Si pudiera haber descubierto algo en química, sería láseres, quantum dots o CRISPR probablemente.

La aplicación futura más importante de mi investigación será controlar la fuerza de interacción entre los electrones en estado excitado para que interactúen con el campo eléctrico de las biomoléculas y extraer información de ellas de manera cuántica, algo imposible de resolver con la fotofísica clásica.

Si yo fuera un equipo de laboratorio, sería la balanza analítica porque es integral para dictar precisión y exactitud en casi todo experimento.

Mi momento favorito del día para pensar ciencia es cada vez que hago ejercicios. Es terapéutico.

Un concepto que me obsesiona en el buen sentido es multiplicidad en estados excitados – doblete, triplete, cuartete, quintete....

Un error común sobre mi área es... (y la realidad es...) que combinar materiales y fotofísica se limita solo a las celdas solares, cuando en realidad es integral para muchas aplicaciones relacionadas con la biología.

Una pregunta que me gustaría responder en los próximos 5 años es ¿Podemos hacer que tres electrones (cuarteto) interactúen, es decir, "bailen", en el estado excitado de compuestos solubles en agua?

Cómo se hace la ciencia

Lo que más disfruto en el laboratorio es ver germinar una idea que inicialmente se concretó en papel, lápiz e ideas confusas.

Una habilidad "invisible" clave para investigar es la disciplina, la obsesión y el buen hábito de leer literatura.

Lo que más valoro de mi grupo/equipo es la cordialidad entre los miembros y que nos atrevamos a investigar temas de alto riesgo, pero de alta recompensa.

Aconsejo a mis estudiantes/colaboradores tener disciplina, obsesión y buen hábito para leer literatura.

Estoy más orgulloso cuando me abocoran con preguntas luego de una presentación; implica que la audiencia estaba prestando atención y le interesa el tema en discusión.

Un experimento que me cambió la forma de pensar fue más bien una técnica; espectroscopía de absorción transitoria.

Mi estrategia para no perderme en la complejidad es recordar que la investigación no publicada es sinónimo de investigación inexistente. Por consiguiente, un artículo imperfecto publicado es más importante que un artículo perfecto por publicar.

Una herramienta/método que ha sido decisiva en este trabajo es como mencioné; recordar que la investigación no publicada es sinónimo de investigación inexistente. Por consiguiente, un artículo imperfecto publicado es más importante que un artículo perfecto por publicar.

Lado humano

No puedo resistirme a los postres son mi talón de Aquiles.

Recargo energía compartiendo con mi primogénito - Ricardo Franklin.

Si no fuera científico, sería cocinero.

Si pudiera elegir una edad, sería 33 porque es la edad de Cristo.

Una frase que me guía es están los inteligentes que se enfocan en presumir y los que se enfocan en producir. Siempre sé parte de los que producen.

Cierre

Una idea para llevarse a casa: la disciplina siempre te llevará más lejos que el talento. Tú puedes controlar la disciplina, pero no el talento.

Presentación de su artículo

Los materiales pseudocapacitivos combinan las propiedades eléctricas de las baterías y de los capacitores. Nuestra intención es compartir una guía para ayudar al estudiantado a caracterizar y reportar materiales pseudocapacitivos.

Técnicas electroquímicas básicas para la caracterización de materiales pseudocapacitivos: estudio de caso en CPE-K

Basic electrochemical techniques for the characterization of pseudocapacitive materials: a case study of CPE-K

Óscar Medrano, Samuel Benjamin Baker y Ricardo Javier Vázquez*

Departamento de Química, Universidad de Indiana, Bloomington, Indiana, EE. UU.

PALABRAS CLAVE:

Pseudocapacitancia
Voltametría cíclica
Impedancia
Almacenamiento de cargas

RESUMEN:

Los materiales pseudocapacitivos son de gran interés académico e industrial porque tienen el potencial de combinar la alta densidad de energía de las baterías con la alta densidad de potencia de los capacitores. La pseudocapacitancia puede caracterizarse mediante voltametría cíclica, espectroscopía de impedancia electroquímica y carga-descarga galvanostática, utilizando celdas de tres electrodos, técnicas que además proporcionan información sobre la conducción iónica y electrónica. En esta contribución discutimos un estudio de caso que utiliza estas técnicas básicas para caracterizar CPE-K, el polielectrolito conjugado autodopado arquetípico. CPE-K posee un esqueleto π -conjugado y cadenas iónicas que favorecen su solubilidad en medios acuosos. Esta arquitectura molecular única favorece la formación de polarones positivos (autodopados), fundamentales para el comportamiento pseudocapacitivo de este material.

KEYWORDS:

Pseudocapacitance
Cyclic voltammetry
Impedance
Charge Storage

ABSTRACT:

Pseudocapacitive materials have attracted considerable academic and industrial interest because they have the potential to combine the high energy density of batteries with the high power density of capacitors. Pseudocapacitance can be characterized using cyclic voltammetry, electrochemical impedance spectroscopy, and galvanostatic charge-discharge measurements in a three-electrode configuration, techniques that also provide valuable insight into ionic and electronic transport. In this contribution, we present a case study demonstrating the application of these fundamental electrochemical techniques to characterize CPE-K, an archetypal self-doped conjugated polyelectrolyte with pseudocapacitive characteristics. CPE-K possesses a π -conjugated backbone and pendant ionic side chains that impart water solubility. This unique molecular architecture promotes the formation of positive polarons (self-doped), which are essential for the pseudocapacitive behavior of the material.

Introducción

Los métodos tradicionales de almacenamiento de energía se basan en mecanismos de almacenamiento de carga, tanto faradaicos como no faradaicos.^[1-3] Los procesos faradaicos se caracterizan por depender de reacciones de transferencia de electrones (oxidación-reducción) y de cambios en el estado de oxidación del material. Los mecanismos faradaicos son característicos de las baterías y presentan intrínsecamente alta densidad de energía (capacidad para almacenar y proveer cargas durante largo tiempo), pero una baja densidad de potencia (capacidad para cargarse y descargarse rápidamente).^[3] Por otro lado, los mecanismos no faradaicos almacenan carga mediante procesos de asociación iónica superficiales. Este comportamiento es característico de los capacitores eléctricos de doble capa (EDLC, por sus siglas en inglés), en los que la carga se almacena electrostáticamente en la interfaz electrodo/electrolito mediante la formación de una doble capa eléctrica, en la que los iones del electrolito se adsorben o se

asocian a la superficie del electrodo.^[1,4] Como consecuencia, los EDLC presentan altas densidades de potencia debido a sus procesos de carga y descarga rápidos, aunque poseen densidades de energía relativamente bajas.

Los materiales pseudocapacitivos almacenan energía mediante reacciones faradaicas iniciales y reversibles que tienen lugar en su superficie cuando se emplean como electrodo. Estas reacciones van acompañadas de la inserción o extracción de contraiones del electrolito, que compensan los cambios en el estado de oxidación del material y mantienen la "electroneutralidad", lo que potencialmente permite alcanzar altas densidades de energía y una alta capacidad de carga y descarga rápida en un mismo material.^[4-6] Por ende, los materiales pseudocapacitivos son de gran interés académico e industrial porque tienen el potencial de combinar la alta densidad de energía de las baterías con la alta densidad de potencia de los capacitores.^[6,7] Además, la pseudocapacitancia genera un estado dopado

con transporte mixto iónico-electrónico, responsable de aplicaciones como la generación de biocorriente, la transducción iónica-electrónica, el transporte de huecos y el almacenamiento de energía. En CPEs autodopados como el CPE-K, este comportamiento se atribuye a la formación y estabilización de polarones y a una red intermolecular electroquímicamente activa que se extiende desde el colector de corriente, lo cual facilita el transporte simultáneo de iones y cargas electrónicas a través del material.

En este artículo se presentan y discuten las técnicas electroquímicas básicas empleadas para la caracterización de materiales pseudocapacitivos: voltametría cíclica, espectroscopía de impedancia electroquímica y carga-descarga galvanostática. Esta contribución didáctica está dirigida principalmente a estudiantes de química de nivel subgraduado avanzado y primeros años de posgrado con conocimientos básicos de química general, reacciones de oxidación-reducción, potencial, corriente y ley de Ohm. A partir de estos conceptos, se introducen herramientas electroquímicas para relacionar las respuestas experimentales con los mecanismos de almacenamiento y transporte de carga en materiales pseudocapacitivos. Como modelo de material pseudocapacitivo, utilizaremos CPE-K en este estudio didáctico, el polielektrolito conjugado autodopado arquetípico (Figura 1A).^[8-15] CPE-K se caracteriza por presentar un esqueleto π -conjugado y cadenas iónicas, lo que favorece su solubilidad en medios acuosos. Esta arquitectura molecular favorece la formación de polarones positivos (autodopado) cuando se carga (Figura 1A-B), fundamentales para obtener el comportamiento pseudocapacitivo de este material.

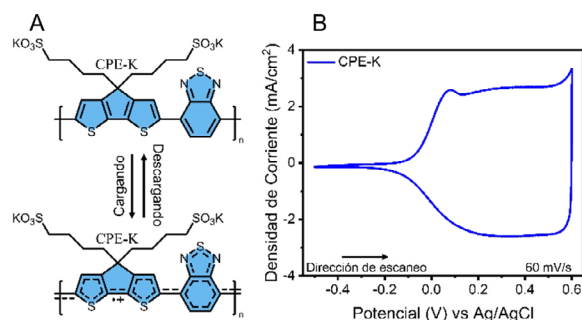


Figura 1. (A) Estructura química de CPE-K en estado cargado y descargado, que muestra la formación del polaron. (B) Voltametría cíclica de CPE-K a una velocidad de barrido de 60 mV/s.

Para preparar el electrodo de trabajo, se disolvió CPE-K en agua a una concentración de 5 mg/mL. De esta solución, se depositaron 10 μL de la dispersión sobre un electrodo de carbono vítreo de 3 mm de diámetro y se dejó secar al aire libre durante toda la noche para obtener una capa delgada y homogénea (Figura 2A). Como electrodo de referencia se utilizó un electrodo de Ag/AgCl en (KCl 3.5 M), mientras que el contraelectrodo consistió en una placa cuadrada de platino con un área de 100 mm². El electrolito empleado fue una disolución de NaCl 2 M, cuya concentración, según la literatura, maximiza las propiedades pseudocapacitivas de CPE-K.^[11] Cabe resaltar que estas caracterizaciones se realizan en celdas de tres electrodos - trabajo (ET), referencia (Ref) y contraelectrodo (CE) - (Figura 2), lo que permite controlar con precisión el potencial aplicado al material y determinar propiedades como el potencial redox, la resistencia de transferencia de carga y la capacitancia.

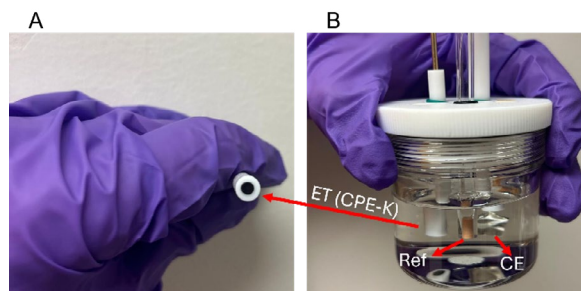


Figura 2. (A) Electrodo de trabajo (ET) de carbono con CPE-K depositado. (B) Esquema del sistema de 3 electrodos: electrodo de trabajo (ET), electrodo de referencia (Ref) y contraelectrodo (CE).

Voltametría cíclica

La voltametría cíclica es una técnica electroquímica en la que se aplica un cambio de potencial (voltaje) en función del tiempo (barrido cíclico) para oxidar y/o reducir un material, y se mide la corriente en respuesta a dicho potencial.^[16] Es importante destacar que es posible modificar la escala de tiempo del experimento mediante la velocidad de barrido. Dependiendo del mecanismo de almacenamiento de carga, se obtienen diferentes respuestas voltamétricas. En la Figura 1B se muestra la respuesta electroquímica mediante voltametría cíclica de CPE-K a una velocidad de barrido de 60 mV/s, junto con sus estructuras moleculares en estado neutro y en estado dopado (Figura 1A). Se observa un pico consistente con un proceso faradaico a 0.1 V, correspondiente a la oxidación y la formación del polaron en CPE-K. La respuesta farádica va seguida de una respuesta anódica de corriente constante, característica de los capacitores e independiente del potencial aplicado, que presenta una forma cuasirectangular. La misma corresponde a la asociación de los iones Cl^- del electrolito con el polaron positivo de CPE-K, lo que contribuye tanto a la formación de la doble capa eléctrica como al comportamiento pseudocapacitivo del material.^[17] La observación de ambos procesos, faradaicos (0.1 V) y no faradaicos (respuesta rectangular), en CPE-K demuestra su capacidad pseudocapacitiva y constituye una señal arquetípica de materiales pseudocapacitivos. Para más detalles sobre estos procesos electroquímicos con cambios físicos en el material, se recomienda consultar los trabajos de Mathis *et al.* y de Fleischmann *et al.*^[3,4]

Obtener la respuesta electroquímica en función de diferentes velocidades de barrido es un parámetro importante al analizar la voltametría cíclica. La velocidad de barrido determina la escala temporal del barrido cíclico. Es posible modificar la escala temporal del experimento ajustando la velocidad de barrido. En términos cualitativos, la dependencia de la corriente electroquímica con la velocidad de barrido puede describirse mediante la Ecuación 1:^[3,15]

$$\langle I \rangle_p \propto v^b$$

Ecuación 1.

en donde $\langle I \rangle_p$ es el pico de corriente faradaica y v es la velocidad de barrido. La pendiente de la regresión lineal en la gráfica log-log corresponde a b . Un valor de b cercano a 1 indica que el material está dominado por pseudocapacitancia controlada en la interfaz material-electrolito, lo cual es ideal para este tipo de materiales.^[3,10,11] En cambio, valores de b cercanos a 0.5 indican un almacenamiento de carga limitado por difusión. Los procesos limitados por difusión indican que los iones en la disolución electrolítica tienen dificultad para acceder a los sitios electroactivos del material pseudocapacitivo.^[18]

Es importante destacar que la respuesta pseudocapacitiva de CPE-K se mantiene simétrica a medida que aumenta la velocidad de barrido (Figura 3A). Se puede transformar la información de la Figura 3A usando la Ecuación 1, lo que revela que CPE-K tiene un valor de b de 0.97 (Figura 3B), lo cual evidencia su alto comportamiento pseudocapacitivo. En el contexto de CPE-K, un valor de b de 0.97 indica que la respuesta está predominantemente controlada por procesos superficiales/pseudocapacitivos y presenta una dependencia mínima de procesos limitados por difusión a las velocidades de barrido utilizadas.^[5,19]

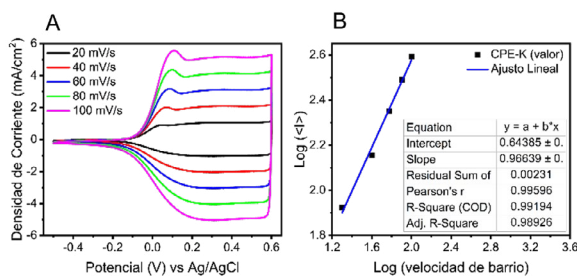


Figura 3. (A) Voltametría cíclica de CPE-K a velocidades de barrido de 20, 40, 60, 80 y 100 mV/s. (B) Gráfica de $\log$ (corriente faradaica) versus $\log$ (velocidad de barrido) para determinar el valor de b a partir de la Ecuación 1.

En términos cualitativos, el método de Dunn aplicado a voltametrías cíclicas obtenidas a diferentes velocidades de barrido permite separar la contribución capacitiva, o controlada por superficie, de la contribución controlada por difusión, definida en la Ecuación 2:

$$i(V) = k_1 v + k_2 v^{1/2} \quad \text{Ecuación 2.}$$

en donde $k_1 v$ representa la corriente controlada por superficie y $k_2 v^{1/2}$ la corriente controlada por difusión. Al medir la voltametría cíclica a diferentes velocidades de barrido y graficar $i/v^{1/2}$ vs. $v^{1/2}$ para cada potencial, se obtienen k_1 y k_2 , permitiendo cuantificar y separar ambas contribuciones de la corriente total. En la Figura 4 se muestra la aplicación del método de Dunn, donde, a una velocidad de barrido de 100 mV/s, se obtiene una contribución difusiva del 20 % y una superficial del 80 %. Esta distribución corresponde únicamente a esta velocidad de barrido, ya que las contribuciones relativas de los procesos superficiales y difusivos dependen de la velocidad de barrido.

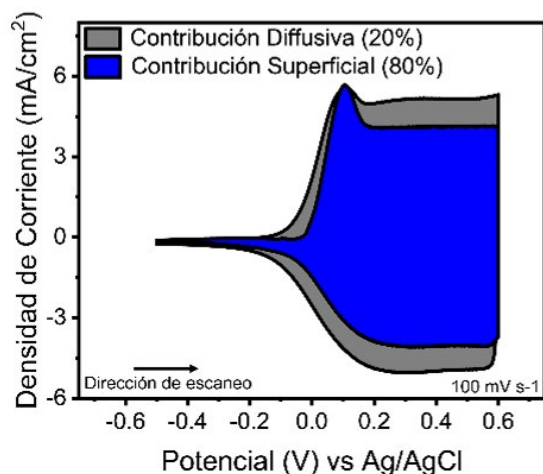


Figura 4. Contribución difusiva y superficial durante la carga de CPE-K a una velocidad de barrido de 100 mV/s.

Espectroscopía de impedancia electroquímica (EIE): transporte de cargas e iones

La espectroscopía de impedancia electroquímica (EIE) es una técnica que mide la impedancia de un sistema electroquímico en función de la frecuencia mediante la aplicación de pequeñas perturbaciones sinusoidales, según la ley de Ohm. La impedancia describe la oposición del sistema al flujo de corriente alterna y se expresa como una cantidad compleja en la Ecuación 3:

$$Z = Z' + jZ'' \quad \text{Ecuación 3.}$$

donde Z' y Z'' corresponden a las componentes real e imaginaria de la impedancia, respectivamente. En una EIE potencioestática se aplica una perturbación de potencial y se mide la respuesta de corriente, mientras que en una EIE galvanostática se aplica una perturbación de corriente y se registra la respuesta de potencial. La relación entre ambas señales permite determinar la resistencia del sistema y separar las contribuciones resistivas provenientes de procesos asociados al transporte de carga e iones.^[10,12,13,20]

Para la EIE, una de las representaciones más utilizadas es el diagrama de Nyquist (Figura 5A-B), en el que la parte imaginaria de la impedancia ($-Z''$) se representa en función de la parte real (Z'). Esta representación permite distinguir los diferentes procesos electroquímicos según la frecuencia: a altas frecuencias predominan la resistencia de la disolución y la transferencia de carga en la interfaz electrodo/electrolito, mientras que a bajas frecuencias predominan los procesos de difusión iónica y el almacenamiento de carga pseudocapacitivo.^[9-12,15,21]

En términos cualitativos, a altas frecuencias se observa un semicírculo asociado con la resistencia de transferencia de carga (R_{CT}). A frecuencias intermedias-bajas se observa una región aproximadamente lineal con un ángulo cercano a 45° , asociada al transporte difusivo de iones. A frecuencias aún menores, la respuesta se verticaliza y se desvía del comportamiento de Warburg semiinfinito, lo que refleja el carácter pseudocapacitivo ideal y creciente de la película. La Figura 5A muestra los diagramas de Nyquist de CPE-K obtenidos entre 0.2 y 0.6 V vs Ag/AgCl, donde se observa una reducción de R_{CT} concomitante con una respuesta de Warburg seguida de una verticalización en la región de bajas frecuencias, lo que indica un incremento en el carácter capacitivo de CPE-K (Figura 5A-B) a voltajes cercanos a 0.6 V.^[9-12,22] Dado que la respuesta de impedancia depende del estado de oxidación del material, se recomienda realizar las mediciones a un potencial en el que el material pseudocapacitivo esté dopado.

Para obtener información cuantitativa del diagrama de Nyquist, los espectros, adquiridos en un intervalo de frecuencias de 100 mHz a 1 MHz, se ajustaron mediante un circuito equivalente de Randles modificado para describir el comportamiento electroquímico del material, según la Ecuación 4:^[11,15]

$$R_s + (Q_{DL}/R_{CT}) + W + Q_{GEOM} \quad \text{Ecuación 4.}$$

En este circuito, $R_s = R_i$ y representa la resistencia del electrolito, $Q_{DL} = Q_i$ y representa el comportamiento no ideal de la doble capa eléctrica asociada a la capacitancia, $R_{CT} = R_e$ y representa la resistencia de transferencia de carga, $W = W_i$ y representa la impedancia de Warburg asociada a la difusión de iones y $Q_{GEOM} = Q_2$ y representa la pseudocapacitancia del material. Los elementos Q_{DL} y Q_{GEOM} se emplean para describir la respuesta capacitiva no ideal originada por la heterogeneidad estructural y electroquímica de las películas del-

gadas de CPE-K.^[18-23] Debemos resaltar que el elemento W_1 se utiliza únicamente como parte del ajuste global del espectro y que su valor no se emplea para cuantificar la difusión iónica. Usando este modelo, la R_{CT} de CPE-K disminuye de 9.038Ω a 5.453Ω cuando el potencial usado para la caracterización EIE aumenta de 0.2 V a 0.6 V (Tabla 1).

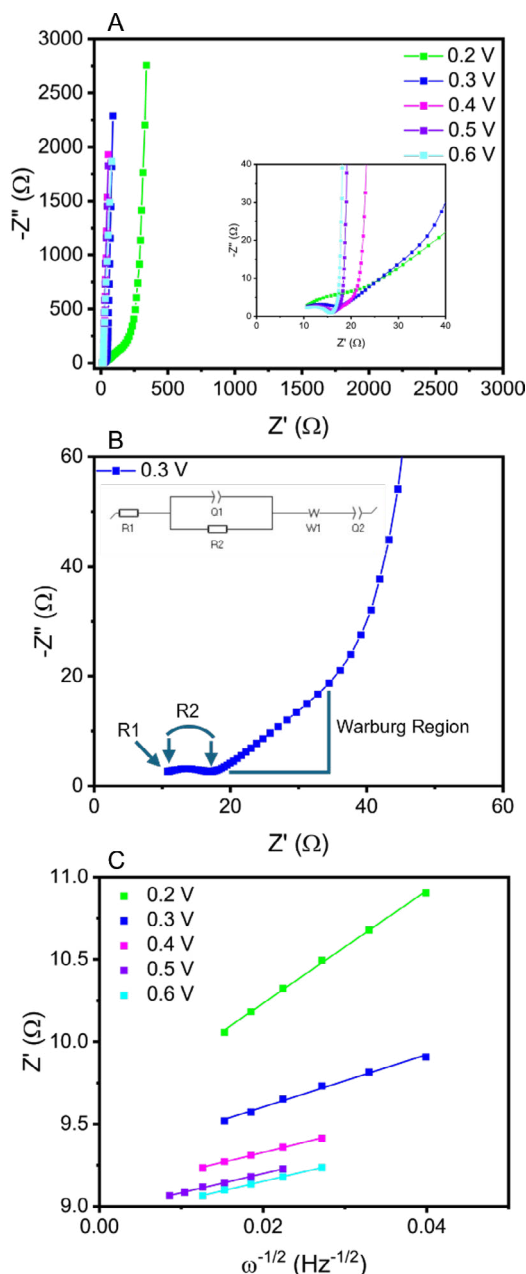


Figura 5. (A) Diagramas de Nyquist de CPE-K entre 0.2 y 0.6 V vs Ag/AgCl. (B) Diagrama de Nyquist de CPE-K a 0.3 V versus Ag/AgCl y el circuito equivalente utilizado para el ajuste, ampliado para mostrar el comportamiento de tipo semicircular en la región de altas frecuencias asociado a la resistencia de transferencia de carga. (C) Análisis de Warburg de los datos de EIE entre 0.2 y 0.6 V vs Ag/AgCl para determinar σ_W a partir de la región aproximadamente lineal de 45° .

Tabla 1. Valores de R_{CT} y σ_W de CPE-K para cada potencial investigado mediante EIE.

