

# Síntesi orientada a la funcionalització de $C_{60}$ mitjançant ciclacions d'enins catalitzades per metalls de transició

## $C_{60}$ functionalization-oriented synthesis based on transition metal-catalyzed enyne cyclizations

Pau Godori, Anna Pla-Quintana i Anna Roglans

Universitat de Girona (UdG). Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC) i Departament de Química

**Resum:** En les últimes dècades, la funcionalització de ful·lerens s'ha convertit en un tema d'interès dins de la comunitat científica per les importants aplicacions que aquests compostos presenten en diferents camps de recerca, com la biomedicina, la ciència de materials o el desenvolupament de cel·les fotovoltaïques. Quan es funcionalitzen els ful·lerens, se'n poden modificar les propietats i així se n'amplia l'aplicabilitat en diversos àmbits. En aquest treball es presenta un mètode per a funcionalitzar  $C_{60}$  mitjançant reaccions de ciclació amb 1,6-enins catalitzades per metalls de transició com ara el rodi i el ruteni. Emprant diferents sistemes catalítics de rodi i ruteni i modelant les condicions de reacció, s'aconsegueix una síntesi diversificada de ful·lerens funcionalitzats prenent com a base els mateixos substrats de partida.

**Paraules clau:** Ciclacions, catàlisi per metalls de transició, 1,6-enins, ful·lerè, rodi, ruteni.

**Abstract:** In recent decades, the functionalization of fullerenes has become a topic of interest in the scientific community due to the significant applications of these compounds in such research fields as biomedicine, materials science, and photovoltaic cells development. When fullerenes are functionalized, their properties can be modified, making it possible to expand their applicability in these different areas. This study presents a method for functionalizing  $C_{60}$  through cyclization reactions with 1,6-enynes catalyzed by transition metals such as rhodium and ruthenium. By employing different rhodium and ruthenium catalytic systems and optimizing the reaction conditions, a diversified synthesis of functionalized fullerenes is achieved from the same starting substrates.

**Keywords:** Cyclizations, transition metal catalysis, 1,6-enynes, fullerene, rhodium, ruthenium.

## Introducció

Els ful·lerens són la tercera forma al·lotròpica més estable del carboni i van ser descoberts l'any 1985 per Curl, Kroto i Smalley [1]. Aquest descobriment va ser mereixedor del Premi Nobel de Química l'any 1996. Els ful·lerens són entitats moleculars que tenen forma de poliedre quasi esfèric i estan constituïts per dotze pentàgons i un nombre variable d'hexàgons [2]. Existeixen diferents famílies de ful·lerens, però el més abundant i estudiat és el ful·lerè  $C_{60}$ , també conegut amb el nom de *buckminsterfullerene*, degut a la similitud de la seva estructura amb la cúpula geodèsica de l'arquitecte Richard Buckminster Fuller a Montreal.

El  $C_{60}$ , format per dotze pentàgons i vint hexàgons, té un sistema amb enllaços conjugats alternats on cada carboni pre-

senta una hibridació propera a la  $sp^2$ . Es pot distingir entre els enllaços [6,6], que són aquells situats entre dos hexàgons, i els enllaços [5,6], que són aquells situats entre un pentàgon i un hexàgon. D'aquesta manera, la molècula  $C_{60}$  presenta dues longituds d'enllaç diferents. Els enllaços [6,6] tenen una longitud d'enllaç de 1355 Å i els enllaços [5,6], de 1467 Å [3].

La reactivitat del  $C_{60}$  és elevada i a la vegada selectiva; és a dir, majoritàriament les reaccions es produeixen sobre els enllaços dobles [6,6], ja que tenen un major caràcter olefínic i això els fa més reactius [4].

Els ful·lerens presenten un conjunt de propietats que fa que siguin compostos d'especial interès en diferents camps de recerca, com ara la biomedicina [5], la ciència de materials [6] o el desenvolupament de cel·les fotovoltaïques [7]. No obstant això, una de les limitacions del ful·lerè és la seva baixa solubilitat en una gran majoria de dissolvents orgànics. En conseqüència, per tal de convertir-los en molècules útils, han de ser convenientment funcionalitzats. La seva funcionalització ha permès aconseguir una gran millora en la seva solubilitat i,

Correspondència: Anna Roglans  
Universitat de Girona (UdG). Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC)  
i Departament de Química  
Facultat de Ciències. C. de Maria Aurèlia Capmany, 69. 17003 Girona  
Tel.: +34 972 418 275. Fax: +34 972 418 150  
A/e: [anna.roglans@udg.edu](mailto:anna.roglans@udg.edu)

a més, dotar-los d'unes inusuals propietats electroquímiques i fotofísiques.

Els avenços en el camp de la química dels ful·lerens han fet possible que, avui en dia, diversos grups funcionals puguin ser units a la superfície del  $C_{60}$  mitjançant tècniques de síntesi química. Tanmateix, encara queda molt per avançar i poder realitzar modificacions a la carta.

Entre els diferents mètodes per a la funcionalització de ful·lerens, cal destacar les reaccions de cicloaddició [8]. Les més emprades són les cicloaddicions de Diels-Alder, les cicloaddicions 1,3-dipolars i la ciclopropanació de Bingel-Hirsch [9]. Mentre que generalment es troben condicions de reacció per a obtenir majoritàriament el ful·lerè monofuncionalitzat, aquests processos tendeixen a la polifuncionalització i donen lloc a una barreja intractable de regioisòmers [10]. En el camp de les cicloaddicions de Diels-Alder i essent processos menys desenvolupats, es troben les reaccions en cascada, en què, partint d'un substrat doblement insaturat, i catalitzades per metalls de transició, es genera *in situ* un diè exocíclic que seguidament reacciona amb el  $C_{60}$ , i així s'obtenen compostos cíclics complexos. Aquests processos, en general, no experimenten poliaddicions [11].

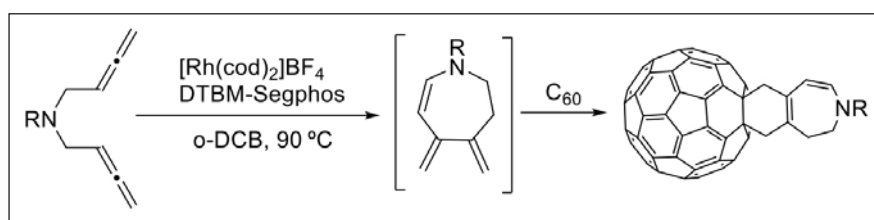
Un d'aquests processos en cascada es va descriure en el nostre grup de recerca a partir de bisal·lens com a substrats insaturats [12]. Així doncs, es va desenvolupar la ciclació catalitzada per rodi d'1,5-bisal·lens amb  $C_{60}$  per a obtenir els derivats de ful·lerè amb fusions de dos anells de sis i set membres (esquema 1). Segons càlculs basats en la teoria del funcional de la densitat (DFT, de *density functional theory*) es va postular que la reacció transcorre a través d'una cicloisomerització catalitzada per rodi del bisal·lè per a generar *in situ* un exo-cicloheptadiè, que reacciona seguidament amb el  $C_{60}$  mitjançant una cicloaddició [4 + 2] de Diels-Alder.