Potencial	$R_{CT} (\Omega)$	$\sigma_W (\Omega \cdot s^{-1/2})$
0.2 V	9.038	34.25
0.3 V	7.170	15.91
0.4 V	6.302	12.20
0.5 V	5.689	11.59
0.6 V	5.453	11.58

De forma independiente del ajuste del circuito equivalente, el factor de Warburg (σ_W) se determinó directamente a partir de los datos experimentales. Para ello, se seleccionó únicamente la región del diagrama de Nyquist con un comportamiento aproximadamente de tipo Warburg (Figura 5B), caracterizada por una pendiente cercana a 45° . La región de baja frecuencia con pendiente $> 45^\circ$ debe excluirse de este análisis, ya que se desvía del comportamiento de difusión semiinfinita. Los datos seleccionados se representaron como la parte real de la impedancia (Z') en función de $\omega^{-1/2}$, según la Ecuación 5:^[11,15]

$$Z' = R_s + R_{CT} + \sigma_W \omega^{-1/2} \quad \text{Ecuación 5.}$$

donde $R_s = R_1$ y representa la resistencia de la disolución, $R_{CT} = R_2$ y representa la resistencia de transferencia de carga, ω es la frecuencia angular en la región Warburg (específica para valores con pendiente de 45°) y σ_W es el factor de Warburg (ver Figura 5C).^[10,11,15] Es importante señalar que el valor σ_W se calcula manualmente a partir de la Ecuación 5, y no es un valor extraído del circuito en la Ecuación 4. Esto se debe a que el circuito se modeló con un componente Warburg semiinfinito, y no uno finito. Un valor bajo de σ_W indica una menor impedancia asociada al transporte difusivo de iones y es consistente con un transporte iónico más favorable.^[9,13,15,18,23] Mediante este análisis, σ_W disminuye de $34.25 \Omega \cdot s^{-1/2}$ a $11.58 \Omega \cdot s^{-1/2}$ al aumentar el potencial de caracterización EIE de 0.2 V a 0.6 V (Tabla 1).

Ciclo de carga y descarga galvanostática

La carga-descarga galvanostática (CDG) es la técnica de referencia para evaluar el desempeño de materiales pseudo-capacitivos, ya que permite determinar la capacitancia, la capacidad operativa a diferentes densidades de corriente, la eficiencia coulombica y la estabilidad durante el ciclado. En esta técnica, el material se carga y descarga aplicando una corriente constante, mientras se registra la variación del potencial en función del tiempo. La ventana de potencial utilizada para las mediciones de CDG se determina previamente mediante voltametría cíclica, de modo que el material opere en la región en la que presenta un comportamiento pseudo capacitivo estable.

En el caso de CPE-K, la voltametría cíclica mostró que esta ventana se encuentra entre 0.2 y 0.6 V vs Ag/AgCl (Figuras 1B y 3A); por lo tanto, es prudente realizar las mediciones de CDG dentro de este intervalo de potencial. Las Figuras 6A y 6B muestran los perfiles de carga y descarga obtenidos a diferentes corrientes específicas. Al incrementar la corriente específica, definida como la corriente aplicada normalizada por la masa del material electroactivo ($A \cdot g^{-1}$), el tiempo de un ciclo completo disminuyó de aproximadamente 45 s a 0.8 s al aumentar la corriente de 1 a $50 A \cdot g^{-1}$, sin deteriorar de manera significativa el perfil galvanostático (Figura 6), lo que refleja la propensión de CPE-K para operar a altas velocidades de carga y descarga.

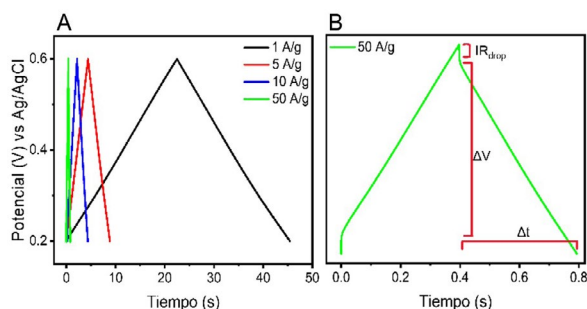


Figura 6. (A) Perfiles galvanostáticos de carga-descarga de CPE-K a diferentes corrientes. (B) Perfil galvanostático de carga-descarga a 50 A/g que ilustra las contribuciones de las variables de la Ecuación 6.

Los perfiles de CDG observados en la Figura 6A-B, generalmente se transforman y analizan mediante la capacitancia específica (C_s), que se mide en farads por gramo del material (Fg^{-1}) y se calcula a partir de la curva de descarga utilizando la Ecuación 6:^[10,14,15]

$$C_s = \frac{I\Delta t}{m\Delta V} \quad \text{Ecuación 6.}$$

donde I es la corriente aplicada, Δt es el tiempo de descarga, m es la masa del material electroactivo y ΔV es la ventana de potencial, corregida por la caída óhmica (IR_{DROP} – ver Figura 6B a 50 A.g-1). La caída óhmica se debe principalmente a la resistencia del electrolito, aunque también puede incluir las resistencias del electrodo y de contacto. Una caída óhmica mayor implica mayores pérdidas resistivas y un voltaje efectivo menor durante la descarga. Dado que está normalizado por la masa del material, constituye la métrica más utilizada para comparar el desempeño de diferentes materiales pseudocapacitivos.

La Figura 7A muestra que la capacitancia específica de CPE-K disminuye de aproximadamente 80 a 60 Fg^{-1} al aumentar la corriente específica de 1 a 50 A.g^{-1} , lo que indica que el material conserva cerca del 75 % de su capacitancia incluso a altas tasas de carga y descarga. Otra forma común de reportar el desempeño es mediante la capacitancia areal (C_A - mF.cm^{-2}), obtenida al normalizar la capacitancia por el área del electrodo y representarla en función de la densidad de corriente (mA.cm^{-2}). Como se muestra en la Figura 7B, la C_A presenta una tendencia similar a la de C_s , disminuyendo de 57 a 42 mF.cm^{-2} al aumentar la densidad de corriente de 0.71 a 35 mA.cm^{-2} .

Además de conservar la pseudocapacitancia a corrientes específicas y densidades de corriente elevadas, un material pseudocapacitivo debe mantener su desempeño durante ciclos repetidos de carga y descarga para garantizar su viabilidad en aplicaciones prácticas.^[4-6] Por ello, la retención de la capacitancia y la estabilidad cíclica constituyen dos de las principales figuras de mérito en la evaluación de estos materiales. En el caso de CPE-K, después de 100,000 ciclos de carga y descarga a una corriente específica de 20 A.g^{-1} , el material retiene el 88.7 % de su capacitancia inicial (Figura 7C), lo que evidencia una excelente estabilidad electroquímica y una degradación mínima incluso tras un ciclado prolongado. Este valor se encuentra entre los más altos reportados para materiales pseudocapacitivos, particularmente en sistemas completamente orgánicos.^[9-15,19,22,24] En conjunto con los resultados de voltametría cíclica y espectroscopía de impedancia electroquímica, las mediciones de CDG confirman que el almacenamiento de carga en CPE-K está dominado

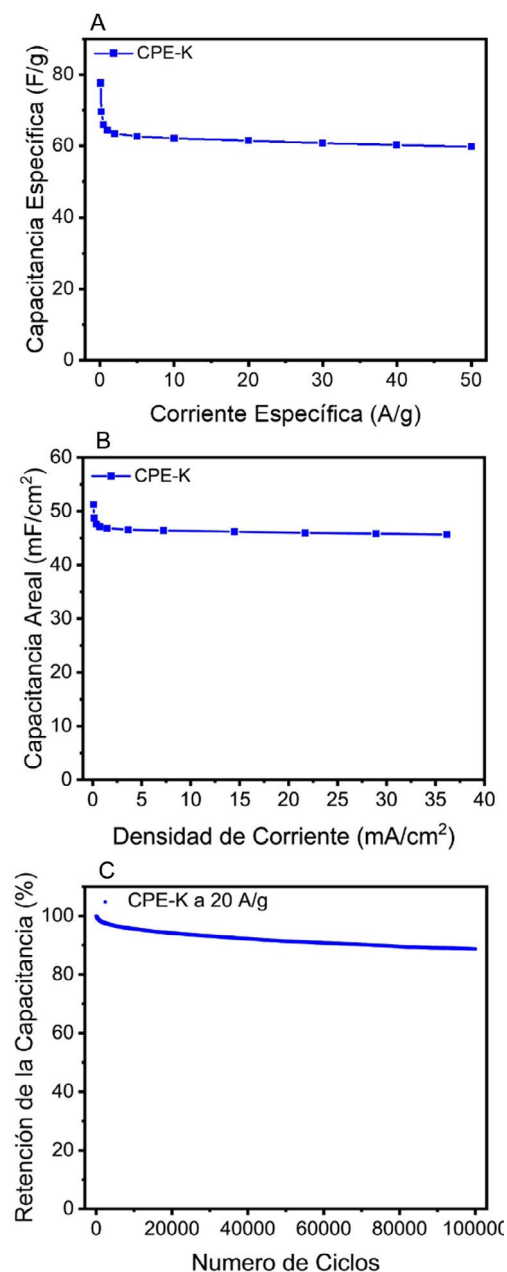


Figura 7. (A) Capacitancia específica en función de la corriente específica. (B) Capacitancia areal en función de la densidad de corriente. (C) Retención de la capacitancia de CPE-K durante 100,000 ciclos de carga-descarga a una corriente específica de 20 A.g^{-1} .

por procesos pseudocapacitivos rápidos, favorecidos por una transferencia de carga eficiente, un transporte iónico eficaz y una elevada reversibilidad de los procesos de reducción y oxidación. Estas características convierten a CPE-K en un material pseudocapacitivo altamente eficiente y estable para aplicaciones de almacenamiento electroquímico de energía.

Conclusiones

En este trabajo se presentaron tres de las técnicas electroquímicas más utilizadas para la caracterización de materiales pseudocapacitivos: la voltametría cíclica, la espectroscopía de impedancia electroquímica y la carga-descarga galvanostática, empleando CPE-K como estudio de caso. La voltametría cíclica permitió identificar la respuesta pseudocapacitiva del

material y evaluar la cinética del almacenamiento de carga; la espectroscopía de impedancia electroquímica proporcionó información sobre la transferencia de carga y el transporte iónico; y la carga-descarga galvanostática permitió cuantificar la capacitancia, el desempeño a altas densidades de corriente y la estabilidad durante el ciclado. Al replicar estos experimentos y estudiar los conceptos presentados, se espera que los estudiantes y la comunidad científica puedan adquirir, analizar e interpretar datos electroquímicos básicos, distinguir entre procesos faradaicos, capacitivos y limitados por difusión, y relacionar estas respuestas con los mecanismos de almacenamiento y transporte de carga en el material. En conjunto, estas técnicas ofrecen una caracterización integral del comportamiento pseudocapacitivo y proporcionan una base experimental y conceptual para el estudio de materiales de almacenamiento electroquímico de energía. A medida que los materiales pseudocapacitivos expanden sus aplicaciones, desde supercondensadores hasta dispositivos emergentes como los transistores electroquímicos orgánicos, el dominio de estas técnicas permitirá establecer relaciones entre estructura molecular, transporte de carga y desempeño electroquímico, facilitando el estudio y desarrollo de materiales orgánicos de nueva generación.

Agradecimientos

El paquete de financiamiento inicial (*start-up*) proporcionado por la Indiana University Bloomington (IUB) al autor de correspondencia respaldó esta contribución.

Bibliografía

- [1] W. Liu, X. Sun, X. Yan, Y. Gao, X. Zhang, K. Wang, Y. Ma, *Batteries* **2024**, *10*, <https://doi.org/10.3390/batteries10080271>.
- [2] Y. Ugata, C. Motoki, K. Dokko, N. Yabuuchi, *J. Solid State Electrochem.* **2024**, *28*, 1387, <https://doi.org/10.1007/s10008-023-05670-z>.
- [3] T. S. Mathis, N. Kurra, X. Wang, D. Pinto, P. Simon, Y. Gogotsi, *Adv. Energy Mater.* **2019**, *9*, 1902007, <https://doi.org/10.1002/aenm.201902007>.
- [4] S. Fleischmann, J. B. Mitchell, R. Wang, C. Zhan, D. Jiang, V. Presser, V. Augustyn, *Chem. Rev.* **2020**, *120*, 6738, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.0c00170>.
- [5] V. Augustyn, P. Simon, B. Dunn, *Energy Environ. Sci.* **2014**, *7*, 1597, <https://doi.org/10.1039/c3ee44164d>.
- [6] V. Augustyn, J. Come, M. A. Lowe, J. W. Kim, P.-L. Taberna, S. H. Tolbert, H. D. Abruña, P. Simon, B. Dunn, *Nat. Mater.* **2013**, *12*, 518, <https://doi.org/10.1038/nmat3601>.
- [7] X. Wang, S. M. Bak, M. Han, C. E. Shuck, C. McHugh, K. Li, J. Li, J. Tang, Y. Gogotsi, *ACS Energy Lett.* **2022**, *7*, 30, <https://doi.org/10.1021/acseenergylett.1c02262>.
- [8] S. R. McCuskey, Y. Su, D. Leifert, A. S. Moreland, G. C. Bazan, *Adv. Energy Mater.* **2020**, *32*, 1908178, <https://doi.org/10.1002/adma.201908178>.
- [9] G. Quek, Y. Su, R. K. Donato, R. J. Vázquez, V. S. Marangoni, P. R. Ng, M. C. F. Costa, B. Kundukad, K. S. Novoselov, A. H. C. Neto, G. C. Bazan, *Adv. Electron. Mater.* **2022**, *8*, 2100942, <https://doi.org/10.1002/aelm.202100942>.
- [10] B. R. P. Yip, R. J. Vázquez, Y. Jiang, S. R. McCuskey, G. Quek, D. Ohayon, X. Wang, G. C. Bazan, *Adv. Mater.* **2024**, *36*, <https://doi.org/10.1002/adma.202308631>.
- [11] R. J. Vázquez, G. Quek, Y. Jiang, B. R. P. Yip, S. R. McCuskey, D. Ohayon, B. Kundukad, X. Wang, G. C. Bazan, *J. Mater. Chem. A Mater.* **2023**, *11*, 18843, <https://doi.org/10.1039/d3ta02820h>.
- [12] Y. Jiang, R. J. Vázquez, S. R. McCuskey, B. R. P. Yip, G. Quek, D. Ohayon, B. Kundukad, X. Wang, G. C. Bazan, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2024**, *16*, <https://doi.org/10.1021/acsami.3c13137>.
- [13] Y. Su, S. R. McCuskey, D. Leifert, A. S. Moreland, L. Zhou, L. C. Llanes, R. J. Vázquez, L. Sepunaru, G. C. Bazan, *Adv. Funct. Mater.* **2021**, *31*, 2007351, <https://doi.org/10.1002/adfm.202007351>.
- [14] R. J. Vázquez, S. R. McCuskey, G. Quek, Y. Su, L. Llanes, J. Hinks, G. C. Bazan, *Macromol. Rapid Commun.* **2022**, *43*, 2100840, <https://doi.org/10.1002/marc.202100840>.
- [15] R. J. Vázquez, G. Quek, S. R. McCuskey, L. Llanes, B. Kundukad, X. Wang, G. C. Bazan, *J. Mater. Chem. A Mater.* **2022**, *10*, 21642, <https://doi.org/10.1039/d2ta05053f>.
- [16] N. Elgrishi, K. J. Rountree, B. D. McCarthy, E. S. Rountree, T. T. Eisenhart, J. L. Dempsey, *J. Chem. Educ.* **2018**, *95*, 197, <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.7b00361>.
- [17] G. Quek, B. Roehrich, Y. Su, L. Sepunaru, G. C. Bazan, *Adv. Mater.* **2022**, *34*, <https://doi.org/10.1002/adma.202104206>.
- [18] H. Li, J. Wang, Q. Chu, Z. Wang, F. Zhang, S. Wang, *J. Power Sources* **2009**, *190*, 578, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2009.01.052>.
- [19] J. C. Russell, V. A. Posey, J. Gray, R. May, D. A. Reed, H. Zhang, L. E. Marbella, M. L. Steigerwald, Y. Yang, X. Roy, C. Nuckolls, S. R. Peurifoy, *Nat. Mater.* **2021**, *20*, 1136, <https://doi.org/10.1038/s41563-021-00954-z>.
- [20] S. R. McCuskey, G. Quek, R. J. Vázquez, B. Kundukad, M. H. Bin Ismail, S. E. Astorga, Y. Jiang, G. C. Bazan, *Adv. Sci.* **2024**, *11*, 2405242, <https://doi.org/10.1002/advs.202405242>.
- [21] T. Q. Nguyen, C. Breitenkopf, *J. Electrochem. Soc.* **2018**, *165*, E826, <https://doi.org/10.1149/2.1151814jes>.
- [22] S. J. Cox-Vázquez, B. Shakir, O. Medrano, D. Shah, K. Bortey, B. Biswas, A. Tran, C. Tran, R. J. Vázquez, *JACS Au* **2024**, *4*, 4592, <https://doi.org/10.1021/jacsau.4c00789>.
- [23] J. Wang, S. Dong, B. Ding, Y. Wang, X. Hao, H. Dou, Y. Xia, X. Zhang, *Natl. Sci. Rev.* **2017**, *4*, 71, <https://doi.org/10.1093/nsr/nww072>.
- [24] O. Medrano, Q. Zhou, B. Shakir, G. A. Narváez-Lozano, E. Hickey, M. J. Bayro, E. D. Bloch, R. J. Vázquez, *Chem. Mater.* **2025**, *37*, 6282, <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.5c01255>.

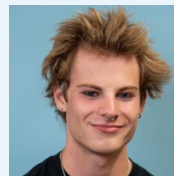


Óscar Medrano

Departamento de Química, Universidad de Indiana Bloomington, Indiana, EE.UU.

C-e: oscmadra@iu.edu

Óscar Medrano es estudiante de doctorado en química en la Universidad de Indiana, donde inició sus estudios de posgrado en 2023. Su investigación se centra en la síntesis y caracterización de materiales orgánicos de capa abierta (*open-shell*) para aplicaciones electroquímicas. Su trabajo busca comprender la relación entre la estructura molecular, las propiedades electrónicas y los mecanismos de almacenamiento de carga. Emplea técnicas electroquímicas y espectroscópicas para estudiar estos materiales y desarrollar plataformas de almacenamiento de energía, así como otras tecnologías electroquímicas de nueva generación.



Samuel Benjamin Baker

Departamento de Química, Universidad de Indiana Bloomington, Indiana, EE.UU.

C-e: bakersb@iu.edu

Samuel Baker actualmente cursa la licenciatura en bioquímica en la Universidad de Indiana, con una especialización secundaria en estudios rusos y de Europa del Este. Su meta es realizar estudios de posgrado y desarrollar una carrera de investigación en el campo de la salud pública. Está interesado en comprender cómo la gestión de residuos afecta la salud de las comunidades y en contribuir al desarrollo de estrategias que reduzcan su impacto ambiental y sanitario. Además de sus actividades académicas, es DJ y administra la estación de radio estudiantil de la universidad, donde programa música, coordina reuniones y organiza eventos estudiantiles.



Ricardo Javier Vázquez

Departamento de Química, Universidad de Indiana Bloomington, Indiana, EE.UU.

C-e: ricvazqu@iu.edu

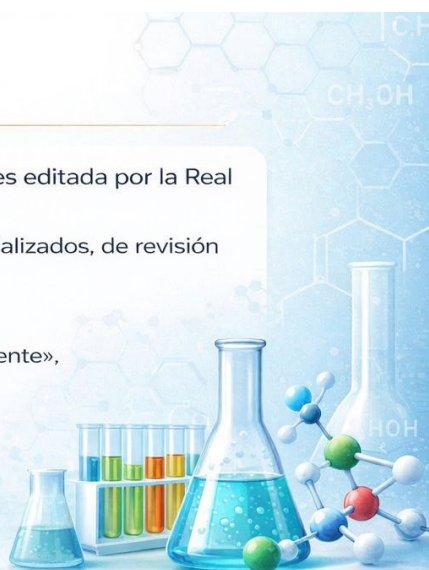
ORCID: 0000-0003-3245-8123

Ricardo Javier Vázquez nació en Puerto Rico, donde obtuvo su bachillerato en química en la Universidad de Puerto Rico, Recinto de Río Piedras. Posteriormente, realizó su doctorado en la Universidad de Michigan, en Ann Arbor, investigando semiconductores orgánicos mediante espectroscopía temporalmente resolutive y óptica no lineal. Más tarde, realizó estudios posdoctorales en la Universidad Nacional de Singapur, donde sintetizó y caracterizó semiconductores orgánicos solubles en agua. Actualmente es profesor en la Universidad de Indiana, donde integra la síntesis de materiales orgánicos y las técnicas de medición para desarrollar tecnologías en materiales cuánticos, biosensores, transducción de energía y bioelectrónica.

Sobre la revista

- La revista **Anales de Química de la RSEQ** es editada por la Real Sociedad Española de Química (RSEQ).
- Publica trabajos científicos originales, especializados, de revisión y divulgación en el campo de la química.
- Incluida en **LATINDEX**, **ICYT** y **DIALNET**.
- Enfoque especial en «Química y Medio Ambiente», historia, didáctica y docencia de la química.

¡Envíanos tus artículos en el campo de la química!



De la molécula al medicamento: química, innovación y desarrollo farmacéutico en Johnson & Johnson

Entrevista al Dr. Andrés A. Trabanco

María Paulis

*Instituto POLYMAT y Facultad de Química, Universidad del País Vasco (EHU).
Comité Editorial Anales de Química de la RSEQ.*

En el primer volumen de la revista de este año 2026, pudimos leer sobre una más que interesante mesa redonda sobre la transferencia de conocimiento del laboratorio al mercado en la química española. Impulsados por dichas ideas, y con el fin de acercar la industria química a los lectores de Anales de Química, comenzamos con este artículo una serie en la que entrevistaremos a representantes de empresas químicas de diferentes sectores. Para empezar, hemos contado con la colaboración de Andrés A. Trabanco, director Senior en Johnson & Johnson Innovative Medicine, quien nos va a presentar las actividades de su empresa.

Muchas gracias por aceptar la invitación de Anales de Química para presentar su empresa a nuestros lectores. ¿Podría empezar por una breve presentación de su persona y su trayectoria?

Soy doctor en Química Orgánica por la Universidad de Oviedo, donde tuve la inmensa fortuna de formarme con los profesores José Barluenga y Josefa Flórez. Ellos despertaron en mí una curiosidad científica que ha acompañado toda mi carrera y una forma de entender la investigación como una mezcla de rigor, creatividad y pasión por descubrir. Esa forma de vivir la química —con exigencia, curiosidad y entusiasmo— sigue estando muy presente en mi manera de trabajar.

Actualmente soy Senior director en Johnson & Johnson Innovative Medicine, donde lidero a nivel global el grupo de Screening Triage & Early Chemistry (ST&EC) desde el centro de investigación de Toledo. El trabajo de mi grupo se sitúa en las fases iniciales de la I+D farmacéutica: ese momento en el que una hipótesis científica empieza a convertirse en una oportunidad real de descubrimiento. Para mí, una de las partes más estimulantes de este trabajo es precisamente acompañar a los proyectos en ese momento inicial, cuando todavía hay muchas incertidumbres, pero también potencial.

A lo largo de mis 26 años en la compañía he tenido la oportunidad de trabajar en distintas áreas de esta etapa temprana de la investigación: desde el liderazgo de proyectos de química médica y grupos dedicados a tecnologías de síntesis

en paralelo, hasta la gestión de colaboraciones externas y el impulso de nuevas plataformas químicas. En esencia, mi labor consiste en conectar química, biología y tecnología para ayudar a que los proyectos avancen desde sus primeros pasos hacia etapas de mayor madurez, siempre con la ambición de generar nuevas oportunidades terapéuticas. Si miro atrás, lo que más valoro es haber podido trabajar siempre cerca de la ciencia, de los equipos humanos y de los proyectos en sus momentos más decisivos.

Johnson & Johnson es una gran compañía multinacional. ¿Podría indicarnos cuál es la actividad principal de la empresa?

Johnson & Johnson es una compañía global dedicada al cuidado de la salud, centrada en desarrollar soluciones que mejoren la vida de las personas. En este contexto, Johnson & Johnson Innovative Medicine constituye el área farmacéutica de la compañía, orientada al descubrimiento, el desarrollo y la puesta a disposición de los pacientes de nuevos medicamentos. Nuestra actividad se basa en la innovación científica y en la búsqueda de terapias para enfermedades con necesidades médicas no cubiertas, integrando distintas disciplinas para transformar el conocimiento científico en posibles tratamientos.

En España, esa actividad se canaliza principalmente a través de Janssen-Cilag, S.A., con presencia en Madrid y Toledo. El centro de investigación de Toledo ocupa un lugar especialmente relevante dentro de la red global de I+D farmacéutica de la compañía: desde su creación en 1985, se ha consolidado como un centro de referencia en química médica y en las primeras fases del descubrimiento de nuevos medicamentos. Desde Toledo lideramos la química médica en proyectos internacionales, definiendo la estrategia de diseño molecular y coordinando el ciclo de diseño, síntesis, ensayo, análisis y optimización de pequeñas moléculas. Creo que ahí está precisamente el valor diferencial de Toledo: no somos solo un centro que ejecuta química, sino un equipo que lidera y ayuda a definir la dirección científica de los proyectos.

CÓMO CITAR: M. Paulis. An. Quím. RSEQ 2026, 122, 235-238, <https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2167>

* C-e: maria.paulis@ehu.eus

Nuestro objetivo es que los mejores conceptos científicos puedan convertirse en compuestos con el perfil adecuado para avanzar hacia fases clínicas y, en última instancia, en nuevas opciones terapéuticas.

Dado que ha mencionado la química, ¿qué papel juega la química en su actividad?

La química juega un papel absolutamente central. En el centro de investigación de Toledo, un equipo de más de 40 investigadores trabaja en las primeras etapas de la investigación farmacéutica. Como químicos médicos y computacionales, apoyados por métodos avanzados de diseño molecular e inteligencia artificial, diseñamos y sintetizamos moléculas que después se evalúan en modelos biológicos cada vez más complejos. Buscamos identificar compuestos con el perfil necesario para progresar hacia fases clínicas. Es un proceso iterativo: cada experimento nos enseña algo nuevo y nos ayuda a entender mejor cómo debe ser una molécula para ser eficaz, selectiva y segura. La química médica tiene algo muy especial: exige precisión, pero también imaginación.

Esta combinación de experiencia, innovación tecnológica y colaboración internacional es lo que nos permite llevar una hipótesis biológica hasta moléculas optimizadas con potencial terapéutico.

Lo más interesante es que en Toledo la química no se entiende como una disciplina aislada, sino como un punto de encuentro entre diseño molecular, modelos biológicos y análisis de datos. A lo largo de estos años, el centro ha evolucionado hasta convertirse en un referente dentro de la red global de Johnson & Johnson, incorporando tecnologías avanzadas como química en flujo, fotoquímica, electroquímica, automatización, síntesis en paralelo y purificación de alto rendimiento. Además, el grupo continúa evolucionando con las últimas innovaciones en química médica, incluyendo nuevas modalidades más allá de las moléculas pequeñas tradicionales, como péptidos, PROTACs y RIPTACs. Esta combinación de experiencia, innovación tecnológica y colaboración internacional es lo que nos permite llevar una hipótesis biológica hasta moléculas optimizadas con potencial terapéutico.

Por lo tanto, tanto la Investigación como el Desarrollo de productos tienen cabida en su empresa.

La I+D es uno de los pilares fundamentales de Johnson & Johnson y una expresión directa de nuestro compromiso con los pacientes. Innovar no significa solo descubrir nuevas moléculas o desarrollar nuevas tecnologías, sino intentar responder a necesidades médicas aún no resueltas y ofrecer mejores opciones a quienes conviven con enfermedades graves. Esa apuesta se refleja también en la magnitud de la inversión: en 2025, Johnson & Johnson destinó alrededor de 14.700 millones de dólares a I+D, una cifra que muestra hasta qué

Desde el centro de Toledo lideramos la química médica en las fases iniciales de proyectos globales, especialmente en neurociencias, oncología e inmunología.

punto la innovación forma parte esencial de nuestra estrategia. Pero, más allá de los números, la I+D está directamente conectada con nuestro credo corporativo: nuestra primera responsabilidad es con los pacientes, los profesionales sanitarios y todas las personas que utilizan nuestros productos y servicios. Por eso investigamos, colaboramos e invertimos a largo plazo: para que la ciencia pueda traducirse en soluciones con un impacto real.

¿Podría comentarnos, más concretamente, en qué líneas de innovación están trabajando actualmente?

Actualmente, las líneas de investigación de Johnson & Johnson Innovative Medicine se concentran en algunas de las áreas de mayor necesidad médica, como oncología, inmunología, neurociencia, enfermedades cardiopulmonares y oftalmología especializada. En todas ellas buscamos desarrollar tratamientos con capacidad de cambiar de forma significativa el curso de enfermedades graves, combinando distintas aproximaciones científicas: desde moléculas pequeñas y anticuerpos hasta terapias celulares, edición genética, ARN interferente, nuevas formas de administración de fármacos y el uso de datos e inteligencia artificial para acelerar el descubrimiento.

Y en esas investigaciones ¿colaboran con universidades o centros de investigación?

Sí, la colaboración con universidades y centros de investigación es una parte esencial de la historia del centro de Toledo. Siempre hemos tenido claro que la innovación no ocurre solo dentro de nuestras paredes: muchas de las ideas más transformadoras nacen en la universidad, en grupos capaces de abordar nuevas preguntas con libertad y profundidad científica. A lo largo de los años, hemos trabajado con algunos de los químicos académicos más influyentes del mundo —como David MacMillan, John Hartwig, Véronique Gouverneur, Timothy Noël, Rubén Martín, Paolo Melchiorre o Daniele Leonori, entre otros— y esas colaboraciones han dado lugar a más de 100 publicaciones científicas. Personalmente, siempre he disfrutado mucho de esa interacción con la academia, porque obliga

muchas de las ideas más transformadoras nacen en la universidad, en grupos capaces de abordar nuevas preguntas con libertad y profundidad científica.

a mirar los problemas desde ángulos distintos y mantiene viva la curiosidad científica. Para nosotros, colaborar con la academia significa acceder antes a ciencia emergente, incorporar nuevas formas de trabajar y, al mismo tiempo, acercarnos al talento joven que liderará la investigación del futuro. Es una manera de mantener el centro conectado con la frontera de la ciencia y de asegurar que nuestras ideas se nutren también de lo que sucede fuera de la compañía.

Hablando de ese talento joven ¿qué perfiles profesionales emplea la empresa?

En el centro de investigación de Toledo buscamos perfiles científicos altamente especializados, principalmente licenciados y doctores en química orgánica, química médica o química farmacéutica, con una sólida formación experimental y, en muchos casos, experiencia postdoctoral internacional. Es importante que sean personas capaces de diseñar y sintetizar moléculas complejas, resolver problemas químicos difíciles y trabajar en equipos multidisciplinares junto a biólogos, farmacólogos, científicos de datos y expertos en desarrollo de fármacos. La experiencia del propio equipo refleja ese perfil: alrededor del 70 % de los empleados del centro de Toledo son doctores en química o farmacia y cerca del 40 % cuenta con experiencia postdoctoral en centros internacionales de referencia, lo que contribuye a una cultura científica muy sólida y diversa.

Al mismo tiempo, el perfil que necesitamos está evolucionando con la propia transformación de la I+D farmacéutica. Además de excelentes químicos médicos y sintéticos, cada vez valoramos más la experiencia en química computacional, inteligencia artificial aplicada al diseño molecular, automatización de procesos de laboratorio, química de alto rendimiento, análisis y purificación avanzados, química en flujo y nuevas modalidades como péptidos o degradadores de proteínas. En mi experiencia, los mejores científicos son aquellos que mantienen la curiosidad, la humildad intelectual y la capacidad de aprender de los demás. Buscamos científicos curiosos, colaborativos y con mentalidad internacional, capaces de combinar rigor químico con nuevas tecnologías para acelerar el ciclo de diseño, síntesis, ensayo, análisis y aprendizaje que permite que los proyectos progresen hacia posibles medicamentos.

Está claro que una buena nota media no lo es

En mi experiencia, los mejores científicos son aquellos que mantienen **la curiosidad, la humildad intelectual y la capacidad de aprender** de los demás.

todo hoy en día. ¿Qué competencias valoran más en esos futuros trabajadores?

Más allá de la formación técnica, las competencias que más valoramos son la curiosidad científica, el rigor experimental, la capacidad de aprender de forma continua y la orientación a resolver problemas complejos. En un entorno como el des-

cubrimiento de fármacos, no basta con ser un buen químico: buscamos personas capaces de interpretar datos, proponer hipótesis, tomar decisiones con criterio y comunicar sus ideas de forma clara. También valoramos mucho la creatividad, la calidad en la ejecución y la capacidad de combinar conocimiento químico con nuevas herramientas, como la automatización, la química computacional, el análisis de datos y la inteligencia artificial aplicada al diseño molecular.

Otra competencia fundamental es la colaboración y el trabajo en equipo. El trabajo en Toledo está plenamente integrado en una red internacional de investigación, por lo que necesitamos científicos capaces de trabajar con equipos de biología, farmacología, modelado computacional, análisis y purificación, y desarrollo de fármacos, tanto dentro como fuera de la compañía. He aprendido que los proyectos más complejos no avanzan por el brillo individual, sino por la calidad del trabajo colectivo. Buscamos personas con mentalidad abierta, flexibilidad para adaptarse a nuevas tecnologías y modalidades terapéuticas, y con una fuerte orientación al resultado final: científicos que entiendan que cada experimento forma parte de un esfuerzo colectivo para acercar mejores soluciones a los pacientes.

Mirando hacia el futuro, ¿cuáles cree que son los principales retos del sector químico a día de hoy?

Uno de los grandes retos de la industria farmacéutica es que trabajamos sobre una biología cada vez más compleja. Muchos de los nuevos proyectos se dirigen a dianas que hace unos años se consideraban muy difíciles, o incluso imposibles, de modular con medicamentos. Eso nos obliga a explorar nuevas regiones más amplias del espacio químico y a utilizar modalidades terapéuticas más sofisticadas, desde moléculas pequeñas tradicionales hasta péptidos, degradadores de proteínas, PROTACs, RIPTACs u otras estrategias de proximidad inducida. En este contexto, la química ya no consiste solo en "preparar moléculas", sino en elegir la estrategia molecular adecuada para cada problema biológico, integrando conocimiento químico, farmacológico, computacional y tecnológico.

El segundo gran reto es acelerar el proceso de descubrimiento de fármacos. La I+D farmacéutica sigue siendo un proceso largo, complejo y de alto riesgo, y por eso la integración de inteligencia artificial, automatización y química de alto rendimiento es cada vez más importante. La inteligencia artificial nos ayuda a analizar grandes volúmenes de datos, generar hipótesis y priorizar las moléculas con mayor probabilidad de éxito, mientras que la automatización permite ejecutar de forma más rápida, reproducible y eficiente tareas clave como la síntesis, el análisis y la purificación de compuestos. Juntas, ambas capacidades aceleran el ciclo de diseñar, sintetizar, analizar y aprender. No sustituyen al científico, sino que amplían su capacidad: liberan tiempo de tareas repetitivas, mejoran la calidad de los datos y permiten tomar decisiones más informadas. Me gusta pensar en estas tecnologías también como una forma de ampliar nuestra capacidad de hacer mejores preguntas, no solo de obtener respuestas más rápidas. El reto está en combinar esa potencia tecnológica con la intuición, la creatividad y el criterio del químico para generar moléculas con verdadero potencial terapéutico.

¿Cómo de preparada cree que está Johnson & Johnson para esos desafíos?

La empresa se está preparando reforzando aquello que será clave para el futuro del descubrimiento de fármacos: más in-

tegración entre disciplinas, más tecnología y más colaboración. A nivel global, Johnson & Johnson Innovative Medicine está impulsando capacidades en ciencia de datos, inteligencia artificial y salud digital para cambiar la forma en que se descubren y desarrollan nuevos medicamentos. La propia compañía habla de "inteligencia aumentada": no se trata de sustituir al científico, sino de combinar las nuevas metodologías de síntesis orgánica, la potencia de los datos, el aprendizaje automático, la química computacional y la biología para explorar mejor el enorme espacio químico, priorizar mejores moléculas y tomar decisiones más informadas. También es clave contar con talento capaz de moverse entre la ciencia de datos y la ciencia biomédica, porque los grandes avances surgirán precisamente de esa intersección.

En el centro de Toledo, esa preparación se traduce en evolucionar nuestra fortaleza histórica en química médica hacia un modelo cada vez más apoyado en capacidades computacionales, automatización y nuevas tecnologías de síntesis, análisis y purificación. Seguimos poniendo la química en el centro, pero la conectamos de forma más estrecha con la biología, los datos, la inteligencia artificial y la colaboración internacional. Nuestro objetivo es que Toledo continúe siendo un actor clave en las primeras etapas de la I+D farmacéutica global, con capacidad para adaptarse rápidamente a un entorno científico cambiante y aportar moléculas de alta calidad a proyectos internacionales. Después de tantos años aquí, sigo convencido de que el futuro del centro dependerá de mantener esa combinación de ambición científica, talento humano y capacidad de adaptación.

Seguimos poniendo **la química en el centro**, pero la conectamos de forma más estrecha con la biología, los datos, la inteligencia artificial y la colaboración internacional.

Agradecemos a Andrés A. Trabanco su disponibilidad para compartir con los lectores de Anales de Química la realidad de una industria en la que la ciencia, la innovación y la colaboración internacional convergen para dar respuesta a importantes retos sanitarios. Su testimonio ilustra cómo la química sigue desempeñando un papel esencial en la generación de conocimiento con impacto directo en la sociedad. Confiamos en que las experiencias y reflexiones compartidas por los protagonistas de esta serie de artículos sobre la realidad de la industria química contribuyan a fortalecer el diálogo entre academia e industria, mostrando cómo ambas son piezas fundamentales del ecosistema de innovación.



Andrés A. Trabanco

Director sénior, responsable global de Screening Triage y Química Temprana en Johnson & Johnson

C-e: atrabanc@its.jnj.com

ORCID: 0000-0002-4225-758X

Andrés A. Trabanco se doctoró en Química Orgánica por la Universidad de Oviedo y realizó estudios posdoctorales en el Imperial College of Science, Technology and Medicine de Londres. En 2000 se incorporó al centro de investigación de Janssen en Toledo, donde ha desarrollado su trayectoria en el ámbito del descubrimiento de nuevos fármacos, contribuyendo al avance de múltiples candidatos clínicos. Actualmente es Director Senior en Johnson & Johnson Innovative Medicine y lidera a nivel global el grupo de Screening, Triage & Early Chemistry. Es inventor en 64 solicitudes de patente y autor de más de 100 publicaciones científicas.

Aprender a explicar y diseñar con la química

Learning to explain and design with chemistry

Vicente Talanquer

Departamento de Química y Bioquímica, Universidad de Arizona, EE. UU.

PALABRAS CLAVE:

Razonamiento mecanístico
Pensamiento sistémico
Educación química
Explicación
Diseño

RESUMEN:

Los marcos actuales para la educación en ciencias enfatizan la necesidad de que los estudiantes integren conocimientos disciplinares con prácticas y formas de razonamiento que les permitan explicar fenómenos y diseñar soluciones para problemas relevantes. En este artículo se argumenta que la química escolar ofrece un contexto especialmente propicio para desarrollar y coordinar dos formas de razonamiento fundamentales para realizar esas tareas: el razonamiento mecanístico y el pensamiento sistémico. Se analizan las características, metas epistémicas y complementariedades de ambas formas de pensar, así como las razones conceptuales y epistemológicas que hacen de la química una disciplina particularmente adecuada para su desarrollo. Finalmente, se propone un modelo de instrucción orientado a promover su coordinación en el análisis y solución de problemas de interés científico, tecnológico y socioambiental.

KEYWORDS:

Mechanistic reasoning
Systems thinking
Chemistry education
Explanation
Design

ABSTRACT:

Contemporary science education frameworks emphasize the need for students to integrate disciplinary knowledge with practices and modes of reasoning that enable them to explain phenomena and design solutions to relevant problems. This article argues that school chemistry provides a particularly productive context for developing and coordinating two fundamental forms of reasoning to engage in those tasks: mechanistic reasoning and systems thinking. The paper analyzes the characteristics, epistemic goals, and complementarities of these reasoning approaches, as well as the conceptual and epistemological reasons why chemistry is especially well suited to foster their development. Finally, an instructional model is proposed to support their coordination in the analysis of phenomena and the design, implementation, and evaluation of solutions to scientific, technological, and socio-environmental challenges.

Introducción

Los problemas socioambientales que enfrentan las sociedades contemporáneas requieren ciudadanos capaces de comprender fenómenos complejos y profesionales preparados para diseñar, implementar y evaluar posibles soluciones.^[1-4] Afrontar estos desafíos demanda individuos que no solo posean conocimientos fundamentales de química y ciencias en general, sino que puedan utilizarlos para explicar fenómenos, predecir comportamientos e intervenir de manera informada sobre sistemas naturales y tecnológicos.^[5-6] Entre las formas de razonamiento que resultan especialmente relevantes para alcanzar estos objetivos destacan el razonamiento mecanístico y el pensamiento sistémico.^[7,8]

El razonamiento mecanístico es una forma de pensar que permite generar explicaciones y hacer predicciones sobre fenómenos de interés a partir de la identificación de los componentes relevantes de un sistema, así como de sus propiedades, interacciones, actividades y organización en el espacio y el tiempo.^[9] Este tipo de razonamiento se basa en la construcción de explicaciones causales que dan cuenta de cómo las propiedades y comportamientos observados emergen de las interacciones dinámicas entre las partes que conforman el sistema.

Por su parte, el pensamiento sistémico permite comprender cómo las interacciones entre los componentes de un sistema son condicionadas por restricciones, fronteras, flujos y ciclos de retroalimentación, así como analizar cómo estos factores influyen en su comportamiento, estabilidad y capacidad de adaptación.^[10] Esta forma de razonar resulta especialmente útil para anticipar consecuencias, identificar puntos de intervención y diseñar y evaluar estrategias orientadas a modificar, controlar u optimizar el funcionamiento de un sistema.

Estas dos formas de pensar comparten diversas estrategias y elementos de razonamiento, entre ellos la identificación de componentes relevantes, sus propiedades, interacciones y organización. Sin embargo, difieren en sus metas epistémicas. Mientras el razonamiento mecanístico se orienta a explicar cómo se producen los fenómenos observados, el pensamiento sistémico se enfoca en comprender cómo se regulan, modifican o transforman esos fenómenos dentro de un contexto más amplio, y cómo pueden intervenir para alcanzar determinados objetivos.^[11]

En este artículo se argumenta que la química escolar constituye un contexto particularmente propicio para desarrollar el razonamiento mecanístico y el pensamiento sistémico, así como para enseñar a los estudiantes a coordinar ambas formas de

razonamiento al abordar problemas que demandan tanto explicar fenómenos como diseñar estrategias para intervenir sobre ellos. Para sustentar esta idea, comenzaremos analizando las características fundamentales de cada una de estas formas de pensar.

Razonamiento mecanístico

Aprender a razonar mecanísticamente es de gran utilidad para los estudiantes porque les permite ir más allá de la simple descripción de los fenómenos para realizar inferencias, construir explicaciones y generar predicciones sobre su comportamiento.^[12] Esta forma de pensar facilita la conexión entre eventos y procesos que ocurren a diferentes escalas, desde niveles submicroscópicos hasta niveles macroscópicos.^[9] Asimismo, ayuda a razonar cualitativa y cuantitativamente sobre cambios que tienen lugar en el espacio y en el tiempo, y prepara a los estudiantes para construir argumentos fundamentados en evidencia y conocimiento científico, así como para evaluar críticamente explicaciones alternativas sobre un mismo fenómeno.

Russ y sus colaboradores han propuesto un conjunto de elementos que caracterizan la aplicación del razonamiento mecanístico al análisis de fenómenos naturales.^[7] Consideremos, por ejemplo, la explicación de por qué la acidez del agua de un lago aumenta cuando se disuelve dióxido de carbono (CO_2) en ella. Uno de los primeros pasos consiste en identificar las condiciones bajo las cuales ocurre el proceso, por ejemplo, a temperatura y presión constantes. Posteriormente, se reconocen las entidades relevantes que participan en el fenómeno, en este caso las moléculas de agua (H_2O) y dióxido de carbono (CO_2), así como las propiedades que hacen posible sus interacciones. Por ejemplo, las moléculas de agua son polares y sus átomos de oxígeno, con carga parcial negativa, son atraídos por el átomo de carbono del CO_2 , que posee una carga parcial positiva. Con base en esta información, se construye una explicación causal que describe las actividades e interacciones que ocurren entre las entidades identificadas y cómo su organización en el espacio y el tiempo produce el fenómeno observado. En este caso, la interacción entre las moléculas conduce a la formación de ácido carbónico (H_2CO_3), el cual se disocia parcialmente en solución, incrementando la concentración de iones hidronio (H_3O^+) y, en consecuencia, la acidez del agua.

De forma general, al razonar mecanísticamente (a) se analiza lo que ocurre en un nivel de organización más fundamental que el del fenómeno observado; (b) se identifican las entidades, propiedades e interacciones relevantes en ese nivel; y (c) se construye una explicación causal que muestra cómo la organización y actividad de esos elementos producen el fenómeno de interés.^[13]

Pensamiento sistémico

Mientras el razonamiento mecanístico enfatiza la arquitectura causal que explica cómo se producen los fenómenos, el pensamiento sistémico se enfoca en comprender las condiciones y procesos que influyen en su comportamiento y evolución.^[10,14] Esta forma de pensar ayuda a los estudiantes a reconocer cómo las interacciones entre múltiples elementos generan patrones colectivos y cómo dichos patrones pueden verse afectados por cambios en el sistema o en su entorno. Así, los estudiantes desarrollan las capacidades de analizar relaciones de interdependencia, anticipar consecuencias e identificar oportunidades de intervención, habilidades esenciales para enfrentar desafíos complejos como el cambio climático o la acidificación de los océanos.

Varios autores han propuesto un conjunto de elementos que caracterizan la aplicación del pensamiento sistémico al análisis de fenómenos y problemas complejos.^[15-16] Imaginemos, por ejemplo, que nos interesa controlar los cambios de pH producidos por la disolución de óxidos gaseosos en el lago antes mencionado. En este caso, uno de los primeros pasos consiste en definir el sistema de interés y establecer sus fronteras, identificando los elementos y procesos relevantes tanto dentro como fuera de él. Por ejemplo, además del agua del lago, podrían considerarse las emisiones atmosféricas de dióxido de carbono y óxidos de azufre y nitrógeno, las corrientes de entrada y salida de agua, la composición química del suelo circundante, la presencia de organismos acuáticos y las actividades humanas que afectan al ecosistema. Posteriormente, se analizan las relaciones entre estos componentes, los flujos de materia y energía que los conectan, y los factores que regulan o limitan su comportamiento. A partir de este análisis, es posible identificar ciclos de retroalimentación, anticipar las consecuencias de distintas perturbaciones y reconocer posibles puntos de intervención. Por ejemplo, la reducción de emisiones contaminantes, el control de la escorrentía o el aumento de la capacidad amortiguadora del sistema pueden contribuir a disminuir las variaciones de pH y sus efectos sobre el ecosistema.

De forma general, al pensar sistémicamente (a) se delimita el sistema de interés y se identifican las restricciones, flujos, retroalimentaciones y factores externos que condicionan su comportamiento; (b) se analiza cómo estos elementos influyen en las interacciones entre los componentes del sistema; y (c) se evalúa cómo cambios en dichas condiciones pueden alterar su funcionamiento, estabilidad o capacidad de adaptación. Este análisis permite anticipar consecuencias e identificar oportunidades para diseñar e implementar intervenciones orientadas a alcanzar determinados objetivos.

El papel de la química

El razonamiento mecanístico y el pensamiento sistémico desempeñan un papel fundamental en las ciencias y las ingenierías. En este artículo se argumenta que la química escolar ofrece un contexto particularmente rico para desarrollar ambas formas de razonamiento y favorecer su coordinación. Por un lado, permite a los estudiantes explorar fenómenos que abarcan desde sistemas relativamente simples hasta situaciones de gran complejidad. Por otro, combina objetivos orientados tanto a la explicación de fenómenos como al diseño, control y optimización de procesos y sistemas químicos.

A) Argumento conceptual

La química estudia sistemas constituidos por entidades que interactúan dinámicamente en múltiples niveles de organización, desde átomos y moléculas hasta células, materiales y sistemas ambientales.^[6,17] Esta diversidad ofrece oportunidades excepcionales para que los estudiantes desarrollen progresivamente el razonamiento mecanístico mediante el análisis de fenómenos cuya complejidad aumenta de manera gradual.

En el estudio de sistemas relativamente simples, como los átomos, los estudiantes pueden construir explicaciones basadas en un conjunto reducido de componentes e interacciones. Por ejemplo, pueden explicar por qué el tamaño de un átomo disminuye cuando pierde un electrón a partir de las fuerzas electrostáticas que actúan entre electrones y protones. A nivel molecular, estas mismas ideas permiten explicar por qué una molécula de agua posee una geometría angular o presenta polaridad. Conforme se avanza hacia sistemas más complejos, los estudiantes pueden relacionar propiedades macroscópicas con

interacciones microscópicas, como al explicar diferencias en la rigidez de una membrana celular a partir de la estructura de sus componentes y las fuerzas intermoleculares presentes. De manera similar, el análisis de las interacciones entre múltiples partículas permite explicar y predecir propiedades como los puntos de ebullición, la solubilidad o la viscosidad relativas de distintas sustancias.

Esta progresión brinda múltiples oportunidades para que los estudiantes aprendan a construir explicaciones causales cada vez más sofisticadas utilizando un conjunto relativamente limitado de principios fundamentales. Asimismo, les permite apreciar cómo nuevas propiedades y comportamientos surgen conforme aumenta el nivel de organización de los sistemas estudiados.^[18-19] Por ejemplo, la capacidad de enlace de un átomo puede explicarse a partir de la organización y comportamiento de partículas subatómicas. La geometría y polaridad molecular emergen de la disposición e interacción de los átomos enlazados. A escalas mayores, propiedades como la fluidez de una membrana celular o el punto de ebullición de una sustancia resultan de la acción colectiva de un gran número de moléculas en interacción. De esta manera, los estudiantes aprenden a relacionar fenómenos observables con procesos que ocurren en niveles de organización subyacentes.