Altres substrats insaturats que es poden considerar en aquests processos són els 1,*n*-enins. Des de l'estudi pioner de Trost [13], els 1,*n*-enins –i, particularment, els 1,6-enins– han demostrat ser uns substrats valuosos per a la construcció d'una gran varietat de compostos cíclics en processos d'elevada economia atòmica i en condicions suaus de reacció. Els enins presenten una gran versatilitat en els processos de cicloisomerització catalitzats per metalls de transició [14, 15] o quan participen en cicloaddicions amb una tercera insaturació, com seria el cas de la reacció de Pauson-Khand [16] i de la reacció de cicloaddició [2 + 2 + 2] [17, 18]. En el primer escenari, la cicloisomerització d'enins pot generar 1,3-diens cíclics, que es poden utilitzar com a diens en reaccions de Diels-Alder en processos en cascada. En funció del metall de transició utilitzat, es poden generar diferents tipus d'1,3-diens, fet que obre la porta a una síntesi diversificada que permeti l'obtenció de dos o més tipus de productes diferents a partir dels mateixos productes de partida. En aquestes reaccions, si el ful·lerè  $C_{60}$  actua com a dienòfil es poden sintetitzar nous derivats funcionalitzats de ful·lerè  $C_{60}$  fusionats a anells de sis membres.

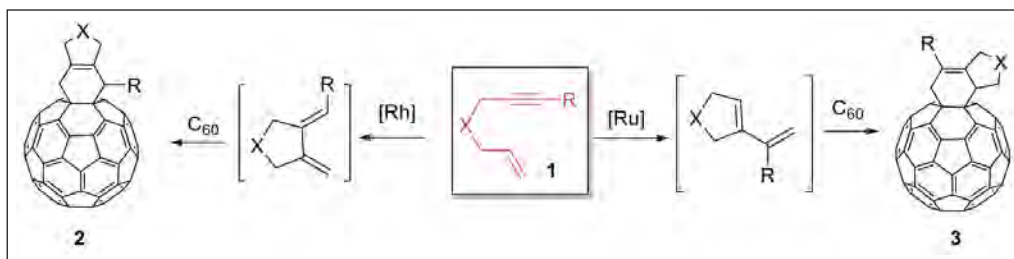
En aquest punt, en el grup de recerca es va decidir estudiar el comportament que mostren diferents 1,6-enins de tipus 1 en reaccions catalitzades per diferents metalls de transició, com ara el rodi i el ruteni en processos en cascada amb  $C_{60}$  per a l'obtenció de diferents derivats de ful·lerè amb fusions amb anells de sis membres (2 i 3). L'objectiu d'aquest estudi és dissenyar una síntesi diversificada i orientada per a l'obtenció de diferents  $C_{60}$  funcionalitzats partint del mateix 1,6-ení, variant la naturalesa del catalitzador i ajustant les condicions de reacció (esquema 2).

## Resultats i discussió

Com a primer pas de l'estudi, calia sintetitzar diferents 1,6-enins. Els 1,6-enins objectiu 1a-1e es troben representats a la figura 1. La varietat entre ells se centra en el nexa d'unió



ESQUEMA 1. Reacció de cicloaddició en cascada d'1,5-bisal·lens i  $C_{60}$  catalitzada per Rh(I). Elaboració pròpia.



ESQUEMA 2. Síntesi diversificada i orientada de diferents ful·lerens funcionalitzats. Elaboració pròpia.

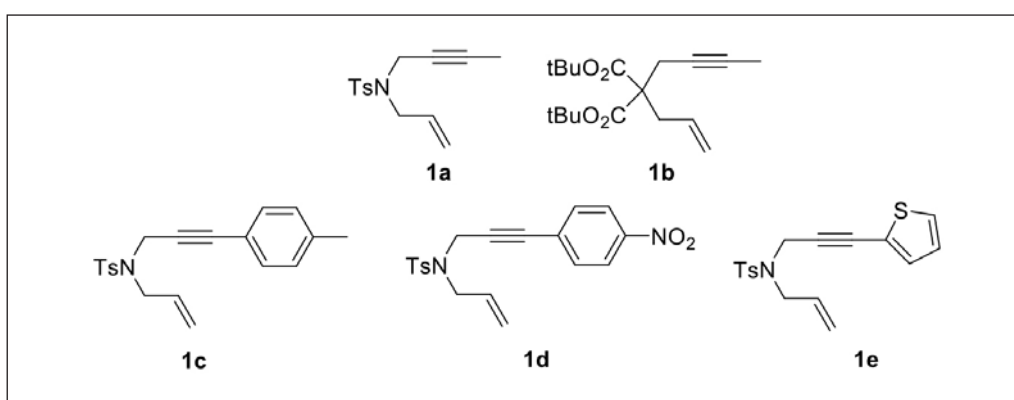


FIGURA 1. Estructura dels 1,6-enins estudiats. Elaboració pròpia.

(NTs, C(COOtBu)<sub>2</sub>) i en la substitució de l'enllaç triple (metil, aril). En el cas dels arils del triple enllaç es van introduir en posició *para* del fenil diferents grups de demanda electrònica (1c, 1d) i un heteroaromàtic com ara el tiofè (1e).

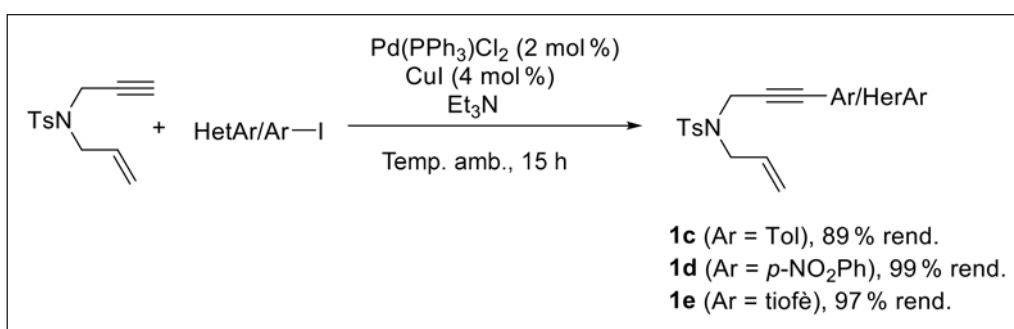
Per a la síntesi dels enins 1c–1e es va partir dels compostos dialquilats amb una cadena d'alquè i una cadena d'alquí terminal. La introducció dels diferents anells aromàtics i heteroaromàtics es va dur a terme mitjançant un acoblament creuat de Sonogashira catalitzat per pal·ladi [19].

Aquesta reacció es basa en l'acoblament d'alquins terminals (C<sub>sp</sub>) amb halogenurs d'aril, heteroaril o vinil (C<sub>sp<sup>2</sup></sub>) emprant un

catalitzador de pal·ladi, un cocatalitzador de coure(I) i una base de tipus amina, tenint sempre unes condicions anhidres i anaeròbies per tal d'evitar diferents subproductes no desitjats. La reacció es pot dur a terme en condicions de reacció suaus, com ara temperatura ambient i emprant una base feble, fet que permet aplicar-la a la síntesi de molècules complexes (esquema 3).

Així doncs, la reacció de Sonogashira va permetre obtenir els 1,6-enins 1c–1e amb rendiments superiors al 89% (esquema 3).

Un cop es van tenir els 1,6-enins preparats es va procedir a l'estudi de les reaccions de ciclació amb dos metalls diferents,



ESQUEMA 3. Acoblament creuat de Sonogashira per a l'obtenció dels enins 1c–1e. Elaboració pròpia.