El análisis de sistemas químicos constituidos por múltiples partículas en interacción también ofrece oportunidades valiosas para introducir y desarrollar conceptos estrechamente relacionados con el pensamiento sistémico dentro de explicaciones de carácter mecanístico.^[20] Por ejemplo, explicar la evaporación de un líquido requiere reconocer variaciones estadísticas en la distribución de energías y velocidades de las partículas. El estudio de los equilibrios químicos permite analizar cómo los sistemas responden a perturbaciones e introducir la idea de procesos de retroalimentación que favorecen la estabilidad del sistema. Asimismo, fenómenos como la formación de neblina durante la expansión adiabática del aire abren la puerta a discutir fronteras, intercambios con el entorno y restricciones que condicionan la evolución de un sistema. De esta manera, la química permite familiarizar a los estudiantes con conceptos fundamentales para el pensamiento sistémico a partir de fenómenos relativamente sencillos y accesibles.

En general, la química escolar ofrece múltiples contextos, desde sistemas relativamente simples hasta fenómenos de gran complejidad, en los que el razonamiento mecanístico puede desarrollarse de manera progresiva. Asimismo, brinda oportunidades para introducir muchos de los conceptos asociados al pensamiento sistémico en sistemas relativamente simples antes de enfrentarse a problemas socioambientales complejos. Estas características convierten a nuestra disciplina en un contexto especialmente propicio para el desarrollo articulado de ambas formas de razonamiento.

B) Argumento epistemológico

Una de las características distintivas de la química es su doble orientación hacia la comprensión y la transformación del mundo material.^[21] Además de buscar explicar la composición, estructura y comportamiento de la materia, la química persigue activamente el desarrollo de estrategias para modificarla, controlarla y aprovecharla con fines específicos. Por ello, diversos autores la han caracterizado como una tecnociencia en la que la construcción de modelos y teorías coexiste con el diseño de métodos para analizar y sintetizar sustancias, controlar sus transformaciones y optimizar procesos de interés científico, tecnológico y social.^[21-22]

Esta combinación de metas explicativas y de diseño no solo crea oportunidades para desarrollar el razonamiento mecanístico y el pensamiento sistémico, sino que con frecuencia exige su coordinación al abordar problemas que requieren comprender fenómenos, diseñar soluciones, implementarlas y evaluar sus resultados. En este contexto, explicar, diseñar y actuar dejan de ser actividades independientes para convertirse en prácticas complementarias que se enriquecen mutuamente.

Por ejemplo, al sintetizar un material polimérico en el laboratorio, los estudiantes pueden explicar la formación del producto a través del mecanismo de reacción, así como diseñar, implementar y evaluar estrategias para incrementar el rendimiento, reducir el tiempo de reacción, minimizar la generación de residuos o disminuir el consumo energético del proceso. En este tipo de situaciones, las preguntas de interés evolucionan naturalmente desde “¿cómo se produce este fenómeno?” hacia “¿cómo puede modificarse, controlarse u optimizarse?”, creando un contexto propicio para coordinar ambas formas de razonamiento.

Adicionalmente, a través de la exploración de diversos sistemas y fenómenos químicos, los estudiantes pueden aprender no solo a coordinar el razonamiento mecanístico y el pensamiento sistémico, sino también a reconocer las distintas metas epistémicas de cada uno. Mientras el razonamiento mecanístico permite explicar y predecir cómo se producen los fenómenos observados, el pensamiento sistémico facilita comprender las condiciones que influyen en su comportamiento, identificar oportunidades para modificarlo y anticipar las consecuencias de distintas decisiones o soluciones de diseño.

Una propuesta de coordinación

El desarrollo y la coordinación del razonamiento mecanístico y el pensamiento sistémico pueden promoverse mediante un modelo de instrucción que haga explícitos los procesos involucrados en la construcción de explicaciones y en el diseño, implementación y evaluación de soluciones. El modelo propuesto se organiza en tres etapas (Figura 1):^[11]

- A. Exploración mecanística
- B. Enmarcamiento sistémico
- C. Diseño y revisión coordinados

Estas etapas no deben entenderse como compartimentos aislados, sino como momentos complementarios dentro de un proceso iterativo de aprendizaje. A continuación, se presentan los propósitos y actividades principales asociados con cada una de ellas.

A) Exploración mecanística

La primera fase se centra en construir una explicación causal del fenómeno de interés. Imaginemos que el reto consiste en diseñar una pila de limón capaz de generar al menos 2 V utilizando materiales de bajo costo y bajo impacto ambiental.

^[23] En esta etapa, los estudiantes buscan explicar cómo se genera la corriente eléctrica en el sistema. Para ello identifican los componentes relevantes de la pila, como los electrodos metálicos, el jugo de limón y los conductores eléctricos. Posteriormente analizan las propiedades e interacciones que hacen posible el funcionamiento del dispositivo, por ejemplo, las reacciones de oxidación y reducción que ocurren en los electrodos y el movimiento de cargas a través del sistema. Con base en esta información construyen una explicación causal que describe cómo las transferencias de electrones y el transporte de iones dan lugar a una diferencia de potencial eléctrico observable.

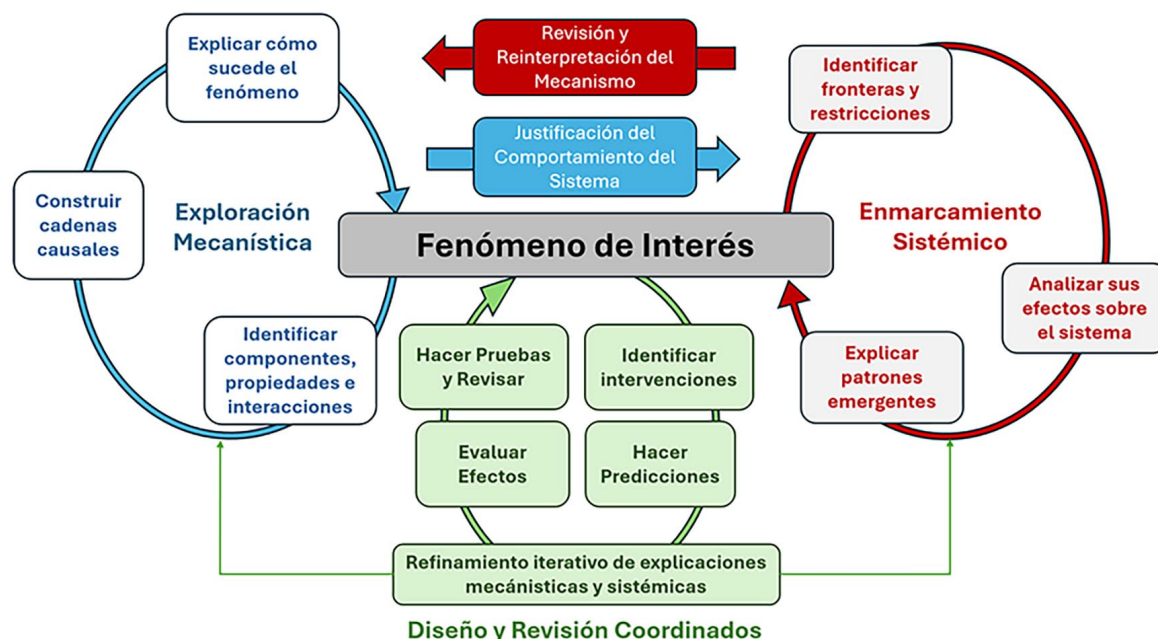


Figura 1. Diagrama del modelo de coordinación del razonamiento mecanístico y el pensamiento sistémico.

B) Enmarcamiento sistémico

Una vez construido el modelo mecanístico básico, los estudiantes amplían el análisis para identificar factores que condicionan el funcionamiento del sistema. En el caso de la pila de limón, esto implica considerar variables como la naturaleza de los metales utilizados como electrodos, la acidez del limón, la distancia entre los electrodos, el tamaño del fruto, el número de celdas conectadas en serie o paralelo, y los requerimientos energéticos del dispositivo que se desea alimentar. Los estudiantes analizan cómo estos factores limitan o favorecen el desempeño de la pila y cómo interactúan entre sí. También pueden extender las fronteras del sistema para considerar aspectos relacionados con el costo de los materiales, su disponibilidad, seguridad e impacto ambiental. El objetivo es comprender cómo las condiciones bajo las cuales opera la pila influyen en su comportamiento y en la viabilidad de distintas alternativas de diseño.

C) Diseño y revisión coordinados

En la tercera fase, los estudiantes coordinan las perspectivas mecanística y sistémica para diseñar, implementar y evaluar soluciones. Por ejemplo, pueden proponer incrementar el voltaje conectando varias celdas en serie, aumentar la acidez del medio para favorecer ciertas reacciones electroquímicas o seleccionar materiales alternativos para los electrodos. El razonamiento mecanístico les permite anticipar cómo estas modificaciones afectarán los procesos responsables de la generación de corriente eléctrica. El pensamiento sistémico les ayuda a evaluar cómo dichas decisiones afectan simultáneamente el costo, la seguridad, la disponibilidad de materiales, la durabilidad del dispositivo y su impacto ambiental. Los diseños propuestos se construyen y ponen a prueba experimentalmente, utilizando los resultados obtenidos para revisar supuestos, comparar alternativas y refinar iterativamente la solución desarrollada. Este proceso permite que explicar el funcionamiento de la pila y diseñar una mejor pila se conviertan en actividades mutuamente dependientes.

Conclusiones

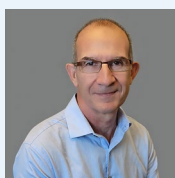
Los marcos y estándares contemporáneos para la educación en ciencias enfatizan la necesidad de que los estudiantes integren ideas centrales de las disciplinas con prácticas y formas de razonamiento que les permitan generar explicaciones y diseñar soluciones para problemas relevantes.^[24-26] La tesis central de este artículo es que la química escolar ofrece un contexto especialmente favorable para alcanzar estos objetivos. Por un lado, brinda oportunidades para desarrollar progresivamente el razonamiento mecanístico y el pensamiento sistémico a través del análisis de sistemas que abarcan múltiples niveles de organización. Por otro, su orientación simultánea hacia la comprensión y la transformación del mundo material crea contextos auténticos en los que los estudiantes pueden aprender a coordinar ambas formas de razonamiento al explicar fenómenos, diseñar soluciones, implementarlas y evaluar sus consecuencias.

El logro de estos objetivos de aprendizaje se facilita cuando la enseñanza se ancla en el análisis de fenómenos o problemas de interés para los estudiantes, las comunidades en las que viven o los grandes retos planetarios que enfrentamos como sociedad.^[27] De hecho, los conocimientos y formas de pensar y actuar en química son de utilidad para comprender desde por qué y cómo blanquear mejor la ropa hasta diseñar estrategias para reducir la contaminación ambiental, contribuir a mitigar el calentamiento global y el cambio climático, o evaluar métodos de purificación de agua económicos y accesibles para comunidades remotas. Todas estas situaciones pueden abordarse mediante estrategias similares a las descritas en este trabajo.

De esta manera, promover el desarrollo articulado del razonamiento mecanístico y el pensamiento sistémico puede contribuir a formar estudiantes mejor preparados para comprender la complejidad de los sistemas naturales y tecnológicos, así como para participar de manera informada y responsable en la búsqueda de soluciones a los desafíos científicos, tecnológicos y socioambientales del siglo XXI.^[3,4]

Bibliografía

- [1] C. H. Middlecamp, M. M. Kirchhoff, P. Mahaffy, K. Kummerer, *Chemistry Education for a Sustainable Future*, Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK, **2025**, <https://doi.org/10.1039/9781837676576>.
- [2] J. Garcia-Martinez, E. Serrano-Torregrosa, *The Chemical Element: Chemistry's Contribution to Our Global Future*, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, **2011**, <https://doi.org/10.1002/9783527635641>.
- [3] R. W. Tytler, M. C. Monroe, C. Eames, P. J. White, *Res. Sci. Ed.* **2025**, *55*, 1129-1147, <https://doi.org/10.1007/s11165-025-10276-8>.
- [4] T. D. Sadler, Z. Xu, D. Fortus, *Int. J. Sci. Educ.* **2025**, *47*, 2093-2112, <https://doi.org/10.1080/09500693.2025.2490777>.
- [5] H. Sevan, V. Talanquer, *Chem. Educ. Res. Pract.* **2014**, *15*, 10-23, <https://doi.org/10.1039/c3rp00111c>.
- [6] V. Talanquer, *Unlocking Chemical Thinking: Reimagining Chemistry Teaching and Learning*, Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK, **2026**, <https://doi.org/10.1039/9781837072538>.
- [7] R. S. Russ, R. E. Scherr, D. Hammer, J. Mikeska, *Sci. Educ.* **2008**, *92*, 499-525, <https://doi.org/10.1002/sce.20264>.
- [8] M. Orgill, S. York, J. MacKellar, *J. Chem. Educ.* **2019**, *96*, 2720-2729, <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.9b00169>.
- [9] P. Machamer, L. Darden, C. F. Craver, *Philosophy of Science* **2000**, *67*, 1-25, <https://doi.org/10.1086/392759>.
- [10] B. Richmond, *Syst. Dyn. Rev.* **1993**, *9*, 113-133, <https://doi.org/10.1002/sdr.4260090203>.
- [11] V. Talanquer, *Chem. Educ. Res. Pract.* **2026**, <https://doi.org/10.1039/d6rp00160b>.
- [12] M. Haskel-Ittah, P. K. Illari, F. Russo, *Sci. & Educ.* **2026**, *35*, 7-28, <https://doi.org/10.1007/s11191-025-00676-7>.
- [13] C. Krist, C. V. Schwarz, B. J. Reiser, *J. Learn. Sci.* **2019**, *28*, 160-205, <https://doi.org/10.1080/10508406.2018.1510404>.
- [14] O. B.-Z. Assaraf, N. Orion, *J. Res. Sci. Teach.* **2005**, *42*, 518-560, <https://doi.org/10.1002/tea.20061>.
- [15] N. Orion, J. C. Libarkin, en *Handbook of Research on Science Education*, Vol. III (Eds.: N. G. Lederman, D. L. Zeidler, J. S. Lederman), Roudlege, New York, **2023**, pp. 692-716, <https://doi.org/10.4324/9780367855758-26>.
- [16] R. Mehren, A. Rempfler, J. Buchholz, J. Hartig, E. M. Ulrich-Riedhammer, *J. Res. Sci. Teach.* **2018**, *55*, 685-711, <https://doi.org/10.1002/tea.21436>.
- [17] H. Tümay, *J. Chem. Educ.* **2023**, *100*, 3925-3933, <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.3c00474>.
- [18] P. L. Luisi, *Found. Chem.* **2002**, *4*, 183-200, <https://doi.org/10.1023/a:1020672005348>.
- [19] H. Tümay, *Chem. Educ. Res. Pract.* **2016**, *17*, 229-245, <https://doi.org/10.1039/c6rp00008h>.
- [20] J. Saba, H. Hel-Or, S. T. Levy, *Instruc. Sci.* **2023**, *51*, 475-507, <https://doi.org/10.1007/s11251-023-09624-w>.
- [21] B. Bensaude-Vincent, J. Simon, *Chemistry — The Impure Science*, Imperial College Press, London, **2008**, <https://doi.org/10.1142/p569>.
- [22] J. A. Chamizo, *Found. Chem.* **2013**, *15*, 157-170, <https://doi.org/10.1007/s10698-013-9179-z>.
- [23] V. Talanquer, *Alambique* **2024**, *115*, 34-41.
- [24] OECD, PISA 2025 Science Framework, disponible en <https://pisa-framework.oecd.org/science-2025/>, **2025** (consultado: 16/07/2026).
- [25] National Research Council, Next Generation Science Standards, The National Academies Press, Washington, DC, 2013, <https://doi.org/10.17226/18290>.
- [26] T. R. Kelley, J. G. Knowles, *Int. J. STEM. Educ.* **2016**, *3*, 11, <https://doi.org/10.1186/s40594-016-0046-z>.
- [27] S. Adipat, *Front. Educ.* **2024**, *9*, 1346403, <https://doi.org/10.3389/feduc.2024.1346403>.



Vicente Talanquer

Departamento de Química y Bioquímica,
Universidad de Arizona, Tucson

C-e: vicente@arizona.edu

ORCID: 0000-0002-5737-3313

Vicente Talanquer es Profesor Distinguido en la Universidad de Arizona, donde su investigación se centra en el razonamiento estudiantil, el aprendizaje de la química y el diseño de enfoques educativos innovadores. Ha publicado más de 170 trabajos académicos y recibido varios reconocimientos por sus contribuciones a la enseñanza y aprendizaje de la química. Entre ellos destacan el RSC Nyholm Prize for Education (2025) y el ACS Award for Achievement in Research for the Teaching & Learning of Chemistry (2021). En la actualidad es editor asociado del *Journal of Chemical Education* y editor de la serie RSC Advances in Chemistry Education.

Percepciones en la implementación de proyectos de ABP en un currículo de química avanzada

Perceptions in the implementation of a PBL projects in an advanced placement chemistry curriculum

Kermin J. Martínez-Hernández^{1,*} y Marie LoRe-Geigel²

¹ Facultad de Química, Universidad de St. John Fisher, Rochester, Nueva York, EE. UU.

² Escuela Secundaria Pittsford Sutherland, Pittsford, Nueva York, EE. UU.

PALABRAS CLAVE:

Aprendizaje Basado en Problemas (ABP)
Implementación en currículo de química avanzada
Investigación científica en escuela secundaria
Desarrollo de habilidades blandas
Trabajo en equipo

RESUMEN:

Durante seis años se evaluó la implementación del Aprendizaje Basado en Problemas (ABP) en el currículo de química avanzada de una escuela secundaria mediante un estudio de métodos mixtos concurrentes. A través de encuestas con preguntas abiertas y escala de Likert, se recopilaban las percepciones de alumnos y docentes. Los estudiantes valoraron la experiencia como positiva, amena, divertida y desafiante pero gratificante. Tanto alumnos como maestros coincidieron en que el ABP potencia el desarrollo de habilidades blandas cruciales para la universidad, incluyendo la investigación, el trabajo en equipo y la comunicación oral y escrita. El estudio concluye que esta metodología fomenta procesos cognitivos independientes y el aprendizaje colaborativo, preparando eficazmente a los estudiantes para el mundo real.

KEYWORDS:

Problem-Based Learning (PBL)
Implementation in AP Chemistry curriculum
Scientific research in high school
Development of soft skills
Teamwork

ABSTRACT:

For six years, the implementation of Problem-Based Learning (PBL) projects in an advanced high school chemistry curriculum was evaluated using a concurrent mixed-methods study. Through surveys featuring open-ended questions and a Likert scale, the perceptions of both students and teachers were collected. Students rated the experience as positive, engaging, fun, and challenging yet rewarding. Both students and teachers agreed that PBL enhances the development of soft skills crucial for college, including research, teamwork, and oral and written communication. The study concludes that this methodology fosters independent cognitive processes and collaborative learning, effectively preparing students for the real world.

Introducción

En el ámbito de la educación secundaria, especialmente dentro de los cursos de química avanzada en los Estados Unidos, los educadores se enfrentan de manera persistente a la rigidez y densidad de los programas estandarizados orientados exclusivamente a la aprobación de exámenes avanzados nacionales al finalizar el semestre.^[1-3] Esta estructura tradicional suele limitar las oportunidades de los discentes para involucrarse en prácticas científicas auténticas y contextualizadas una vez terminado la administración de los exámenes en el último mes académico.^[2,4] Con el propósito de mitigar esta brecha, el Aprendizaje Basado en Problemas (ABP), metodología nacida originalmente en las facultades de medicina y luego adaptada a escuelas primarias y secundarias, se presenta como una alternativa instruccional idónea.^[5-7]

El ABP altera la dinámica convencional: la adquisición de conceptos no precede a la práctica, sino que el aprendizaje se activa a partir de un problema complejo y abierto del mun-

do real que los alumnos deben resolver.^[8-13] A través de este enfoque, el estudiante transita de ser un receptor pasivo para convertirse en el protagonista y diseñador de su propia ruta de indagación, mientras que el docente abandona la instrucción directa para transformarse en un facilitador metacognitivo.^[14,15]

La investigación auténtica es fundamental para lograr un aprendizaje significativo y el ABP puede utilizarse con el fin de que los estudiantes diseñen sus propios problemas realistas y poco estructurados (*ill-structured*).^[14-19] Ofrecer a los alumnos entornos de aprendizaje auténticos que supongan un desafío cognitivo —y donde puedan aplicar la indagación, pensar de forma crítica y resolver problemas— resulta crucial para permitirles explorar sus propios intereses y despertar su curiosidad por resolver un problema. Como modelo de instrucción, el ABP es plenamente coherente con los principios del constructivismo en la educación científica.^[19,20]

CÓMO CITAR: K. J. Martínez-Hernández, M. L. Geigel. *An. Quím. RSEQ* 2026, 122, 244-250, https://doi.org/10.62534/rseq.aq.2141

* C-e: kmartinez-herandez@sjf.edu

Marco teórico

Este estudio se fundamenta epistemológicamente en los principios del constructivismo, el cual postula que el conocimiento no es un ente absoluto transferido por el educador, sino una construcción interna mediada por las experiencias del sujeto y sus interacciones socioculturales.^[19-23] Bajo el lente constructivista, el ABP ofrece un entorno de aprendizaje auténtico donde la resolución de problemas de laboratorio no estandarizados promueve la disonancia cognitiva y la subsecuente acomodación conceptual, dotando de un significado real a las leyes e interacciones de la química.^[19,23]

Propósito e importancia del estudio

La presente investigación tuvo como propósito implementar y evaluar problemas de ABP de seis semanas de duración, ubicado estratégicamente en el último trimestre escolar. El ABP fue posterior a la administración del examen avanzado nacional e integrado en el currículo de química avanzada de una escuela secundaria en la región oeste de Nueva York, EE.UU. Las preguntas de investigación que guiaron de forma transversal el estudio fueron:

1. ¿Cuáles son las percepciones de estudiantes y maestros sobre la implementación de un proyecto de ABP en el currículo de química avanzada?
2. ¿Cuáles son los beneficios de desarrollo competencial que obtienen los estudiantes a partir de esta implementación?
3. ¿Cuál es el nivel de satisfacción de los estudiantes con respecto a su desempeño y al evento de cierre?
4. ¿Cuáles son las lecciones aprendidas derivadas de la gestión e implementación del programa?

Metodología

Diseño de la investigación

Se adoptó un diseño de métodos mixtos concurrentes.^[24-26] Aunque teóricamente ambos enfoques coexisten, la naturaleza exploratoria de las percepciones humanas otorgó un peso dominante al componente cualitativo, el cual fue validado empíricamente mediante la triangulación de datos estadísticos descriptivos cuantitativos.^[24,25] Los datos cualitativos se recopilaban tanto durante el proceso de implementación como al cierre del proyecto, proporcionando una comprensión más profunda de las percepciones estudiantiles sobre la experiencia de ABP. Finalmente, se seleccionó una muestra de conveniencia debido a que los estudiantes se encontraban inscritos en el mismo curso y compartían el mismo plan de estudios.

Contexto y participantes

El estudio se implementó en una escuela secundaria de manera ininterrumpida durante seis años. En la investigación participaron un total de 296 estudiantes inscritos en dos secciones del curso de química avanzada enseñado por dos maestras. Los estudiantes decidieron entre ellos los integrantes del grupo a un máximo de 4-6 estudiantes de acuerdo con el tema de interés para un total de 11-16 proyectos ABP independientes por año (para un total de 78 proyectos ABP durante los 6 años). La distribución de la muestra según el curso académico fue: segundo año (12.0%), tercer año (77.3%) y cuarto año (10.8 %). Había 150 estudiantes masculinos y 146 femeninos.

Logística e Implementación del proceso de ABP

- Fase 1: Capacitación e Introducción (Semanas 1-2): Conducción de un taller inicial de ABP. Capacitación de los alumnos en el uso de la matriz cognitiva "KWHLAQ, por

sus siglas en inglés", (¿Qué sé?, ¿Qué quiero saber?, ¿Cómo lo investigaré?, etc., ver ejemplo en Anexo 1). Formación de equipos heterogéneos de 3 a 4 integrantes y formulación de las propuestas de investigación seleccionadas autónomamente por los estudiantes.

- Fase 2: Filtro de Seguridad y Andamiaje (Semana 3): Revisión minuciosa por parte del docente de los diseños experimentales para asegurar el cumplimiento estricto de las normas de seguridad del laboratorio. Ajuste de procedimientos mediante cuestionamientos guía y establecimiento del calendario de entregas semanales (ver Anexos 2 y 3 para más detalles).
- Fase 3: Ejecución Experimental Intensiva (Semanas 4-6): Trabajo autónomo en el laboratorio escolar. El docente realizó un monitoreo diario y asistencia socioemocional ante la frustración por resultados no concluyentes. Los alumnos registraron sus bitácoras en *Google Drive* y redactaron diarios individuales de reflexión metacognitiva a través de la plataforma *Blackboard Course Sites*.
- Fase 4: Preparación de Pósteres y Presentaciones Orales para Simposio (Semana 6): Una vez los grupos de estudiantes terminaron sus ABP crearon un poster por grupo (ver Anexo 4 para el formato del poster). Las maestras y profesorado universitario revisaron todas las partes del poster siguiendo el método científico y sugirieron correcciones. A su vez, todos los miembros de cada grupo realizaron una revisión de pares en el proceso de crear el poster. Concluidos los pósteres, las maestras y el profesorado universitario se reunió para seleccionar una muestra de las mejores investigaciones ABP para que presentarán oralmente en el simposio. El simposio se realizó imitando el formato de una convención nacional, dos sesiones de pósteres (principio y final) con un intermedio de presentaciones orales (ver ejemplo de Programa de Simposio Científico en Anexo 5). Los pósteres recibieron revisión de pares y fueron evaluados por los otros grupos de estudiantes, maestros, padres, profesores universitarios y otros visitantes (ver fotos en Anexo 6). Durante el simposio los estudiantes socializaron con aperitivos y bebidas no alcohólicas con sus pares, padres y demás asistentes estableciendo redes de contactos entre ellos.

El rol del estudiante

El rol del estudiante en el proceso de ABP comienza con la identificación de un problema no estructurado y el establecimiento de una pregunta de investigación. Este proceso incluye los siguientes pasos: (a) investigar un tema de interés, (b) definir un problema, (c) diseñar una serie de experimentos, (d) analizar datos, (e) sacar conclusiones, (f) crear un póster y presentarlo, (g) realizar una presentación oral (si le corresponde), (h) completar un diario de reflexión semanal y (i) escribir un informe final sobre su proyecto. En la Figura 1 se presenta un cronograma completo del rol del estudiante durante las seis semanas de ABP. Los Anexos 1, 2, 3 y 4 proveen detalles en donde se proporcionaron plazos específicos y pautas a los estudiantes semanalmente a lo largo del proceso para evitar que se sintieran abrumados. Los estudiantes revisaron todo el proceso del método científico para resolver su problema realista y poco estructurado. Los profesores y el personal docente universitario brindaron retroalimentación a los estudiantes diariamente durante todo el proceso.

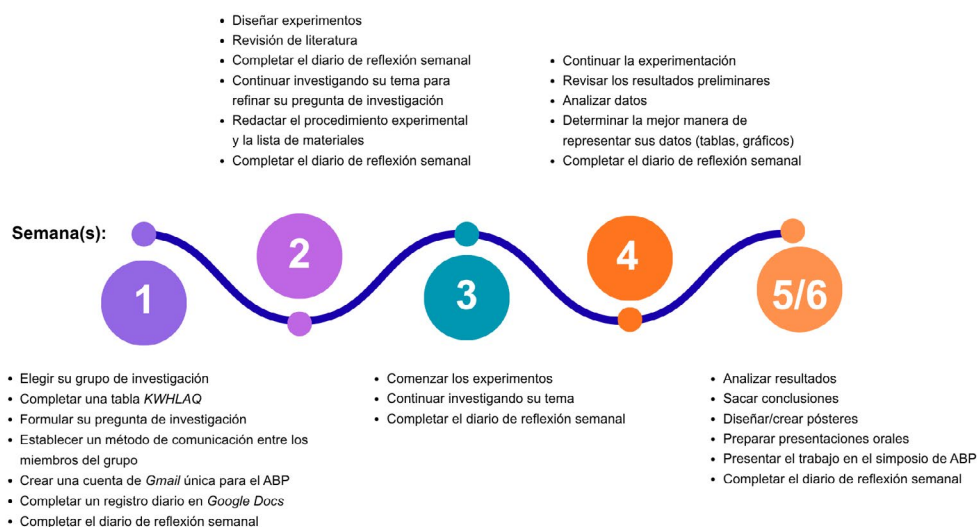


Figura 1. Cronograma del rol del estudiante.

El rol del profesorado universitario

Los profesores universitarios también desempeñaron un papel de facilitadores y asesores, pero, fundamentalmente, sirvieron como un pilar de soporte para la totalidad de la experiencia de ABP. Este equipo coadyuvó detrás de escena mediante la gestión de las plataformas virtuales, el aprovisionamiento de recursos económicos, la adquisición de suministros y reactivos especializados solicitados por los alumnos, y la asistencia técnica diaria vía correo electrónico a estudiantes y maestras. Asimismo, colaboraron activamente en la gestión de los problemas de investigación, tanto de forma presencial en el aula como vía correo electrónico, respondiendo diariamente a las dudas de los alumnos y maestras brindándoles orientación y apoyo constante.

Instrumentos de recolección de datos y consideraciones éticas

Se recopilaban tres fuentes esenciales de información: diarios de reflexión semanal de los estudiantes, diarios de seguimiento de los docentes y dos encuestas finales de diseño mixto (escala Likert y reactivos abiertos) administradas al culminar el proyecto y tras la realización del simposio público. El estudio se rigió estrictamente bajo el protocolo aprobado por el Comité de Revisión Institucional (IRB, Archivo No: 3447-052115-02) de la Universidad St. John Fisher, obteniendo los consentimientos informados correspondientes antes del inicio de la recolección.

Estrategias de análisis de datos

- **Análisis Cuantitativo:** Las respuestas ordinales de las encuestas Likert de 5 puntos (5 = Totalmente de acuerdo, 1 = Totalmente en desacuerdo) se compilaban y procesaron mediante estadística descriptiva (medias y desviaciones estándar).
- **Análisis Cualitativo:** Las respuestas abiertas y las reflexiones de docentes y alumnos se exportaron a la plataforma Dedoose®. Se aplicó una codificación abierta en cuatro niveles, aislando conceptos que emergieron de forma inductiva hasta agruparlos en temas y categorías de frecuencia conceptual.^[27-29]

Resultados

Análisis cuantitativo: áreas de la química seleccionadas por los estudiantes

La selección de temas en las áreas de la química en los proyectos de ABP fue decidida por los intereses de los grupos de estudiantes. Durante los 6 años de implementación, los 78

proyectos de investigación química analizados se concentraron principalmente en Química Alimentaria y Agrícola y Química Ambiental y Sostenibilidad (ambos 21.8%), seguidos por Química del Consumidor y Cuidado Personal (19.2%). En conjunto, estas tres áreas abarcan más del 62% del total de proyectos, destacando un fuerte enfoque práctico hacia productos cotidianos, el cuidado del medio ambiente y la nutrición. Las disciplinas restantes, como la física-química/energía, la ciencia de materiales y la bioquímica, representan el 38% restante con una distribución equilibrada de proyectos aplicados (Tabla 1).

Tabla 1. Resumen descriptivo de las áreas de la química seleccionada por los estudiantes en los proyectos de ABP.

Área general de la química	Frecuencia	Porcentaje (%)
Química alimentaria, de bebidas y agrícola	17	21.8
Química ambiental y sostenibilidad	17	21.8
Química del consumidor y cuidado personal	15	19.2
Energía, química física y electroquímica	12	15.4
Ciencia de materiales, química industrial y aplicada	11	14.1
Bioquímica y química medicinal	6	7.7

Algunos ejemplos de los temas dentro del área química alimentaria, de bebidas y agrícola incluyen: evaluación de antioxidantes, deterioro de alimentos, descafeinización del café y determinación de vitamina C en bebidas, capacidad amortiguadora del suelo y comparativa entre cultivos hidropónicos y en tierra. En el área de química ambiental y sostenibilidad se destacan: eficiencia de filtros comerciales, impacto de la lluvia ácida, micro plásticos, proliferación de algas y fracturación hidráulica (*hydrofracking*). En la química del consumidor y cuidado personal: formulaciones de champú, quitaesmaltes, bálsamo labial, fijadores de cabello, protectores solares, perfumes y blanqueamiento dental. En energía, química física y electroquímica: producción de biodiésel, celdas solares y eficiencia de combustión. En la ciencia de materiales, química industrial y

aplicada: adhesivos de consumo, lubricantes de alta eficiencia, mecanismos de adhesión inspirados en salamanquesas, retardantes de fuego, diseño de máquinas *Rube Goldberg* basadas en reacciones químicas, agentes espumantes y comportamiento de sales en agua. Finalmente, en la bioquímica y química medicinal: análisis de sustancias tóxicas, plomo, neurotransmisores (GABA, *gamma-aminobutyric acid*), ácido estomacal y efecto de metales en crecimiento bacteriano, electroporación celular y producción de aceite a partir de microalgas.

Análisis cuantitativo: percepciones de estudiantes

Los datos consolidados recopilados durante las encuestas post-ABP demostraron una evaluación altamente favorable por parte de los alumnos hacia la metodología (Tabla 2).

Tabla 2. Resumen estadístico descriptivo de la encuesta estudiantil post-ABP (Escala 1 a 5).

Reactivo: aprendizaje y motivación	Promedio	DE*
P6. El proyecto de ABP los involucró en actividades de aprendizaje interesantes.	4.50	0.63
P7. Los contenidos aprendidos durante el proyecto resultaron de su interés.	4.40	0.72
P12. Se sintieron motivados hacia el aprendizaje.	4.33	0.76
P13. Se involucraron activamente en su propio proceso educativo.	4.28	0.72
Reactivo: habilidades y desafío cognitivo		
P8. Los alumnos coincidieron en que requirieron aplicar un pensamiento de resolución de problemas a lo largo de todo el proyecto de ABP.	4.59	0.59
P9. Las actividades fueron agradables.	4.28	0.76
P11. El proyecto representó un desafío intelectual.	4.40	0.72
P17. Disfrutaron el desarrollo del proyecto.	4.39	0.81
P18. Se sintieron satisfechos con los logros alcanzados en el mismo.	4.46	0.66

*DE = desviación estándar

Análisis cuantitativo de la evaluación del simposio

El simposio de cierre congregó una muestra voluntaria de 324 asistentes (78.8% estudiantes, 14.8% padres de estudiantes y 6.5% autoridades del distrito, maestros y profesores universitarios). Los datos descriptivos de la Tabla 3 confirman que el evento colmó las expectativas globales de la comunidad.

Análisis cualitativo y aseveraciones teóricas

Percepciones de los estudiantes

El procesamiento inductivo de los testimonios literales (*verbatim excerpts*) dio origen a cinco macro-aseveraciones teóricas que caracterizan el impacto fenomenológico de la intervención:

- Aseveración 1: Percepción del Éxito en las Exposiciones. El 80.2% (n=202) de los estudiantes afirmó que sus exposiciones (orales o en póster) resultaron exitosas y de gran nivel. Los alumnos recalcaron que la intensa preparación previa y el rigor exigido disminuyeron el pánico escénico: "Siento que este proyecto salió mucho mejor de lo que

Tabla 3. Evaluación cuantitativa del simposio de ciencias de ABP por los asistentes.

Reactivo	Promedio	DE
P3. El simposio de ciencias cumplió con mis expectativas.	4.47	0.67
P4. Recomendaría la asistencia a este evento en el futuro.	4.48	0.76
P6. Agrado por el contenido científico exhibido.	4.41	0.72
P7. Satisfacción con el alcance y profundidad del simposio.	4.54	0.63
P8. Calidad formal de las presentaciones científicas.	4.53	0.64
P9. Evaluación positiva del formato del simposio.	4.48	0.76
P10. Adecuación de la duración total del evento.	4.18	0.81

había predicho. La presentación se llevó a cabo sin contratiempos y la audiencia se mostró muy interesada en la investigación que habíamos completado. Al final, el arduo trabajo valió la pena y nuestro proyecto fue un éxito (Año 1 – Estudiante 17)".

- Aseveración 2: Inventario de Competencias Adquiridas. La codificación identificó que el aprendizaje rebasó el marco conceptual de la química ordinaria, emergiendo competencias para el trabajo cooperativo (45.2%), destrezas de investigación de campo (44.0%), comunicación interpersonal (22.2%) y estrategias autónomas de resolución de problemas (14.7%) (Tabla 4). Los discentes valoraron el principio de aprender del error: "Creo que lo más valioso que aprendí al realizar este ABP fue la capacidad de trabajar en grupo, sin demasiada estructura ni ayuda por parte de las maestras. Fuimos capaces de descifrar por nuestra cuenta cómo queríamos llevar a cabo nuestros experimentos, aprendiendo de nuestros errores y mejorando nuestro procedimiento en cada intento. Diseñamos nuestra propia lista de materiales y desciframos cómo medir con precisión los datos necesarios para llegar a nuestra conclusión. Puede que la química real que aprendí en el ABP no se traslade directamente al mundo real, pero la habilidad de trabajar en equipo y proponer ideas fue sumamente valiosa (Año 6 – Estudiante 51)".
- Aseveración 3: El Valor Ecológico de la Sede Externa. El 76.6% validó positivamente que el simposio ocurriera fuera del aula de clases, indicando que confirió un tono profesional y formal (18.3%) que emulaba experiencias del mundo real (3.6%): "Me gustó que las presentaciones se llevaran a cabo fuera de la escuela secundaria *Sutherland* porque nos expuso a cómo sería una presentación más cercana a la vida real (fuera del entorno escolar tradicional). Cuando vayamos a la universidad, es posible que tengamos que hacer presentaciones similares a esta, por lo que ser capaces de hablar en un entorno desconocido nos dio una noción de cómo sería (Año 5 – Estudiante 34)". Una minoría (5.6%) reportó hacinamiento en las primeras sedes, lo que concuerda con la puntuación baja del reactivo P5 (3.89) e impulsó la migración hacia recintos de mayor envergadura.
- Aseveración 4: Transferibilidad Universitaria. El 90.9% enfatizó que el ABP constituyó un predictor clave de adaptación para la universidad: "De verdad creo que esta experiencia me preparará para los cursos universitarios. Planeo especializarme en el campo de la biología ambiental y/o

marina, y al ser ambos campos científicos, llevar a cabo un ABP para la clase de química me preparará para cuando tenga que realizar problemas similares en mis años universitarios. He aprendido mucho sobre cómo diseñar y completar un experimento, y este conocimiento será el motor que me impulse durante mis años en la universidad (Año 3 – Estudiante 16)". Sólo un 2.4% dudó de su utilidad, argumentando un interés vocacional por disciplinas no experimentales como la economía.

- Aseveración 5: Balance de la Experiencia. El proceso fue catalogado de forma masiva como desafiante pero gratificante (28.2%), valioso (24.6%) y divertido (24.6%), recomendando a futuras generaciones prestar atención a la elección del tema y evitar la procrastinación.

Tabla 4. Matriz de frecuencias de códigos cualitativos emergentes de los estudiantes.

Códigos Cualitativos Emergentes (aprendizaje y motivación)	Mención Relativa (%)
1. Habilidades de cooperación grupal	45.2
2. Metodología de la investigación científica	44.0
3. Comunicación asertiva y oratoria	22.2
4. Dominio temático específico (Química)	19.8
5. Habilidades de resolución de problemas	14.7
6. Autonomía y pensamiento independiente	12.3

Percepciones de las maestras

Los diarios cualitativos semanales de las dos maestras revelaron la complejidad de la gestión de la enseñanza bajo metodologías activas:

- Aseveraciones 6 y 7: Fluctuación de la Experiencia Emocional. La percepción docente fue positiva pero altamente sensible al progreso de los equipos, registrando picos de entusiasmo durante los descubrimientos de laboratorio y valles de frustración ante el estancamiento grupal.
- Aseveraciones 8-10: La Complejidad del Andamiaje y la Evaluación. Las principales funciones semanales radicaron en la planificación logística y la retroalimentación. El reto pedagógico más complejo fue cuantificar el desempeño individual dentro de un marco colectivo: "...Resulta difícil asignar calificaciones o puntos a estudiantes que se muestran displicentes y no han contribuido de manera equitativa a sus equipos (Año 4 – Maestra 1)".
- Aseveración 11: Maduración Profesional de la Práctica. Ambas docentes reportaron una evolución en sus competencias docentes, aprendiendo a formular preguntas abiertas de andamiaje y a desarrollar una paciencia estratégica para transferir el control y la autoría intelectual a los alumnos.

Discusión

La convergencia de datos cuantitativos y cualitativos demuestra que la intervención cumplió con la meta fundamental del estudio: proveer una experiencia de aprendizaje auténtica y rigurosa tras la conclusión del temario formal del examen de química avanzada. El alto grado de correlación cuali-cuantitativa (Tabla 5) permite validar la solidez metodológica de los hallazgos a través de una rigurosa triangulación metodológica.^[30]

Tabla 5. Matriz de triangulación mixta concurrente de resultados.

Categoría Cualitativa	Evidencia Cuantitativa (Likert)	Evidencia Cualitativa
Desafío Cognitivo	Q11 = 4.40 (alto reto)	"Desafiante pero gratificante"
Clima de Aula	Q17 = 4.39 (diversión)	"Experiencia divertida/amena"
Resolución Problemas	Q8 = 4.59 (alto demanda)	"Ajuste de diseño por error"
Satisfacción de Metas	Q3 = 4.47 (expectativas)	"Presentación fluida y exitosa"

Los hallazgos respaldan de forma sólida la literatura previa sobre el ABP respecto a la estimulación del interés intrínseco.^[30-32] El cambio estructural en el laboratorio—transitando de la ejecución de recetas experimentales predecibles hacia un diseño de "ensayo y error" donde el resultado final era desconocido—demostró ser el principal catalizador de la motivación y del desarrollo del pensamiento crítico de los estudiantes: "Este proyecto me enseñó mucho sobre el proceso de investigación científica. En todas las prácticas de laboratorio que hacemos en clase, seguimos un procedimiento que ya se nos ha dado o uno que hemos aprendido a ejecutar. En todos esos casos, conocemos cuál es el resultado final deseado. En nuestro ABP, no solo diseñamos nuestro propio procedimiento, sino que desconocíamos cuáles serían los resultados. Mi grupo también tuvo que aprender a realizar ajustes en nuestros métodos y en el diseño experimental con base en lo que iba ocurriendo en el experimento (Año 6 – Estudiante 45)".

Implicaciones para la enseñanza

La investigación científica a través de aprendizaje basado en problemas aporta lecciones fundamentales para los centros de educación secundaria que busquen emprender reformas curriculares basadas en metodologías activas:

- Enfoque en el Proceso sobre el Producto: La sofisticación técnica del experimento de química es secundaria; la prioridad pedagógica debe volcarse en cómo los estudiantes estructuran un problema, delimitan una pregunta realista y gestionan la incertidumbre de los resultados inconcluyentes.
- Necesidad de Co-Docencia Interinstitucional: La implementación exitosa del ABP en solitario puede constituir una tarea abrumadora para el maestro de secundaria. Es crucial consolidar redes de apoyo que integren a la facultad universitaria, bibliotecarios y personal técnico, distribuyendo la carga de gestión logística y de infraestructura digital.
- Delimitación de Equipos: Se sugiere conformar grupos estrictamente de tres a cuatro estudiantes pertenecientes al mismo periodo de clase, previniendo rupturas en los canales de comunicación asincrónicos.

Limitaciones y conclusiones

Debido a la naturaleza exploratoria de este estudio y a las restricciones propias del diseño curricular institucional, no se empleó un grupo de control en la investigación. El uso de entrevistas estructuradas o semiestructuradas habría robustecido el alcance del estudio; sin embargo, debido al elevado volumen de participantes y a que la intervención se situó al cierre del ciclo escolar, dicha estrategia resultó inviable. A pesar de estas limitaciones metodológicas, las respuestas de los

estudiantes y docentes a nuestros instrumentos de evaluación mostraron una consistencia interna a lo largo de los seis años de seguimiento.

Se concluye que el Aprendizaje Basado en Problemas, coronado con un simposio de divulgación científica en un entorno universitario externo, promueve el desarrollo de habilidades del siglo XXI y fomenta una sólida transición académica de la escuela secundaria a la educación universitaria. El diseño de este proyecto demuestra que la educación en ciencias es verdaderamente significativa cuando los estudiantes dejan de reproducir procedimientos y ponen las manos a la ciencia a través de oportunidades auténticas que sean de su propio interés.

Agradecimientos

Queremos agradecer a los estudiantes participantes por su disposición para brindar retroalimentación y formar parte de la implementación del ABP en el currículo de química avanzada. A la Sra. Eileen Malloy-Desormeaux, por su inagotable apoyo, guía y aliento a lo largo de este proceso. A la Dra. Nahyr D. Rovira-Figueroa, por sus valiosas sugerencias, su soporte logístico en el proyecto y la revisión crítica de este manuscrito. A los diferentes directores de la Escuela Secundaria Pittsford Sutherland y al liderazgo del distrito escolar por su respaldo institucional en este proyecto. Finalmente, a la Escuela de Artes y Ciencias de la Universidad de St. John Fisher, por el financiamiento otorgado a través de las becas de desarrollo docente durante seis años para la adquisición de todos los insumos y materiales requeridos para la ejecución de los problemas de investigación.

Material complementario

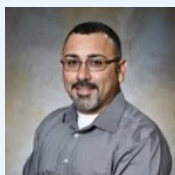
En la web de la revista Anales de Química de la RSEQ (<https://analesdequimica.es/index.php/AnalesQuimica>) se podrá encontrar información complementaria al presente artículo. El Anexo 1 demuestra un ejemplo de la matriz cognitiva "KWHLAQ, por sus siglas en inglés". El Anexo 2 incluye los detalles del ABP: eventos, tareas y fechas de entrega durante todo el proyecto. El Anexo 3 contiene un ejemplo del plan de proyecto ABP en donde se detalla los componentes del método científico. El Anexo 4, describe las instrucciones básicas de formato y estilo de redacción del poster ABP. El Anexo 5 presenta un ejemplo del programa del Simposio Científico. Finalmente, el Anexo 6 reúne evidencias fotográficas de los estudiantes durante la ejecución de sus experimentos y la elaboración de los pósteres de ABP en la escuela; asimismo, incluye imágenes de los alumnos presentando sus problemas — tanto en formato oral como en pósteres— durante el Simposio Científico ante la presencia de padres de familia, estudiantes, maestros y profesorado universitario.

Bibliografía

- [1] National Research Council, *Learning and Understanding: Improving Advanced Study of Mathematics and Science in U.S. High Schools*, National Academies Press, Washington, **2002**.
- [2] P. M. Sadler, G. Sonnert, R. H. Tai, K. Klopfenstein, AP: A critical examination of the Advanced Placement program, Harvard Education Press, Cambridge, **2010**.
- [3] R. H. Tai, P. M. Sadler, J. F. Loehr, *Advanced Placement chemistry exam success and college chemistry performance*, College Board Advanced Placement Program Research Report, **2006**.
- [4] National Research Council, *America's Lab Report: Investigations in High School Science*, National Academies Press, Washington, **2006**.