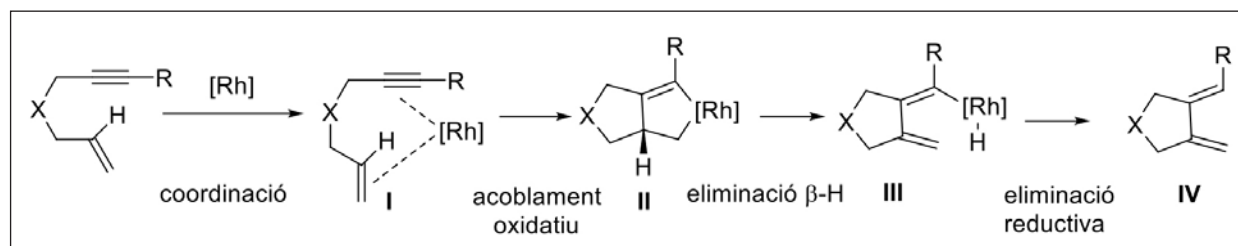
el rodi i el ruteni. En el cas del rodi, el mecanisme generalment postulat per a la cicloisomerització d'enins es basa en la formació d'un intermediari de tipus metal·lociclopentè, que, en funció de l'estructura del substrat, pot evolucionar de maneres diferents [14, 20].

Un estudi basat en càlculs DFT realitzat en el grup de recerca [21] va confirmar que aquest camí de reacció era el predominant en el cas de la majoria dels nostres 1,6-enins (esquema 4).

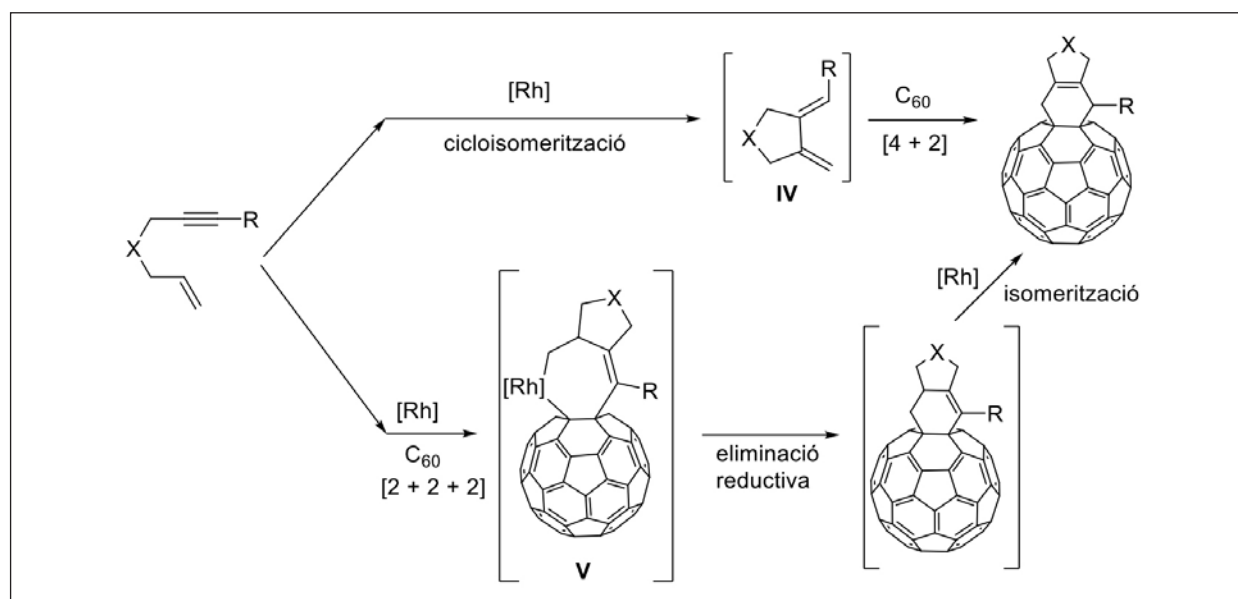
La reacció s'inicia amb una coordinació del rodi amb les dues insaturacions (intermediari I). Aquest intermediari de coordinació evoluciona per donar lloc a un acoblament oxidatiu i generar el rodaciclopentè II. L'espècie II es transforma en l'intermediari Rh-H III a través d'una  $\beta$ -eliminació d'hidrogen i finalment, després d'una eliminació reductiva, s'obté l'1,3-diè IV.