- [5] H. S. Barrows, R. M. Tamblyn, *Problem-based learning: an approach to medical education*, Springer Publ., New York, **1980**.
- [6] L. Torp, S. Sage, *Problems as Possibilities: Problem-Based Learning for K-12 Education*, ASCD Alexandria, Virginia, **1998**.
- [7] J. Valdez, M. Bungihon, *J. Technol. Sci. Educ.* **2019**, 9, 282, <https://doi.org/10.3926/jotse.631>.
- [8] D. Boud, *Problem-based Learning in Education for the Professions*, Higher Education Research And Development Society Of Australia, Australia, **1987**.
- [9] B. Trilling, P. Hood, *Educ. Technol.* **1999**, 39, 5-18.
- [10] J. Ravitz, *Peabody Journal of Education* **2010**, 85, 290-312, <https://doi.org/10.1080/0161956X.2010.491432>.
- [11] J. R. Savery, *Interdisciplinary Journal of Problem-Based Learning* **2006**, 1(1), <https://doi.org/10.7771/1541-5015.1002>.
- [12] J. Barell, *Problem-based learning: an inquiry approach*, Corwin Press, Thousand Oaks, California, **2007**.
- [13] B. J. Duch, S. E. Groh, D. E. Allen, *The power of problem-based learning: a practical "how to" for teaching undergraduate courses in any discipline*, Stylus, Sterling, Virginia, **2001**.
- [14] C. Chin, L.-G. Chia, *Sci. Ed.* **2006**, 90, 44-67, <https://doi.org/10.1002/sce.20097>.
- [15] P. Ram, *J. Chem. Educ.* **1999**, 76, 1122, <https://doi.org/10.1021/ed076p1122>.
- [16] M. Birenbaum, F. J. R. C. Dochy, eds., *Alternatives in Assessment of Achievements, Learning Processes and Prior Knowledge*, Springer Netherlands, Dordrecht, **1996**, <https://doi.org/10.1007/978-94-011-0657-3>.
- [17] C. E. Hmelo-Silver, H. S. Barrows, *Interdisciplinary Journal of Problem-Based Learning* **2006**, 1(1), <https://doi.org/10.7771/1541-5015.1004>.
- [18] National Research Council, *A Framework for K-12 Science Education: Practices, Crosscutting Concepts, and Core Ideas*, National Academies Press, Washington, **2012**.
- [19] J. R. Savery, T. M. Duffy, *Educ. Tech.* **1995**, 35, 31-38.
- [20] G. M. Bodner, *J. Chem. Educ.* **1986**, 63, 873, <https://doi.org/10.1021/ed063p873>.
- [21] E. von Glasersfeld en *The International Encyclopedia of Education*, vol. 1, (Eds.: T. Husen, T. N. Postlethwaite), Pergamon Press, Oxford/New York, **1986**, pp. 162-163.
- [22] P. Cobb, *Educational Researcher* **1994**, 23, 13-20, <https://doi.org/10.3102/0013189X023007013>.
- [23] C. E. Engel en *The Challenge of Problem-Based Learning* (Eds.: D. Boud, G. Feletti), Kogan Page, **2013**, pp. 17-27, <https://doi.org/10.4324/9781315042039-3>.
- [24] J. W. Creswell, *Research design: qualitative, quantitative, and mixed methods approaches*, SAGE Publications, Inc., Thousand Oaks, California, **2008**.
- [25] J. W. Creswell, V. L. Plano Clark, M. L. Gutmann, W. E. Hanson en *Handbook of Mixed Methods in Social & Behavioral Research*, (Eds.: A. Tashakkori, C. Teddlie) SAGE Publications, Thousand Oaks, California, **2003**, pp. 209-240.
- [26] A. Tashakkori, C. Teddlie, *Handbook of Mixed Methods in Social and Behavioral Research*, SAGE Publications, Thousand Oaks, California, **2003**.
- [27] M. B. Miles, A. M. Huberman, *Qualitative data analysis: an expanded sourcebook*, SAGE Publications, Thousand Oaks, California, **1994**.
- [28] A. Strauss, J. Corbin en *Handbook of Qualitative Research* (Eds.: N.K. Denzin, Y.S. Lincoln), Sage Publ., Thousand Oaks, California, **1994**, pp. 273-285.
- [29] J. Corbin, A. Strauss, *Basics of Qualitative Research: Techniques and Procedures for Developing Grounded Theory*, SAGE Publications, Thousand Oaks, California, **2008**.
- [30] Y. S. Lincoln, E. G. Guba, *Naturalistic inquiry*, SAGE, Newbury Park, California, **1985**.

- [31] C. E. Hmelo-Silver, *Educational Psychology Review* **2004**, 16, 235-266, <https://doi.org/10.1023/B:EDPR.0000034022.16470.f3>.
- [32] E. E. Virtue, B. N. Hinnant-Crawford, *Interdisciplinary Journal of Problem-Based Learning* **2019**, 13, <https://doi.org/10.7771/1541-5015.1809>.
- [33] J. Barell, *Teaching for thoughtfulness: classroom strategies to enhance intellectual development*, Longman, New York, **1995**.
- [34] University at Albany, University Libraries, "Primary and Secondary Sources for Science" disponible en <https://library.albany.edu/infolit/resource/prisci>, (consultado: 28/08/2026).



Kermin J. Martínez-Hernández

Dpto. Química, Facultad de Química,
Universidad de St. John Fisher, Rochester,
Nueva York.

C-e: kmartinez-hernandez@sjf.edu
ORCID: 0000-0003-1116-7511

Profesor Titular de la Universidad de St. John Fisher, Rochester, New York. Cuenta con más de 10 años de experiencia como facilitador de los currículos de: Introducción y Capacitación de Facilitadores para la Introducción a la Mentoría y Mentoría con Sensibilidad Cultural. Imparte clases de química general y organiza talleres docentes sobre instrucción diferenciada y aprendizaje basado en problemas (ABP). Su investigación en educación química se centra en evaluar la implementación del ABP en los niveles de educación secundaria y universitaria. Actualmente es Investigador Principal de la Subvención de Becas para la Fundación Nacional de las Ciencias, *NSF Robert Noyce*.



Marie LoRe-Geigel

Dpto. de Ciencias, Facultad de Química,
Escuela Secundaria Pittsford Sutherland,
Pittsford, Nueva York.

C-e: marie_loregeigel@pittsford.monroe.edu

Directora del Departamento de Ciencias y maestra de química. Con 23 años de trayectoria, imparte clases de química avanzada en la Escuela Secundaria *Pittsford Sutherland*. Actualmente, supervisa la implementación curricular, apoya la planificación instruccional y asesora a otros educadores en su departamento. Además de ser mentora en su distrito, colidera actividades como la Olimpiada de Ciencias y es miembro activo de la Sociedad Americana de Química. Como cofundadora del grupo *Re-ACT (Rochester Area Chemistry Teachers)* y Maestra Distinguida del Estado de Nueva York (*NYS Master Teacher, Finger Lakes Region*), promueve activamente la colaboración docente para desarrollar experiencias *STEM* innovadoras.



10-13 de noviembre 2026

www.jiq2026.org

50° Aniversario de la creación de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid

50th Anniversary of the Faculty of Chemistry (UCM)

Miguel A. Alario[†], Rubén Miranda, José L. Sotelo, M. Teresa Villalba y M. Belén Yélamos*

Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid.

PALABRAS CLAVE:

Historia
Química
Aniversario
Facultad de Ciencias
Sección de Químicas
Facultad de Ciencias
Químicas
Universidad Complutense
de Madrid

KEYWORDS:

History
Chemistry
Anniversary
Faculty of Science
Section of Chemistry
Faculty of Chemical
Sciences
Complutense University of
Madrid

RESUMEN:

La historia de los 50 años de la Facultad de Ciencias Químicas (UCM), establecida en 1974 tras la división de la antigua Facultad de Ciencias, es una crónica de expansión y adaptación. En este artículo relatamos la transformación y construcción de los diferentes edificios que componen la actual facultad. Así mismo, se hace un repaso de la evolución de los planes de estudios, desde los rígidos sistemas anteriores hasta los Grados modernos del Plan Bolonia (2009), lo que le ha valido las acreditaciones europeas *Eurobachelor* y *EUR-ACE*. La investigación siempre ha sido un pilar fundamental de la facultad, creciendo de forma exponencial hasta la actualidad. Por último, se muestra la evolución del profesorado y estudiantado, así como la presencia femenina en estos dos grupos.

ABSTRACT:

The 50-year history of the Faculty of Chemistry (UCM), established in 1974 following the division of the former Faculty of Sciences, is a chronicle of expansion and adaptation. In this article, we narrate the transformation and the construction of the various buildings that currently compose the faculty. Likewise, we review the evolution of the syllabi, from the rigid earlier systems to the modern Bologna Plan Degrees (2009), which earned the European accreditations *Eurobachelor* and *EUR-ACE*. Research has always been a fundamental pillar of the faculty, growing exponentially to the present day. Finally, the evolution of the faculty staff and students is detailed, along with the growth of female representation within these two groups.

Introducción

Si Gardel cantaba: “*Veinte años no es nada*” y Serrat: “*Hace veinte años que tengo veinte años...*”, los 50 años vividos por la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid (UCM) han dado lugar a muchos acontecimientos que merecen ser narrados para que perduren en la memoria de los presentes y futuros miembros de esta facultad. Ser “memoria histórica” implica muchas vivencias, fechas, números y generaciones de estudiantes, profesorado y personal de administración y servicios que se mezclan en el recuerdo. Recopilar y ordenar las distintas actividades y eventos no ha sido tarea fácil, pero el recordar lo vivido ha resultado muy grato y se ha podido comprobar que todo ello ha dejado huella, influyendo decisivamente en la situación actual.

La división en 1974 de Facultad de Ciencias, anteriormente dividida en secciones, en cinco Facultades, se produjo en una etapa de crecimiento y progreso de la actividad universitaria y, en general, en todos los ámbitos de la educación en la sociedad española.

Esta división permitió que cada una de las facultades tuviera una mayor autonomía de gestión del profesorado adscrito, de los planes de estudio de las enseñanzas a su cargo, y de los nacientes departamentos integrados en cada una de ellas.

Edificios e instalaciones: el crecimiento físico de la Facultad

El desarrollo de la Facultad de Ciencias Químicas ha estado intrínsecamente ligado al crecimiento y evolución de sus infraestructuras. Originalmente, la Sección de Químicas se ubicó en uno de los dos edificios de la Facultad de Ciencias en la Ciudad Universitaria, el **Edificio A**, destinados a impartir las titulaciones de ciencias y que fue inaugurado en 1943 en la Ciudad Universitaria de Madrid. En la Figura 1 se muestran los planos originales del pabellón de Químicas de la Facultad de Ciencias. Este edificio, de planta en forma de U, fue diseñado para albergar aulas, laboratorios especializados (de Química Inorgánica, Orgánica, Analítica, Física y Técnica), almacenes y despachos para las diversas Cátedras. El **Aula Magna** servía como espacio para impartir clases a los grupos más numerosos, para reali-

zar exámenes o celebrar actos académicos, mientras que las demás aulas estaban directamente adscritas a las principales cátedras, reflejando una organización más centralizada y jerárquica en torno a las figuras de los catedráticos.

Durante la década de los 60, el considerable aumento del número de estudiantes y la introducción de nuevas asignaturas, sobre todo optativas, generaron una presión insostenible sobre el espacio disponible. La insuficiencia de aulas se hizo evidente, obligando a la facultad a utilizar espacios en el edificio de Físicas-Matemáticas y, posteriormente, en el aulario del edificio de Biológicas y Geológicas, cuya construcción, iniciada a principios de los años 70, se desvió de su propósito original (se trataba de un proyecto destinado a la construcción de un hospital, con amplios pasillos y puertas para el paso de las camillas) par satisfacer la apremiante necesidad de aulas universitarias.

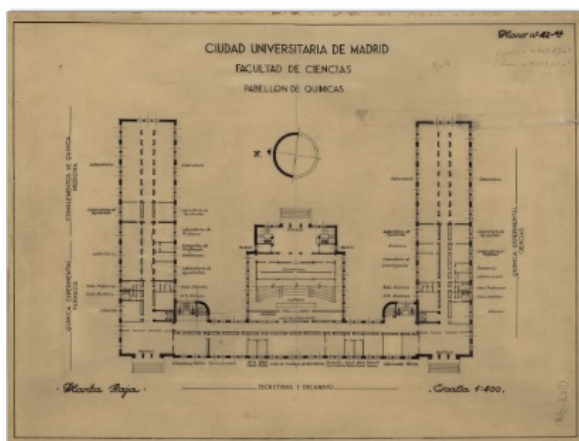


Figura 1. Pabellón de Químicas de la Facultad de Ciencias, planta baja. Reproducido con permiso del Archivo de la UCM.

Un hito importante en el desarrollo de nuevas infraestructuras fue la aprobación en 1953 de la construcción de una "Fábrica Experimental Universitaria" o "Planta Piloto". Esta instalación, que se completó hacia 1960, fue un proyecto visionario impulsado por el Catedrático de Química Técnica, Prof. Antonio Rius Miró. Hoy, la Planta Piloto lleva su nombre en honor a su legado. En 2005, la planta fue objeto de una importante renovación, lo que le ha permitido seguir siendo un espacio fundamental para la formación práctica y técnica de los estudiantes, así como para la transferencia de los resultados de investigación a una escala preindustrial.

A finales de los años 70, ya con la Facultad de Ciencias Químicas consolidada, el importante aumento del profesorado y el creciente volumen de investigación llevaron a una saturación crítica de los espacios originales. Las clases se encontraban masificadas, e incluso hubo que crear laboratorios en los pasillos sin ninguna o escasas medidas de seguridad. La precariedad de los sótanos del Edificio A era tal que sus techos, anormalmente bajos, hacían que los estudiantes más altos tuvieran que agacharse. En respuesta a esta necesidad, en 1977 se solicitó la ampliación del edificio A. Esta ampliación implicó cerrar la U que daba forma al edificio original, transformándolo en una estructura rectangular con la adición de un nuevo volumen, el **Edificio B**, que quedó conectado físicamente al Edificio A. Estas obras se completaron en 1986. Esta expansión, absolutamente necesaria, permitió la creación de nuevas aulas, laboratorios modernos y despachos adicionales, solucionando los problemas de espacio que se habían originado por la sobrepoblación estudiantil y que habían llevado a la improvisación de laboratorios en áreas inadecuadas del edificio original.

La década de 1990 trajo consigo nuevas exigencias de espacio, impulsadas por el aumento de la actividad docente (resultado de las nuevas titulaciones en Química, Ingeniería Química y Bioquímica) y la necesidad de incluir una cierta separación entre la docencia y la intensa actividad investigadora que se llevaba a cabo en los distintos departamentos de la Facultad. Para abordar estas necesidades, en 2003 se construyeron dos nuevos edificios (Figura 2), a costa de ocupar el espacio de las instalaciones polideportivas "**Enrique Costa Novella**" o Complejo Deportivo Este, al caer este espacio en desuso por la construcción del Complejo Deportivo Norte. El vestuario del Complejo dio origen al actual Centro de Microscopía y los campos de fútbol a aparcamientos.

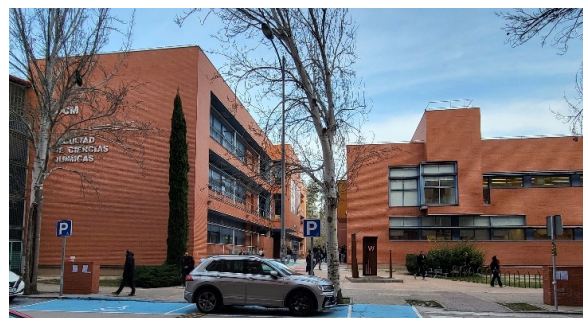


Figura 2. Edificios de Aulario y Biblioteca. Reproducido con permiso del autor, © Rubén Miranda, 2026.

Así, se construyeron un nuevo Aulario con 16 aulas, diseñado para optimizar el espacio de enseñanza y una moderna Biblioteca de tres plantas, con una superficie de 2280 m², donde quedaron centralizados los recursos bibliográficos. Estas nuevas construcciones permitieron una reconfiguración interna de los edificios A y B, en los que algunas aulas se transformaron en despachos y laboratorios de investigación, optimizando el uso del espacio existente.

Los departamentos, ejes de la docencia y la investigación

La estructura departamental, tal como la conocemos hoy en la universidad española, se formalizó con la Ley 83/1965, concibiendo los departamentos como unidades funcionales que agrupaban personal y recursos para la docencia y la investigación en áreas afines. En 1966, la Facultad de Ciencias de la Universidad de Madrid estableció cinco departamentos para la Sección de Químicas: Química Analítica, Química Física, Química Inorgánica, Química Orgánica y Química Técnica. Posteriormente, en 1968, se añadieron dos más: Bioquímica y Metalurgia. En esta etapa inicial, la organización departamental giraba en torno a la figura del Catedrático, quien ejercía un papel central en la coordinación de las actividades docentes e investigadoras de sus respectivas áreas. Los primeros catedráticos fueron: *Ángel Vian Ortuño*, *Enrique Costa Novella* y *Luis Gutiérrez Jodra* en Ingeniería Química; *Fernando Burriel Martí* en Química Analítica; *Manuel Lora Tamayo* y *Rafael Pérez Álvarez-Ossorio* en Química Orgánica; *Ángel Martín Municio* en Bioquímica; *Jesús Morcillo Rubio* en Química Física; *Enrique Gutiérrez Ríos* en Química Inorgánica; *Felipe Calvo y Calvo* en Metalurgia.

La Ley General de Educación (LGE) de 1970 mantuvo una estructura departamental similar, pero los departamentos aún carecían de una estructura administrativa y de gestión autónoma, dependiendo en gran medida de la capacidad del catedrático para obtener recursos y apoyo de instituciones externas,

como el CSIC. La Ley de Reforma Universitaria (LRU) de 1983, sin embargo, fortaleció significativamente la autonomía y la estructura de los departamentos, introduciendo nuevas categorías de funcionarios docentes y administrativos y consolidando su papel como pilares de la organización universitaria. Bajo la LRU, figuras como los “agregados” de la LGE, se integraron plenamente en el cuerpo de catedráticos, reforzando la jerarquía académica.

En el curso 1977-78, se produjo un desdoblamiento en los Departamentos de Química Física y Química Técnica, lo que llevó a un total de diez departamentos adscritos a la recién creada Facultad de Ciencias Químicas. Es importante destacar que el Departamento de Bioquímica era interfacultativo, compartiendo adscripción con la Facultad de Ciencias Biológicas, lo que reflejaba la naturaleza interdisciplinar de esta área. Con la plena implementación de la LRU en 1986, la estructura departamental de la Facultad de Ciencias Químicas volvió de nuevo a la estructura original de siete departamentos, con una organización más definida y, en algunos casos, ligeras modificaciones en su denominación: Bioquímica y Biología Molecular I, Ciencia de los Materiales e Ingeniería Metalúrgica, Ingeniería Química, Química Analítica, Química Física I, Química Inorgánica I y Química Orgánica I. A esta estructura se añadió, de manera significativa, una Sección Departamental de Matemática Aplicada, reconociendo la transversalidad de esta disciplina en las ciencias químicas.

Esta estructura académica se mantuvo estable durante un largo periodo, hasta que en 2017 se produjo una nueva reestructuración departamental de la Universidad Complutense de Madrid que introdujo cambios sustanciales en la mayor parte de las Facultades. Como parte de esta reordenación, el Departamento de Ciencia de Materiales e Ingeniería Metalúrgica se fusionó con el de Ingeniería Química, dando lugar a un nuevo y más amplio Departamento de Ingeniería Química y de Materiales. Paralelamente, se creó un Departamento de Bioquímica y Biología Molecular con una presencia aún más amplia, abarcando seis Facultades, lo que subraya la importancia creciente de esta área en diversas disciplinas.

La evolución de los Planes de Estudio como adaptación constante a los cambios educativos

La evolución de los Planes de Estudio en la Facultad de Ciencias Químicas es un reflejo de las sucesivas reformas educativas en España. Originalmente, los estudios de Licenciatura en Ciencias Químicas, establecidos en 1944, se concebían como un bloque monolítico de cinco años, sin la flexibilidad de asignaturas optativas. La rigidez inicial comenzó a mitigarse con el Decreto de 1953, modificado en 1954, que introdujo la posibilidad de cursar asignaturas complementarias y optativas en los últimos años. Este decreto también estableció un primer curso selectivo común para todas las Facultades de Ciencias y para las Escuelas Técnicas Superiores de Ingeniería y Arquitectura.

Un punto de inflexión fue el Plan de Estudios de 1969, precursor del de 1974, vigente en el momento de la creación de la facultad. Este plan innovador buscaba una mayor especialización y otorgaba una importancia renovada a las enseñanzas prácticas, reconociendo la necesidad para el área de la química de una formación más aplicada. Su estructura era la siguiente: un primer curso selectivo y común a las cinco secciones de la Facultad de Ciencias; cursos de segundo y tercero también comunes, que, sin embargo, carecían de optativas y se centraban en disciplinas fundamentales como matemáticas, física y química, complementadas por asignaturas transversales como dibujo e idiomas. Una característica distintiva de

este plan fue la división de las asignaturas anuales en cuatrimestrales, desdobladas en teoría y práctica, una metodología que buscaba reforzar el aprendizaje experimental. A partir del cuarto curso, los estudiantes podían optar por especialidades independientes, lo que representó un avance significativo hacia la diferenciación curricular. Estas especialidades incluían Química (con subdivisiones en Analítica, Inorgánica, Física y Orgánica), Bioquímica, Metalurgia y Química Técnica. La inclusión de casi un 50% de materias optativas en el quinto curso fue un paso trascendental, facilitando el desarrollo de planes de estudio más específicos para cada facultad y anticipando la futura estructura de dos ciclos.

La Ley General de Educación (LGE) de 1970 introdujo una reforma estructural que dividió los estudios universitarios en tres ciclos: un primer ciclo de tres años enfocado en disciplinas básicas, un segundo ciclo de dos años dedicado a la especialización, y un tercer ciclo para estudios de postgrado y doctorado. En 1973, se redefinió el plan de estudios de 1970 para ajustarse a los ciclos, estableciendo un primer curso específico para la Licenciatura en Ciencias Químicas y, significativamente, integrando las horas de laboratorio dentro de las asignaturas teóricas. Para 1976, el segundo ciclo ya estaba plenamente implantado, manteniendo la esencia del plan anterior, pero con claras diferencias y la supresión explícita de las asignaturas de laboratorio como entes separados.

La LRU de 1986 marcó otro hito fundamental. Esta ley introdujo el sistema de créditos (1 crédito equivalente a 10 horas lectivas), categorizó las materias en troncales (obligatorias para todas las universidades), obligatorias (definidas por cada universidad) y optativas, y se amplió significativamente el catálogo de titulaciones. En este nuevo marco, se implantaron en la facultad tres nuevos títulos: las Licenciaturas en Química (1992), en Ingeniería Química (1993) y en Bioquímica (de segundo ciclo, en 1995). El plan de la Licenciatura en Química de 1992 mantuvo una estructura similar a la de 1973-1976, pero ofreció tres orientaciones: Química Fundamental, Química de Materiales y Química del Medioambiente, permitiendo a los estudiantes especializarse en áreas de creciente relevancia.

La transformación más reciente y profunda en la educación universitaria ha sido la adaptación al Espacio Europeo de Educación Superior (EEES), también conocido como “Plan Bolonia”, que se implementó a partir de 2009. Esta reforma estructuró los estudios en Grado (primer ciclo, de cuatro años y 240 créditos ECTS) y postgrado: Máster y Doctorado. La Universidad Complutense adscribió a la Facultad de Ciencias Químicas los Grados en Química, Ingeniería Química y Bioquímica, que comenzaron a impartirse en el curso 2010-2011 y continúan vigentes. En 2020 se reconoció la calidad de los dos primeros, mediante la obtención de las acreditaciones europeas *Eurobachelor* y *EUR-ACE*, respectivamente, validando su excelencia a nivel internacional. Además, en el curso 2018-2019, la Facultad de Ciencias Químicas amplió su oferta académica con la implantación del Doble Grado de Química y Bioquímica, respondiendo a la creciente demanda de perfiles multidisciplinares.

La actividad investigadora en la Facultad de Ciencias Químicas

La investigación siempre ha sido una actividad central y relevante en la Facultad de Ciencias y, por extensión, en la Facultad de Ciencias Químicas, manteniéndose intrínsecamente ligada a la docencia y combinando de manera efectiva la generación de nuevos conocimientos con su transmisión a las futuras generaciones de científicos. La envergadura e importancia de la actividad investigadora en la facultad han evolucionado directamente en función de los recursos humanos y materiales

disponibles en cada periodo histórico, experimentando un crecimiento muy significativo a partir de la creación de la Facultad de Ciencias Químicas como entidad independiente.

En los años iniciales, tras la división de la antigua Facultad de Ciencias, la investigación se desarrollaba principalmente en el entorno de las Cátedras existentes. La labor de dirección recaía, fundamentalmente, en los profesores numerarios de la época, un grupo que incluía 10 catedráticos, 4 profesores agregados y 16 profesores adjuntos. En ese momento, la presencia femenina en el profesorado era escasa, destacando únicamente una profesora adjunta en el Departamento de Química Orgánica. Los espacios dedicados a la investigación se limitaban a los laboratorios presentes en el Edificio A, y los medios disponibles eran, en general, modestos, debido a la ausencia de un sistema generalizado y estructurado de financiación a través de proyectos competitivos. Los escasos fondos de los que se disponía para la investigación se conseguían a través de las pocas convocatorias públicas que existían en ese momento, o mediante financiación privada proporcionada por empresas o industrias que colaboraban directamente con los distintos departamentos de la facultad.

Sin embargo, en los años siguientes, la Facultad de Ciencias Químicas experimentó una transformación notable. Hubo una constante mejora en la cualificación académica y científica del profesorado, su número, así como en las colaboraciones establecidas por muchos de ellos con laboratorios extranjeros de gran prestigio, lo que aportó nuevas capacidades y líneas de investigación. Este impulso se debió, en gran medida, a la creación a nivel estatal de la CAICYT (Comisión Asesora Interministerial de Ciencia y Tecnología) en el año 1958, un organismo clave que comenzó a vertebrar la política científica nacional. Adicionalmente, se establecieron los primeros Planes nacionales de Investigación, el primero de los cuales fue de 1988-1991 y se lanzaron convocatorias de Programas específicos para la financiación de proyectos de I+D (Investigación y Desarrollo), lo que diversificó y amplió las oportunidades de obtener recursos. A esta mejora en la financiación se sumó la disponibilidad de nuevos y mejores espacios para laboratorios de investigación, gracias a la ya mencionada construcción del Edificio B de la facultad, que proporcionó instalaciones modernas y adecuadas para investigaciones avanzadas.