Tot i així, els càlculs DFT també van apuntar que, en funció de l'estructura de l'1,6-ení de partida, podia coexistir un mecanisme paral·lel en què la ciclació es donava a través d'un procés de cicloaddició [2 + 2 + 2] (esquema 5). En aquest cas, una coordinació de l'intermediari II amb un enllaç [6,6] del full·lerè seguit d'una inserció d'aquest enllaç doble genera un rodacicloheptè de tipus V, que, després d'una eliminació reductiva i posterior isomerització de l'enllaç doble, permet obtenir el mateix derivat full·lerènic funcionalitzat (esquema 5) [21].

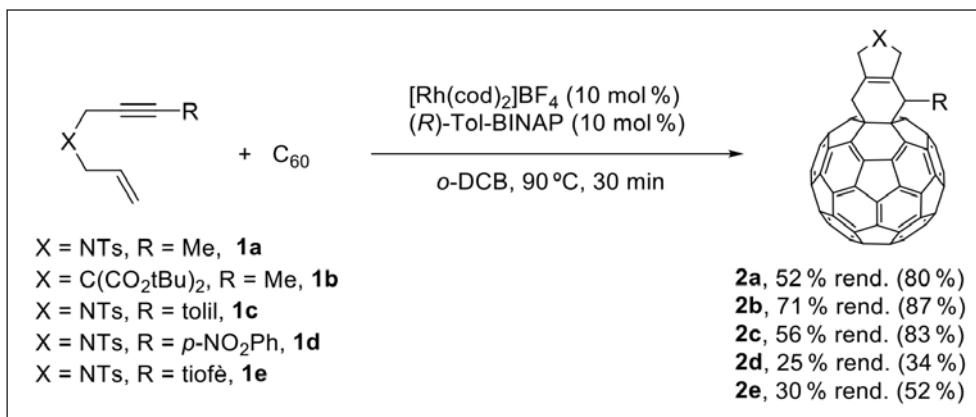
Un cop conegut el mecanisme, es va procedir a estudiar l'abast del procés (esquema 6). Després d'una certa optimització de les condicions de reacció, es va trobar que el millor sistema catalític estava format per una barreja equimolar del complex catiònic de rodi  $[\text{Rh}(\text{cod})_2]\text{BF}_4$  i la Tol-BINAP com a lligand bifosfina en el si d'*o*-diclorobenzè (*o*-DCB) a 90 °C i en trenta minuts de reacció [21].



ESQUEMA 4. Mecanisme postulat per a la formació del diè IV. Elaboració pròpia.



ESQUEMA 5. Dos camins diferents estudiats per DFT en la cicloaddició d'1,6-enins i  $\text{C}_{60}$ . Elaboració pròpia.



ESQUEMA 6. Cicloaddició dels enins 1a–1e amb  $\text{C}_{60}$  catalitzada per rodi (els % entre parèntesis indiquen el rendiment de 2 basat en el  $\text{C}_{60}$  consumit). Elaboració pròpia.

Els derivats de ful·lerè **2a–2e** es van obtenir en rendiments de moderats a bons. Tots aquests derivats es van caracteritzar mitjançant les tècniques espectroscòpiques habituals, com ara l'espectroscòpia d'infraroig, la ressonància magnètica nuclear i l'espectrometria de masses.