Todos estos factores convergieron para generar un crecimiento muy notable en la producción científica de la Facultad de Ciencias Químicas (publicaciones científicas en revistas de prestigio, número de patentes registradas) y la cantidad y diversidad de proyectos y contratos de investigación financiados por diversas fuentes autonómicas, nacionales y europeas. También había importantes colaboraciones con el sector privado, con grandes empresas e industrias como RED Eléctrica, Repsol y CEPSA, entre otras, así como con diferentes Fundaciones, en particular la Fundación Ramón Areces. La acumulación de estos logros a lo largo de todos estos años ha situado a la Facultad de Ciencias Químicas en su conjunto como uno de los centros de la UCM más activos en investigación y que ha logrado captar una mayor cantidad de fondos para el desarrollo de su labor científica.

Hacia la década de los años 90, la UCM implementó una nueva organización de la investigación mediante la creación formal de los Grupos de Investigación UCM. En la actualidad, la Facultad de Ciencias Químicas cuenta con **39 grupos de investigación** oficialmente reconocidos. La notable actividad y la excelencia de estos grupos se reflejan en las evaluaciones periódicas a las que son sometidos, un proceso que garantiza la calidad y el impacto de su trabajo.

Esta intensa actividad investigadora se visualiza a través de diversos indicadores cuantitativos. Por ejemplo, los datos disponibles acerca de la evolución del número de tesis doctorales defendidas desde la creación de la facultad revelan un promedio sostenido que supera las 40 tesis doctorales por año (61 tesis en el curso 1974-75, un 18% de las tesis leídas en la UCM en ese curso). Asimismo, se dispone de información sobre los fondos anuales conseguidos para la financiación de la investigación a través de proyectos de convocatorias competitivas y contratos con empresas y otros organismos, tal y como aparece en la Figura 3.

Los datos de las dos últimas décadas, aunque presentan ciertas fluctuaciones propias de la financiación de la I+D, arrojan un promedio cercano a los 10 millones de euros por año. Esta cifra confirma la posición de la Facultad de Ciencias Químicas como centro de referencia en la UCM y, de forma destacada, en el panorama científico español.

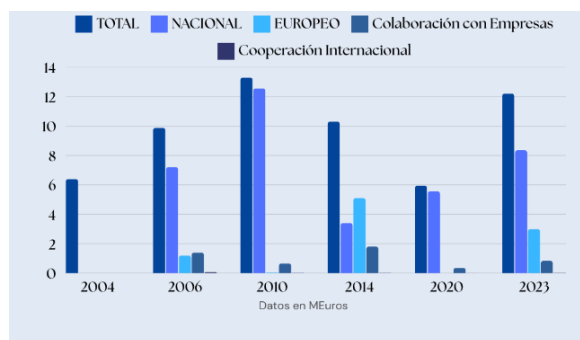


Figura 3. Fondos de investigación de la Facultad de Ciencias Químicas de fuentes nacionales, europeas y en colaboración con empresas. Fuente: Elaboración propia a partir de datos de Ref. [1].

Evolución y cualificación del profesorado en la Facultad de Ciencias Químicas

El profesorado de la facultad ha experimentado una notable evolución tanto en su número como en sus categorías y cualificación desde la plantilla inicial que se incorporó a la nueva facultad desde la Sección de Químicas tras la división de la antigua Facultad de Ciencias. Como ejemplo, en el curso 1968-1969, antes de la división, la Sección de Químicas contaba con 128 profesores. De estos, solo 18 tenían carácter permanente (profesores numerarios), distribuidos en 10 Catedráticos y 8 Profesores Agregados. El resto de la plantilla estaba conformado por 38 Profesores Adjuntos y 72 Ayudantes de Clases Prácticas. Esta plantilla era responsable de la docencia de 1.703 alumnos matriculados en las asignaturas de la Licenciatura en ese curso, de los cuales 536 eran mujeres (31,5%). En la Figura 4 se muestra un ejemplo de una clase de laboratorio en diferentes épocas.

En el momento de la división de la facultad, ya existía una nueva categoría de profesores numerarios, los Profesores Adjuntos. El resto de los profesores no permanentes (antiguos Profesores Adjuntos, Profesores Ayudantes, Profesores Asociados, entre otros) se englobaban bajo la denominación de **Profesores No Numerarios (PNN)**, un colectivo que, además, inició movimientos reivindicativos en la misma época en la que se produjo la división de la facultad. Estas categorías de profesorado se mantuvieron hasta los cambios introducidos por la Ley de Reforma Universitaria (LRU) de 1983, que supuso la desaparición de la figura del PNN. La LRU estableció cuatro cuerpos de funcionarios docentes: catedráticos de universidad, profesores titulares de

universidad, catedráticos de escuela universitaria y profesores titulares de escuela universitaria. Los profesores del cuerpo de agregados, que desaparecían con la LRU, quedaron integrados en el cuerpo de catedráticos de universidad.

En los años posteriores a la división de la Facultad de Ciencias Químicas, se produjo un incremento notable del profesorado en su conjunto y, especialmente, del número de profesores numerarios (Catedráticos, Agregados y Adjuntos), lo que también conllevó un mayor nivel de formación del mismo. Se dotaron nuevas plazas de Profesor Agregado y, en mayor cantidad, del recién creado cuerpo de Profesores Adjuntos. Aunque el estudiantado también creció, lo hizo en menor proporción que el profesorado, lo que indudablemente contribuyó a una mejora en la calidad de las enseñanzas.

Las nuevas figuras establecidas en la LRU se mantuvieron hasta el año 2001, cuando la Ley Orgánica de Universidades (LOU) creó las nuevas figuras de Profesor Contratado Doctor (profesorado permanente) y de Profesor Ayudante Doctor, suprimiendo las de Catedráticos y Profesores Titulares de Escuela Universitaria.



Figura 4. (Izda.) El profesor Gutiérrez Ríos con una estudiante en el laboratorio. Reproducido con permiso del Archivo Regional de la Comunidad de Madrid. (Dcha.) Laboratorio de prácticas de Química General. Reproducido con permiso de la Facultad de Ciencias Químicas de la UCM.

En el periodo entre 1983 y 2000, el número de profesores numerarios dentro de la plantilla del profesorado aumentó notablemente, llegando a representar una cifra superior al 65% del total. La plantilla de profesorado se estabilizó en número en la primera década del 2000, incrementándose de forma continua la proporción de profesores permanentes que llegó a superar el 75%. Se produjo también un gran aumento en el número de Catedráticos de Universidad a partir de 2010, debido a un cambio en la promoción o la creación de este tipo de plazas.

Variaciones y tendencia del estudiantado en la Facultad de Ciencias Químicas

El estudiantado de la Facultad de Ciencias Químicas ha experimentado variaciones a lo largo de sus cinco décadas, tanto en su número en las diferentes titulaciones y niveles (licenciatura, grado, máster, doctorado) como en la proporción de alumnas y alumnos. En su origen, los de Química formaban parte de un conjunto de aproximadamente 4.800 que cursaban un primer curso selectivo común con los de ingeniería de la Universidad Politécnica de Madrid y de otras ciencias.

Cuantitativamente, no se han producido grandes variaciones en el número total de estudiantes de las diferentes licenciaturas o grados impartidos en la facultad. En el curso 1973-74, el número de matriculados era de unos 2.200, cifra similar a la de cursos anteriores (alrededor de 1.700 en 1968-69), y se

mantuvo estable hasta mediados de la década de 1980. Estos estudiantes asistían a clases en sábado e incluso exámenes en domingo. Posteriormente, se produjo un fuerte aumento, llegando a 3.044 matriculados en 1995, debido a la introducción de nuevas titulaciones como las de Ingeniería Química y Bioquímica y al incremento general de la población universitaria. Hacia el año 2000, la cifra se estabilizó de nuevo en torno a los 2.500 estudiantes matriculados. La introducción progresiva de los estudios de grado a partir de 2010, que acortaban la duración de los estudios a cuatro años, resultó en una reducción proporcional de estudiantes, alcanzando alrededor de 1.700 matriculaciones matriculados en 2022-2023. No se incluyen en este número los estudiantes de posgrado ni de doctorado.

En cuanto a los estudios de posgrado, el número de estudiantes matriculados ha variado significativamente debido, en gran parte, a las diferentes normativas que los han regulado, como la introducción de los estudios de máster hacia 2007 y las modificaciones en los programas de doctorado y los plazos para las defensas de las tesis doctorales. A pesar de estas fluctuaciones, los programas de máster y doctorado en la Facultad de Ciencias Químicas siempre han contado con un elevado número de estudiantes.



Figura 5. Estudiantes a la salida de la Facultad (hacia 1950). Reproducido con permiso del Archivo de la UCM.

La mujer en la Facultad de Ciencias Químicas

La presencia de la mujer en la Facultad de Ciencias Químicas ha evolucionado notablemente a lo largo del tiempo, tanto en el estudiantado como en el profesorado. En cuanto al primero, a finales de los años 60 (curso 1968/69), la proporción de mujeres era del 28,5% (considerando el primer curso selectivo). Este porcentaje ha continuado creciendo hasta superar al de hombres, manteniéndose relativamente estable en las últimas décadas, entre un 55% y un 60%. Si se considera la media de estudiantes mujeres en el periodo 2007-2023, la presencia femenina es mayor en Bioquímica (68,2%) que en Química (56,4%) e Ingeniería Química (51,2%).

En cuanto al profesorado, antes de la división de la Facultad de Ciencias, la presencia de mujeres era muy limitada, especialmente en las categorías más altas. En el curso 1973-74, de un total de 114 profesores numerarios en la Facultad de Ciencias, solo había una mujer catedrática y una profesora agregada, ambas en secciones diferentes a la de Químicas. En esta Sección, no había tampoco ninguna mujer entre los 10 catedráticos ni entre los 4 profesores agregados. Entre los 50 profesores adjuntos integrados de la Facultad de Ciencias, 13 eran mujeres. En la Sección de Químicas, de 17 profesores adjuntos integrados, solo una era mujer. A partir de la división de la facultad, la incorporación de la mujer al profesorado aumentó rápidamente. En el curso 1976-77, 4 de los 35 profesores

numerarios de la Facultad de Químicas eran mujeres (11,4%), todas ellas adjuntas numerarias. Para el curso 1980-81, el porcentaje de mujeres entre los 56 profesores numerarios de la Facultad de Químicas aumentó al 21,4%. Aunque aún no había ninguna catedrática, ya había una mujer entre los 11 profesores agregados y 10 entre los 35 profesores adjuntos numerarios.

En el curso 1983-84, con la estabilización de los PNN y las nuevas figuras contractuales de la LRU, el número de mujeres entre los 220 profesores de la facultad alcanzó el 37,3%. Aunque todavía no había ninguna mujer entre los 22 catedráticos, sí había 14 mujeres entre los 45 profesores titulares (31,1%) y 68 entre los 153 contratos de interinos (44,4%). Una década después, en el curso 1995-96, de los 231 docentes de la Facultad de Ciencias Químicas, 110 eran mujeres (47,6%). Para entonces, ya había 3 catedráticas de universidad de un total de 34. Además, de los 129 profesores titulares (incluidos titulares de escuela universitaria), 61 eran mujeres (47,3%). Específicamente, 6 de los 11 profesores titulares de escuela universitaria eran mujeres (54,5%), así como 19 de los 34 profesores asociados (55,9%), y 16 de los 30 ayudantes de Facultad o Escuela Universitaria (53,3%).

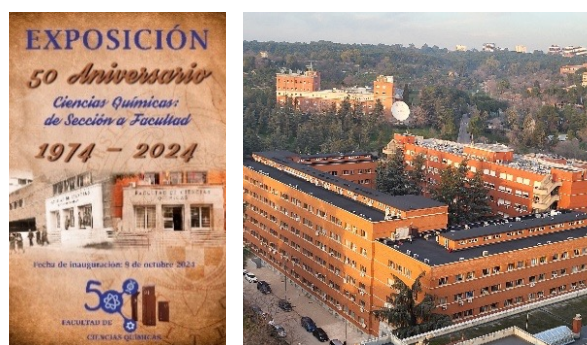


Figura 6. (Izda.) Cartel de la exposición conmemorativa del 50 aniversario de la creación de la Facultad de Ciencias Químicas. Reproducido con permiso de la autora, © Elena Espada Bernabé, 2024. (Drcha.) Vista panorámica de la facultad en la actualidad. Reproducido con permiso del autor, © Rubén Miranda, 2026.

En la actualidad, con las nuevas figuras de profesorado de la ley LOSU, se mantiene una presencia significativa de mujeres en todas las categorías, destacando que en figuras como Ayudante (50%), Ayudante Doctor/a (52%) y Profesor/a Permanente Laboral (71%) la proporción de mujeres es igual o superior a la de hombres.

Medio siglo de química y compromiso con el futuro

En el año 2024 se celebró el 50 aniversario de la creación de la Facultad de Ciencias Químicas con una exposición en la que se vio como el paso del tiempo ha afectado a los diferentes aspectos comentados en este artículo y que está disponible en un formato virtual (<https://quimicas.ucm.es/album/50-aniversario-facultad-de-ciencias-quimicas>). En la Figura 6 aparece el cartel de la exposición junto a una imagen actual de la Facultad tras las sucesivas ampliaciones. Lo que no se ha visto afectada es la ilusión con la que estudiantes y profesores siguen acudiendo a la Facultad, para seguir contribuyendo al avance de la sociedad, gracias al desarrollo de la química. Una disciplina que se ha adaptado a los tiempos y cuya relevancia es si cabe todavía mayor tras estos 50 años por su papel fundamental en resolver muchos de los problemas globales que afectan a la humanidad.

Bibliografía

- [1] Universidad Complutense de Madrid, "Memorias Cursos Académicos", disponible en <https://ucm.es/memoria-ucm>, 2023 (consultado: 12/09/2026).
- [2] P. Chías Navarro, Tesis Doctoral, Universidad Politécnica de Madrid, **1983**.
- [3] P. Chías Navarro, *La Ciudad Universitaria de Madrid: génesis y realización*, Editorial Complutense, Madrid, **1986**.
- [4] Gabinete Técnico de la Ciudad Universitaria, P. Muguruza Otaño, M. López Otero, P. Bravo Sanfeliú, A. Aguirre, M. Garrigues, J. Barroso, E. Ripollés de Palacio y Miguel de los Santos Nicolás, *Rev. Nac. Arquitectura*, **1941**, 6, 17-28.
- [5] Universidad Complutense de Madrid. Facultad de Ciencias Químicas, *50º Aniversario de Químicas en la Ciudad Universitaria 1944-1994*, documentos de trabajo UCM 1995/2, **1995**.



Miguel Ángel Alario Franco
(1942-2024¹)

Universidad Complutense de Madrid
ORCID: 0000-0002-6512-7796

Miguel Ángel Alario y Franco fue Doctor en Ciencias Químicas y Catedrático de Química Inorgánica de la Universidad Complutense de Madrid. Fue Decano de la Facultad de Ciencias Químicas de la UCM entre 1986 y 1994. Su investigación se centra en la relación entre estructura y propiedades de materiales sólidos, como superconductores y conductores iónicos. Fundó y presidió el Grupo de Química de Estado Sólido de la RSEQ. Ha desempeñado cargos científicos internacionales de alto nivel en congresos y simposios de referencia mundial. Ha recibido numerosos galardones, entre ellos el Premio Rey Jaime I y la Medalla de la RSEQ. Es autor de más de 200 artículos científicos, tres patentes y ha dirigido veinte tesis doctorales. Fue Presidente de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales de España (2009-2012).



Rubén Miranda Carreño

Universidad Complutense de Madrid
C-e: rmiranda@ucm.es
ORCID: 0000-0002-3675-247X

Ingeniero Químico Medioambiental (2002) y Doctor en Ingeniería Química, premio extraordinario de doctorado (2008) por la Universidad Complutense de Madrid. Profesor Titular del Dpto. de Ingeniería Química y de Materiales (desde 2018) y Vicedecano de Asuntos Económicos, Infraestructura y sostenibilidad de la Facultad de Ciencias Químicas durante el período 2022-2023. Sus líneas de investigación principales se centran en el tratamiento de aguas residuales industriales, la valorización de residuos y en general, el desarrollo de procesos industriales más sostenibles.

**José Luis Sotelo Sancho***Universidad Complutense de Madrid*C-e: chejls@ucm.es

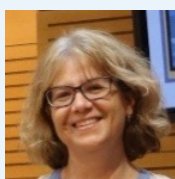
ORCID: 0000-0002-6758-9572

Doctor en Ciencias Químicas con Premio Extraordinario (UCM, 1970), ha sido Catedrático de Ingeniería Química en las Universidades de Extremadura (1977) y Complutense de Madrid (1986), es actualmente Profesor Emérito. Premio RSEQ de Ingeniería Química (2002), Académico correspondiente de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Doctor Honoris Causa por la Universidad de Extremadura. Ha dirigido 29 tesis doctorales, 16 proyectos de investigación y nueve contratos con empresas del sector petroquímico.

**Mª Teresa Villalba Díaz***Universidad Complutense de Madrid*C-e: mvillalb@ucm.es

ORCID: 0000-0002-0042-9953

Doctora en Química, Catedrática del Dpto. de Bioquímica y Biología Molecular y Decana de la Facultad de Ciencias Químicas. Ha realizado investigaciones en la Universidad Rockefeller y en el Memorial Sloan Kettering Cancer Center de Nueva York y la Universidad de Brandeis de Massachusetts. Posee una amplia trayectoria investigadora con 7 sexenios de investigación, uno de transferencia. Posee un índice H = 57. Las líneas de investigación de sus proyectos como investigadora principal centradas en la alergia y sus desencadenantes, le han permitido establecer numerosos contratos con empresas farmacéuticas. La divulgación forma parte de sus actividades con varios premios recibidos.

**Mª Belén Yélamos López***Universidad Complutense de Madrid*C-e: mbyelamo@ucm.es

ORCID: 0000-0002-0559-0367

Doctora en Química, Profesora Titular del Dpto. de Bioquímica y Biología Molecular y Vicedecana de la Facultad de Ciencias Químicas. Sus líneas de investigación se han centrado en la Química de Proteínas Víricas. Autora de materiales educativos y de divulgación disponibles en línea. Coordinadora del Proyecto ACIERTAS de la Conferencia de Sociedades Científicas de España (COSCE). Miembro de la RSEQ y vocal de la Junta de Gobierno de la RSEQ-STMadrid.

¿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



Noticias de la RSEQ

XLI Reunión Bienal de la RSEQ

La **XLI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ)** se celebrará del **14 al 18 de junio de 2027** en el Auditorio y Centro de Congresos Víctor Villegas de Murcia, bajo la organización del Prof. Pedro Lozano Rodríguez.

La Bienal reunirá a la comunidad química en torno a **15 simposios temáticos** (Tabla 1) organizados por miembros de la

RSEQ, que se desarrollarán en sesiones paralelas y ofrecerán una completa panorámica de las líneas de investigación más innovadoras de la química actual. Estos encuentros serán un espacio privilegiado para conocer los avances científicos más recientes, intercambiar conocimiento y debatir con investigadores de reconocido prestigio internacional.

Tabla 1. Simposios de la XLI Reunión Bienal de la RSEQ.

Simposio
S1. New Frontiers in Organometallic Chemistry for Sustainable Solutions – OASIS
S2. Metals and Biology: From Drug Discovery to Enzyme Design (Biomet 2027)
S3. Supramolecular Chemistry: Redefining Boundaries. From Fundamentals to Applications with Scientific and Technological Impact
S4. The Digital Transformation of Chemistry: Integrating Computational Methods, Artificial Intelligence and Molecular Simulation for Chemical Discovery
S5. New Tools and Strategies for Molecular Synthesis
S6. Green Chemistry
S7. Integrative Electrochemistry: From Fundamentals and Materials to Electroanalytical Applications
S8. Analytical Chemistry Speeds Up
S9. Advances in Sustainable Catalysis: Energy Conversion, Fine Chemicals, and Mechanistic Insight
S10. Redesigning Chemistry for the Energy Transition: Accelerating the Discovery of Sustainable Technologies
S11. Progress in Advanced Functional Materials
S12. Chemistry Education, History, and Science Communication
S13. The Chemistry of Porous Molecular Framework Materials
S14. Structural Science Across Disciplines: Linking Structure and Properties
S15. Natural Products: A Cornerstone for Multiple Disciplines



Abierta la convocatoria del *Chemistry Europe Award* 2027

Chemistry Europe ha abierto la convocatoria del *Chemistry Europe Award* 2027, un galardón bienal, concedido por primera vez en 2023, que reconoce contribuciones sobresalientes en un área de la química. En su edición de 2027, el premio estará dedicado a la Química Médica y Biológica, con especial atención al descubrimiento y diseño de fármacos y a los PROTACs.

El premio reconoce contribuciones destacadas en este ámbito y está dotado con 10.000 euros y un certificado.

El plazo para presentar nominaciones permanecerá abierto hasta el 1 de noviembre de 2026. Las candidaturas deben incluir una carta de nominación y el currículum de la persona candidata, con una selección de cinco publicaciones relevantes.

La información sobre los criterios de elegibilidad y el procedimiento para presentar candidaturas está disponible en la página web de *Chemistry Europe*.



NOTICIAS GRUPOS ESPECIALIZADOS

Nuevo Grupo Especializado de Inteligencia Artificial en Química (GEIAQ)

La Real Sociedad Española de Química cuenta con un nuevo Grupo Especializado, el **Grupo Especializado de Inteligencia Artificial en Química (GEIAQ)**, creado con el objetivo de impulsar el conocimiento y el desarrollo de herramientas de inteligencia artificial aplicadas a la química.

Entre sus principales objetivos se encuentran fomentar la colaboración multidisciplinar en este ámbito, promover actividades formativas dirigidas especialmente a jóvenes investigadores, facilitar la difusión de conocimientos y resultados y favorecer el desarrollo de iniciativas y propuestas conjuntas de investigación.

La Junta de Gobierno del nuevo grupo está presidida por Juan V. Alegre Requena (ISQCH, CSIC/Univ. Zaragoza), con Julio Lloret Fillol (ICIQ) y Víctor A. de la Peña O'Shea (IMDEA) como vicepresidentes, Rubén Laplaza Solanas (IIQ-CSIC) como secretario y Francisco Manuel Arrabal Campos (UAL) como tesorero. Completan la Junta como vocales Lucía Morán González, Marco Marazzi, Carla Casadevall Serrano y David Balcells Badia.



Logo del Grupo Especializado de Inteligencia Artificial en Química (GEIAQ).

Las personas interesadas en formar parte del GEIAQ pueden solicitar su incorporación a través de la RSEQ.

XLVI Reunión del Grupo Especializado de Electroquímica (GEE)

La XLVI Reunión del Grupo Especializado de Electroquímica (GEE) de la RSEQ se celebró en Barcelona entre el 7 y el 10 de julio de 2026, y fue organizada por la Universitat de Barcelona (Dr. Ignacio Sirés, Dra. Teresa Andreu, Dr. Albert Serrà y Dra. Maria Sarret) y la Universitat Autònoma de Barcelona (Dr. Gonzalo Guirado).

El evento reunió a más de 200 expertos nacionales e internacionales en diferentes ámbitos de la Electroquímica. Durante la reunión se impartieron tres conferencias plenarias, a cargo del Dr. Antoni Forner Cuenca (*Eindhoven University of Technology*, Países Bajos), el Dr. Andrea Cipollina (*Università degli Studi di Palermo*, Italia) y la Dra. Ulrike I. Kramm (*University of Darmstadt*, Alemania), así como tres conferencias invitadas, impartidas por el Dr. F. Pelayo García de Arquer (IFCO, España), el Dr. Enrique García-Quismondo (IMDEA Energía, España) y el Dr. Juan Jesús Velasco Vélez (ALBA Synchrotron, España). El programa se completó con 107 comunicaciones orales y 69 comunicaciones en formato póster.

Además, como es ya habitual en las reuniones del GEE, tuvo lugar la defensa de 13 trabajos de fin de máster y de nueve proyectos de tesis de estudiantes de los programas interuniversitarios de Máster y Doctorado en «Electroquímica. Ciencia y Tecnología».

Durante la primera jornada del congreso, los profesores Ignacio Sirés y Teresa Andreu moderaron una mesa redonda dirigida a jóvenes investigadores con trayectoria en electroquímica. En ella participaron profesionales de diferentes empresas tecnológicas: Sandra Casas (Eurecat), Pau Bosch (Leitat), Juande Sirvent (Oxhyd, IREC), Neus Sabaté (Fuelium), Roger Oriol (RIMSA) y Dmitry Galyamin (Electroseek).

Posteriormente, se llevó a cabo un acto de homenaje a la trayectoria docente e investigadora de la catedrática de



De izquierda a derecha: Ignacio Sirés, Teresa Andreu, Francisco Alcaide, Pere Lluís Cabot, Iluminada Gallardo, Elvira Gómez, Aránzazu Heras, Gonzalo Guirado y Albert Serrà.

Química Física de la Universidad Autónoma de Barcelona Iluminada Gallardo García, con motivo de su reciente jubilación, y a la de los catedráticos de Química Física de la Universidad de Barcelona Elvira Gómez Valentín y Pere Lluís Cabot Julià, con motivo de su próxima jubilación.

En el acto de clausura se hizo entrega de los premios a las mejores comunicaciones presentadas en formato póster, patrocinados en esta ocasión por *ChemElectroChem*, revista de *Chemistry Europe* publicada por Wiley, y por el propio Grupo Especializado de Electroquímica. Los ganadores fueron Pol Vilariño (Universitat de Barcelona), Jesús Píriz-Tercero (Universidad de Córdoba) e Isaac Sánchez Márquez (Universidad Jaume I).



Foto oficial de la XLVI Reunión del Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ.

Entrega de los Premios del Grupo Especializado de Electroquímica (GEE) 2026

En el marco de la XLVI Reunión del Grupo Especializado de Electroquímica (GEE) de la RSEQ, celebrada en Barcelona del 7 al 10 de julio de 2026, tuvo lugar la entrega de los Premios del Grupo de Electroquímica 2026.

El Premio «Jóvenes Talentos» 2026 del Grupo de Electroquímica fue concedido *ex aequo* al Dr. Antoni Forner Cuenca, de la *Eindhoven University of Technology* (Países Bajos), y al Dr. Ignacio Sanjuán Moltó, del Instituto de Materiales Avanzados (INAM) de la Universidad Jaume I.



Entrega del Premio «Jóvenes Talentos» 2026. De izquierda a derecha: Antoni Forner Cuenca, Ignacio Sanjuán Moltó, Aránzazu Heras (presidenta GEE) y Eduardo Laborda (vicepresidente GEE).

Por su parte, el XI Premio «Antonio Aldaz» a la mejor tesis doctoral en el ámbito de la Electroquímica defendida durante el año 2024 fue concedido al Dr. Gabriel Alemany Molina, de la Universidad de Alicante, por la tesis titulada *Electrocatalizadores basados en materiales carbonosos y metales de transición para su aplicación en la producción y uso del hidrógeno*, presentada en la Universidad de Alicante y dirigida por la Dra. Emilia Morallón Núñez y el Dr. Diego Cazorla Amorós.



Entrega del XI Premio «Antonio Aldaz». De izquierda a derecha: Rosa María Arán (tesorera GEE) y Gabriel Alemany Molina.

XLIV Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica (GEQO)

Entre los días 8 y 10 de julio se celebró en Logroño la XLIV Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica (GEQO) de la Real Sociedad Española de Química. El encuentro, organizado por José M^o López de Luzuriaga, Miguel Monge, M^a Elena Olmos, María Rodríguez-Castillo y Aránzazu Mendía, tuvo lugar en el Centro de la Cultura del Rioja y reunió a 185 investigadores e investigadoras. La reunión, consolidada una vez más como el principal punto de encuentro de la comunidad organometálica española, contó con cinco conferencias plenarias impartidas por Agustí Lledós, Claudia Turro, Stephen M. Goldup, Robert J. Gilliard y Mark R. Crimmin, así como diez conferencias invitadas, dieciséis comunicaciones orales, cinco sesiones de comunicaciones flash y una amplia participación en las sesiones de póster. La edición de este año volvió a reflejar la vitalidad y la gran diversidad de la química organometálica actual, con contribuciones que abarcaron desde aspectos fundamentales en química de metales de transición o grupos principales, hasta aplicaciones en catálisis, química supramolecular, fotoquímica, electroquímica, materiales funcionales o química médica.

La reunión se inauguró con la entrega de los Premios GEQO 2026, en la que la profesora **Elena Lalinde** recibió el

premio a la Carrera Distinguida por su prestigiosa trayectoria en el diseño de complejos organometálicos luminiscentes y el estudio de sus aplicaciones. El Premio GEQO a la Excelencia



Foto de los asistentes a la XLIV Reunión del GEQO.



Entrega de los Premios GEQO 2026 a Elena Lalinde (premio recogido por María Teresa Moreno), María del Carmen Nicasio y Miquel Navarro.

Investigadora fue concedido a **María del Carmen Nicasio**, por sus contribuciones fundamentales a la química organometálica y sus aplicaciones en catálisis homogénea. Por su parte, **Miquel Navarro** recibió el Premio GEQO Jóvenes Investigadores, por sus excelentes contribuciones en su etapa posdoctoral e inicio de su carrera independiente en el campo de la química orgánica.

Asimismo, durante la Asamblea General del Grupo se procedió a la renovación de la Junta de Gobierno, que pasa a estar compuesta por Jesús Campos Manzano, Marta Elena González Mosquera, Ana María Geer Ramos, Antonio Jesús Martínez Martínez, Laura Rodríguez Ravell y Max García Melchor.

XXX Reunión Bienal del Grupo Especializado de Química Orgánica - GEQOR (GIQOR-2026)

La XXX Reunión Bienal de Química Orgánica se celebró en Gijón/Xixón entre los días 17 y 19 de junio de 2026 y consiguió reunir a 315 investigadores de todas las ramas de la Química Orgánica. El evento recibió el nombre de GIQOR-2026 en honor a la ciudad que lo acogió, y se extendió durante dos días y medio en sesiones de mañana (miércoles a viernes) y tarde (miércoles y jueves). Consistió en un total de cinco conferencias plenarias, impartidas por los profesores Eric Jacobsen (U. Harvard, Boston, EE.UU.), Eva Hevia (U. Berna, Suiza), Guy Lloyd-Jones (U. Strathclyde, Edimburgo, Reino Unido), Paolo Melchiorre (U. Bolonia, Italia) y Josep Cornella (Instituto Max-Planck para el Carbón, Mülheim, Alemania), diez conferencias invitadas (de profesores de distintas universidades e institutos, nacionales y europeos), 46 comunicaciones orales, 85 presentaciones «flash+poster» y 61 pósteres. Además, en la sesión inaugural se entregaron los Premios del GEQOR [las medallas Félix Serratosa (a Antoni Riera) e Ignacio Ribas (a Israel Fernández)], así como los Lilly Awards for PhDs 2026 (Víctor M. Amador Luna, Albert Gallego, Sergio Barbeira) y Lilly Early Career Researcher 2026 (a Irene Marco Rius), por parte del presidente de la RSEQ, Fer-



Foto de los asistentes a la XXX Reunión Bienal de Química Orgánica.

nando Cossío Mora y de la presidenta del GEQOR, Rosario Fernández Fernández.

El alto nivel de las presentaciones propició animados debates y discusiones científicas, que se prolongaron durante



Entrega de los Premios del GEQOR 2026 a Antoni Riera e Israel Fernández. Entregan los premios el presidente de la RSEQ (Fernando Cossío) y la presidenta del GEQOR (Rosario Fernández).

las pausas café y se extendieron a las sesiones de póster, con un notable porcentaje (62%) de jóvenes investigadores asistentes. El ameno programa social y el clima benigno de Gijón/Xixón durante el evento también han contribuido a acentuar las interacciones y el intercambio de conocimiento entre los asistentes al GIQOR-2026.

La organización agradece sincera y profundamente el apoyo recibido tanto por el GEQOR como por los patrocinadores institucionales (ST-Ast RSEQ, U. Oviedo, Visita Gijón Convention Bureau) y privados: Johnson&Johnson (oro), Else-

vier-Reaxys (plata), Brüker, ChemoSapiens y Scharlab (bronce) y Air-Liquide, Chemistry Europe, Galchimia, Lilly y VWR (general). Igualmente, hace extensivo este agradecimiento a los estudiantes, becarios y postdocs de los grupos de investigación QOSCAT y SOS de la U. Oviedo por su inestimable ayuda.

La próxima reunión bienal del GEQOR se celebrará en Salamanca en 2028.

Enrique Aguilar
Universidad de Oviedo

Celebración de la Escuela GEQO 2026

Del 24 al 26 de junio tuvo lugar en Valladolid la **Escuela GEQO 2026** con el título «**Resonancia magnética nuclear: de los fundamentos a las aplicaciones avanzadas**». El propósito de la Escuela del Grupo Especializado de Química Organometálica (GEQO) es facilitar formación complementaria a las y los estudiantes de posgrado que trabajan en el ámbito de la química organometálica. La edición de 2026 estuvo dedicada a la espectroscopía de resonancia magnética nuclear. El curso tuvo como objetivo mejorar el aprovechamiento de esta técnica mediante una formación sólida en sus bases teóricas que facilite el diseño y la optimización de experimentos, e incluyó demostraciones de aplicaciones avanzadas. Los

estudiantes pudieron aprender *in situ* cómo se llevan a cabo experimentos de diferentes niveles de complejidad, así como estrategias para el seguimiento de reacciones fotoquímicas usando esta técnica. A la escuela asistieron 29 estudiantes de toda España. Las clases fueron impartidas por Iñaki Delso (ISQCH, CSIC/Univ. Zaragoza), María Victoria Gómez (Univ. de Castilla-La Mancha) y Esteban Urriolabeitia (ISQCH, CSIC/Univ. Zaragoza). Queremos expresar nuestro agradecimiento al IU CINQUIMA de la Universidad de Valladolid que acogió la escuela una edición más y al Laboratorio de Técnicas Instrumentales de dicha universidad que permitió el uso del equipamiento de RMN.



Asistentes a la Escuela GEQO 2026.



Asistentes a la Escuela GEQO 2026.

IX Jornadas Ibéricas de Fotoquímica (IX JIF) & II Franco-Iberian Conference on Photochemistry (II FICP)

Las **IX Jornadas Ibéricas de Fotoquímica (IX JIF)**, celebradas conjuntamente con la **II Franco-Iberian Conference on Photochemistry (II FICP)**, tuvieron lugar del 2 al 4 de septiembre de 2026 en el Campus María Zambrano de la Universidad de Valladolid, en Segovia, España. El evento reunió a investigadores de España, Portugal, Francia, Reino Unido y Alemania con el objetivo de compartir los avances más recientes en fotoquímica, fotofísica, fotocatálisis, fotobiología y otras áreas relacionadas con las ciencias de la luz. La conferencia consolidó la tradición de los encuentros ibéricos de

fotoquímica y fortaleció la colaboración científica entre las comunidades fotocientíficas de España, Portugal y Francia.

Entre los principales objetivos de la reunión destacaron la consolidación del intercambio científico, el impulso de nuevas colaboraciones entre universidades, centros de investigación e industria, la difusión de resultados de investigación de vanguardia y el apoyo a jóvenes investigadores mediante su participación en comunicaciones orales y pósteres.

La conferencia contó con una participación total de 127 asistentes, procedentes mayoritariamente de España (89), Por-



Asistentes al IX JIF & II FICP realizado en Segovia, España.

tugal (18) y Francia (17), además de representantes del Reino Unido y Alemania. El programa científico incluyó 3 conferencias plenarias, 16 conferencias invitadas, 52 comunicaciones orales, 42 presentaciones en formato póster y 2 conferencias impartidas por ganadores de los Premios **GRUFO** a la Mejor Tesis Doctoral. Los temas tratados abarcaron áreas de gran actualidad, como la fotobiología, la fotoquímica molecular, los procesos fotocatalíticos sostenibles, la ciencia de materiales y las transformaciones químicas impulsadas por la luz, así como la fotoquímica computacional.

Uno de los momentos más destacados del encuentro fue la ceremonia de entrega del **Premio Nicolás Monardes**, una de las máximas distinciones de la fotoquímica española. El galardón correspondiente a **2025** fue concedido al **Profesor Miguel Ángel Miranda Alonso** en reconocimiento a su sobresaliente trayectoria científica y a sus contribuciones pioneras en fotoquímica, fotofísica y fotobiología. La ceremonia constituyó un homenaje a su carrera investigadora y una fuente de inspiración para las nuevas generaciones de científicos.

La conferencia también otorgó dos premios a jóvenes investigadores por la calidad de sus contribuciones científicas. Además, se fomentó de manera especial la participación de estudiantes de doctorado e investigadores en etapas iniciales de su carrera, ofreciéndoles oportunidades para presentar sus

resultados, recibir comentarios de expertos y establecer contactos científicos que favorezcan su desarrollo profesional.

Más allá de las sesiones científicas, se organizaron actividades sociales, como la recepción de bienvenida y la cena de conferencia celebrada en el histórico Convento de Mínimos de Segovia, que contribuyeron a fortalecer las relaciones personales y profesionales entre los participantes.

En conclusión, las **IX JIF** y la **II FICP** alcanzaron plenamente sus objetivos científicos y de *networking*. El encuentro sirvió como plataforma para la presentación de investigaciones de alta calidad, favoreció la creación de nuevas colaboraciones internacionales y puso de manifiesto la vitalidad y el dinamismo de la comunidad fotoquímica. Asimismo, reforzó los vínculos entre las sociedades científicas de fotoquímica de España, Portugal y Francia, consolidando estos congresos como una referencia internacional en el ámbito de las ciencias fotoquímicas.



GRUPO
ESPECIALIZADO
DE FOTOQUÍMICA

Raúl Pérez Ruiz
Universidad Politécnica de Valencia
GE Fotoquímica (GRUFO)



OTRAS NOTICIAS

Jesús Jiménez Barbero recibe el premio bilateral SCF/RSEQ «Miguel Catalán – Paul Sabatier» 2026

El Prof. Jesús Jiménez Barbero, Director Científico de CIC bioGUNE, ha sido galardonado por la Société Chimique de France (SCF) con el premio 'Miguel Catalán – Paul Sabatier' 2026. El premio hispano-francés «Miguel Catalán – Paul Sabatier» es un premio bilateral entre la RSEQ y la Sociedad de Química Francesa (SCF), que se otorga de forma alterna entre las dos sociedades cada año. Este premio reconoce la calidad científica del trabajo y los fuertes lazos establecidos entre la comunidad química española y la francesa.

Jesús Jiménez Barbero se doctoró en la Universidad Autónoma de Madrid (UAM), desarrollando su investigación en el CSIC. Posteriormente, realizó estancias posdoctorales en la Universidad de Zúrich (Suiza), en el *National Institute for Medical Research* (Reino Unido) y en la *Carnegie Mellon University* (Estados Unidos). Antes de incorporarse a CIC bioGUNE, fue Profesor de Investigación del CSIC en el CIB-CSIC. Asimismo, ha sido Profesor Visitante en la *École Normale Supérieure* de París, la Sorbona, la Universidad de Milano-Bicocca y, desde 2016, en la Universidad del País Vasco. Ha mantenido además una estrecha vinculación con la Real Sociedad Española de Química (RSEQ), de la que fue secretario general entre 2004 y 2011 y presidente entre 2011 y 2017.

En 2014 se incorporó a CIC bioGUNE como Profesor de Investigación Ikerbasque y Director Científico. Su investigación se centra en la biología química, particularmente en el estudio de los mecanismos moleculares implicados en el reconocimiento de distintos ligandos, especialmente glicanos, por parte de los receptores biológicos relacionados con fenómenos biomédicos como el cáncer o las enfermedades infecciosas. Su investigación posee un enfoque multidisciplinar que combina síntesis química, bioquímica de proteínas, biología molecular, biofísica, modelización molecular y técnicas de biología estructural como la cristalografía de rayos X y la microscopía crioelectrónica (cryo-EM), con especial



Prof. Jesús Jiménez Barbero

énfasis en la espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN).

Entre sus aportaciones más destacadas figuran los estudios sistemáticos de las interacciones glicano-lectina, que han contribuido significativamente a ampliar el conocimiento sobre los mecanismos de reconocimiento mediados por glicanos en la salud y la enfermedad. El profesor Jiménez-Barbero ha liderado numerosos proyectos europeos y colaboraciones con la industria, incluyendo una *ERC Advanced Grant*. Sus contribuciones científicas han sido reconocidas con numerosos galardones, entre los que destacan: Premio Nacional de Investigación en Ciencias y Tecnologías Químicas (2023), Premio Internacional Whistler de Química de Carbohidratos (2010) y la Medalla de la RSEQ (2018). Estos reconocimientos ponen de manifiesto su impacto internacional en los ámbitos de la glicociencia, la biología química y la biología estructural.

Alberto Concellón, Jesús Mosquera y Jorge Reñé reciben Becas Leonardo 2026

Alberto Concellón, Jesús Mosquera y Jorge Reñé, miembros de la RSEQ, han sido seleccionados en la XIII edición de las Becas Leonardo de Investigación Científica y Creación Cultural de la Fundación BBVA.

Las Becas Leonardo están dirigidas a investigadores y creadores de entre 30 y 45 años que se encuentran en una etapa intermedia de su trayectoria y destacan por el carácter innovador de su trabajo. En esta edición se han seleccionado

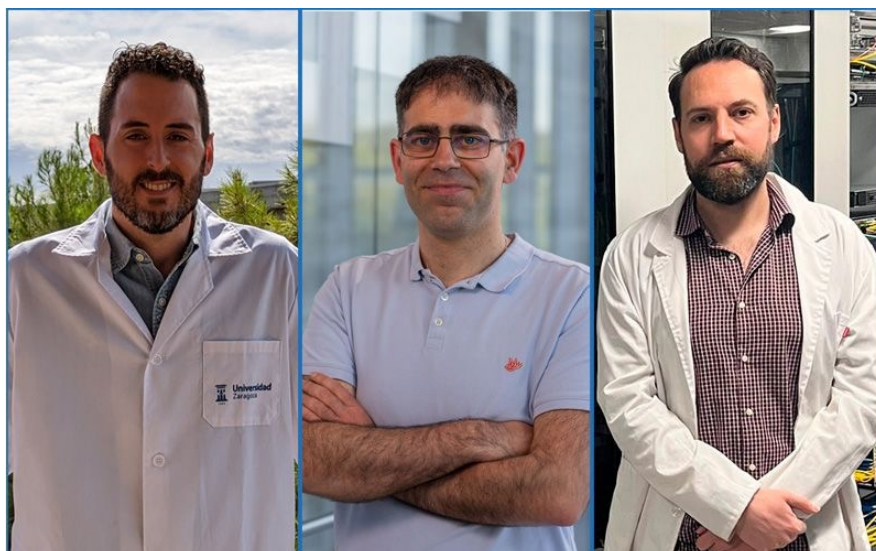
59 proyectos entre un total de 1.896 solicitudes, en un amplio abanico de disciplinas científicas y culturales.

Alberto Concellón, investigador Ramón y Cajal en el Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón, ha recibido financiación para el proyecto «*Adaptive Ionic Complex Colloids for Field-Responsive Optics and Sustainable Catalysis (IONICOLL)*». El proyecto busca desarrollar materiales inteligentes basados en microgotas líquidas capaces de modificar su forma y propie-

dades en respuesta a estímulos externos, combinando coloides complejos y líquidos iónicos.

Jesús Mosquera, investigador Ramón y Cajal en la Universidad da Coruña, desarrollará el proyecto «Nanopartículas biomiméticas para elucidar la organización cuaternaria de las proteínas (NANO-4P)». Su objetivo es diseñar nanomateriales sintéticos que imiten propiedades fundamentales de las proteínas para estudiar las reglas que gobiernan su ensamblaje y avanzar hacia nuevos materiales dinámicos y multifuncionales.

Jorge Reñé Espinosa, investigador Ramón y Cajal en la Universidad Complutense de Madrid, ha sido seleccionado por el proyecto «A Condensate-Targeting Platform for Next-Generation Cancer Therapies via DNA Damage Response Modulation». La investigación combina inteligencia artificial, simulación molecular y experimentación para diseñar nuevos



Alberto Concellón, Jesús Mosquera y Jorge Reñé.

péptidos terapéuticos dirigidos a condensados biomoleculares implicados en procesos de reparación del ADN y supervivencia de células tumorales.

Una medalla de bronce y dos menciones de honor en la 58.ª Olimpiada Internacional de Química (IChO 2026)

El equipo español obtuvo una medalla de bronce y dos menciones de honor en la 58.ª Olimpiada Internacional de Química (IChO 2026), celebrada del 11 al 19 de julio en Tashkent (Uzbekistán), con la participación de más de 350 estudiantes procedentes de más de 90 países.

Víctor Zhou, del Colegio Internacional Ausiàs March de Picassent (Valencia), consiguió la medalla de bronce, que se

suma a la mención de honor obtenida en la IChO 2025. Por su parte, Antso Vidondo Aguirrebalzategui, del IES Navarro Villoslada de Pamplona (Navarra), y Sergio Carbonero Muñoz, del IES Antonio Gala de Móstoles (Madrid), recibieron sendas menciones de honor. Completó la delegación española Javier Romero Hermosel, del IES Maestro Domingo Cáceres de Badajoz.



La delegación española en la IChO 2026 acompañada del guía local.

La delegación estuvo acompañada por los mentores Óscar Rodríguez Montoro, de la Universidad Rey Juan Carlos, y Jorge Melendo Arrufat, antiguo participante en las Olimpiadas y Técnico Químico de la Armada y de la Administración General del Estado.

La preparación teórico-práctica del equipo tuvo lugar en el Campus de Móstoles de la Universidad Rey Juan Carlos (URJC), en los laboratorios de química de la Escuela Superior de Ciencias Experimentales y Tecnología (ES-CET), bajo la supervisión de Mar Ramos Gallego, catedrática de Química Orgánica, y con la colaboración de profesores y personal técnico de la universidad.

Premios Nacionales de Investigación 2026

Cuatro miembros de la RSEQ se encuentran entre los galardonados con los Premios Nacionales de Investigación 2026: el Prof. Daniel Maspoch Comamala, medalla de la RSEQ 2026, el Prof. Jesús Martínez de la Fuente, la Prof.^a Katherine Villa Gómez y el Prof. Miguel Anaya.

El Prof. Daniel Maspoch Comamala ha recibido el Premio Nacional de Investigación "Enrique Moles", en el área de Ciencia y Tecnologías Químicas; el Prof. Jesús Martínez de la Fuente ha sido reconocido con el Premio Nacional de Investigación "Juan de la Cierva", en el área de Transferencia de Conocimiento; y la Prof.^a Katherine Villa Gómez ha sido galardonada con Premio Nacional de Investigación para Jóvenes "María Teresa Toral", en el área de Ciencia y Tecnologías Químicas y el Prof. Miguel Anaya Martín ha recibido el Premio Nacional de Investigación para Jóvenes "Felisa Martín Bravo", en el área de Ciencias Físicas, de los Materiales y de la Tierra.

Estos premios son el reconocimiento más importante de España en el ámbito de la investigación científica. Destacamos aquí alguna reseña de la noticia publicada:



Daniel Maspoch.



Jesús Martínez de la Fuente.



Katherine Villa.



Miguel Anaya Martín.

Premio Nacional de Investigación Enrique Moles, en el área de Ciencia y Tecnología Químicas

Daniel Maspoch es profesor ICREA en el Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia (ICN2) de Barcelona. Ha sido galardonado por su trayectoria científica excepcional y de gran repercusión internacional, combinando investigación pionera con transferencia real a la sociedad.

Premio Nacional de Investigación Juan de la Cierva, en Transferencia del Conocimiento

Jesús Martínez de la Fuente es profesor de Investigación del CSIC en el Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (INMA-CSIC) de Zaragoza. Ha sido reconocido por su destacada trayectoria en la transferencia del conocimiento en el ámbito de la nanobioteología.

Premio Nacional de Investigación para Jóvenes María Teresa Toral, en el área de Ciencia y Tecnología Químicas

Katherine Villa es profesora ICREA, dirige el grupo de investigación "Materiales fotocatalíticos avanzados para la energía y la remediación ambiental" en el Institut Català d'Investigació Química (ICIQ) de Tarragona. Ha recibido el pre-

mio por su investigación pionera en fotocatalisis y materiales sostenibles, integrando química, nanociencia y micromotores autopropulsados por luz para abordar retos energéticos y ambientales.

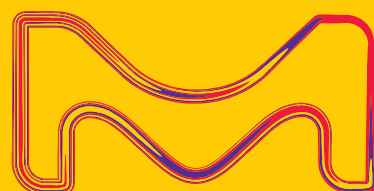
Premio Nacional de Investigación para Jóvenes "Felisa Martín Bravo", en el área de Ciencias Físicas, de los Materiales y de la Tierra.

Miguel Anaya Martín es investigador Ramón y Cajal en la Universidad de Sevilla e investigador de la Real Academia de Ingeniería Británica en los Departamentos de Ingeniería Química y Biotecnología y de Física de la Universidad de Cambridge, en Reino Unido. Ha sido reconocido por su destacada trayectoria investigadora en el ámbito de los materiales emergentes para energía y optoelectrónica.

Desde estas líneas, damos nuestra más sincera enhorabuena a Daniel, Jesús, Katherine y Miguel. Es un reconocimiento a su buen hacer y a la química de excelencia que se hace en España por lo que son un motivo de orgullo para toda la comunidad química.

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