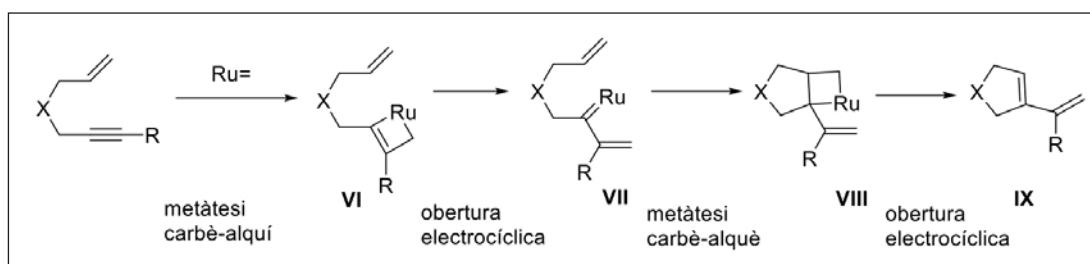
Seguidament, es va procedir a estudiar la cicloaddició amb ruteni com a metall de transició. Una manera d'orientar la formació d'un diè cíclic diferent al generat amb Rh (intermediari **IV** de l'esquema 4) és dirigir el procés cap a un mecanisme de metàtesi d'enins fent ús dels coneguts catalitzadors de Grubbs [22]. En aquest cas, el mecanisme postulat a la bibliografia proposa dues opcions: el procés s'inicia amb una interacció entre l'alquí i el catalitzador de Grubbs, o entre l'alquè i el mateix catalitzador. Diferents estudis, tant computacionals com experimentals, han demostrat que el camí a seguir depèn de l'estructura de l'ení però sobretot del catalitzador de ruteni emprat [23]. A l'esquema 7 només es mostra l'opció basada en la interacció inicial entre l'enllaç triple i el catalitzador.

Inicialment, es proposa una cicloaddició [2 + 2] del complex catalític a l'enllaç triple del substrat (metàtesi carbè-alquí)

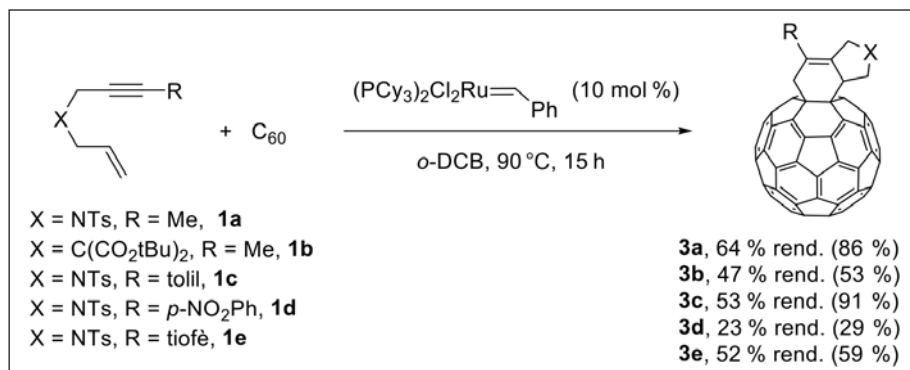
per a generar l'intermediari **VI**. Tot seguit, té lloc l'obertura electrocíclica del rutenaciclobutè generat per donar lloc a un carbè vinílic **VII**. Aquest experimenta una segona metàtesi carbè-alquè amb l'enllaç doble restant i genera el rutenaciclobutà **VIII**. Finalment, aquest intermediari evoluciona cap a una obertura electrocíclica de l'anell generant l'1,3-diè final **IX**.

A continuació es va procedir a optimitzar la reacció de ciclació entre els enins **1a–1e** i el  $\text{C}_{60}$  catalitzada per ruteni. Després d'una certa experimentació, es va trobar que el millor catalitzador de ruteni era el catalitzador de Grubbs de primera generació. La reacció es va dur a terme en el si d'*o*-DCB a 90 °C i en un temps de reacció de quinze hores (esquema 8).

Amb aquestes condicions de reacció es van obtenir els respectius derivats **3** en rendiments compresos entre el 23 % i el 64 %, rendiments bons en aquest tipus de processos. La caracterització completa dels derivats **3** mitjançant espectroscòpia de ressonància magnètica nuclear i espectrometria de masses va confirmar la seva estructura.



ESQUEMA 7. Mecanisme postulat per a la formació del diè **IX**. Elaboració pròpia.



ESQUEMA 8. Cicloaddició dels enins 1a-1e amb  $\text{C}_{60}$  catalitzada per ruteni (els % entre parèntesis indiquen el rendiment de 3 basat en el  $\text{C}_{60}$  consumit). Elaboració pròpia.

## Conclusions

En aquest estudi s'ha posat a punt un mètode per a la síntesi diversificada i orientada de derivats del  $\text{C}_{60}$  mitjançant un procés en cascada catalitzat per metalls de transició i basat en una cicloisomerització d'1,6-enins i la posterior cicloaddició de Diels-Alder amb el  $\text{C}_{60}$  com a dienòfil. Aquest procés ofereix una plataforma versàtil per a la síntesi de diverses estructures cícliques de fullerè amb aplicacions potencials en camps com la nanotecnologia i la síntesi de materials avançats. Aquest treball analitza i compara els efectes de diferents metalls de transició, com ara el rodi i el ruteni, i la seva influència en la formació dels productes cíclics generats. Els resultats obtinguts ofereixen noves perspectives per a la manipulació controlada de la reactivitat d'enins i fullerenes i obren el camí a la síntesi de compostos amb un alt valor afegit.

## Agraïments

Els autors volen expressar el seu agraïment al Ministeri de Ciència i Innovació (projecte de referència PID2020-113711GB-I00 - MCIN/AEI/10.13039/50110001103) i a l'AGAUR (projecte de referència 2021-SGR-623) pel suport econòmic rebut.

## Referències

- [1] KROTO, H. W.; HEATH, J. R.; O'BRIEN, S. C.; CURL, R. F.; SMALLLEY, R. E. « $\text{C}_{60}$ : Buckminsterfullerene». *Nature*, 318 (1985), p. 162-163. DOI: 10.1038/318162a0.
- [2] KROTO, H. «The stability of the fullerenes  $\text{C}_n$ , with  $n = 24, 28, 32, 36, 50, 60$  and  $70$ ». *Nature*, 329 (1987), p. 529-531. DOI: 10.1038/329529a0.
- [3] TAN, Y. Z.; XIE, S. Y.; HUANG, R. B.; ZHENG, L. S. «The stabilization of fused-pentagon fullerene molecules». *Nat. Chem.*, 1 (6) (2009), p. 450-460. DOI: 10.1038/nchem.329.
- [4] FERNÁNDEZ, I.; SOLÀ, M.; BICKELHAUPT, F. M. «Why do cycloaddition reactions involving  $\text{C}_{60}$  prefer [6,6] over [5,6] bonds?». *Chem. Eur. J.*, 19 (23) (2013), p. 7416-7422. DOI: 10.1002/chem.201300648.
- [5] CATALDO, F.; DA ROS, T. *Medicinal chemistry and pharmacological potential of fullerenes and carbon nanotubes*. Dordrecht: Springer Science: Business Media B. V., 2008. (Carbon Materials: Chemistry and Physics; 1) DOI: 10.1007/978-1-4020-6845-4.
- [6] MONTELLANO LÓPEZ, A.; MATEO-ALONSO, M.; PRATO, M. «Materials chemistry of fullerene  $\text{C}_{60}$  derivatives». *J. Mater. Chem.*, 21 (2011), p. 1305-1318. DOI: 10.1039/C0JM02386H.
- [7] FERNANDEZ-DELGADO, O.; CHANDRASEKHAR, P. S.; CANO-SAMPAIO, N.; SIMON, Z. C.; PUENTE-SANTIAGO, A. R.; LIU, F.; CASTRO, E.; ECHEGOYEN, L. «The role of fullerene derivatives in perovskite solar cells: Electron transporting or electron extraction layers?». *J. Mater. Chem.*, 9 (2021), p. 10759-10767. DOI: 10.1039/D0TC05903J.
- [8] ŚLIWA, W. «Cycloaddition reactions of fullerenes». *Fullerene Sci. Technol.*, 3 (3) (1995), p. 243-281. DOI: 10.1080/153638X9508543782.
- [9] TAYLOR, R. «Addition reactions of fullerenes». *C. R. Chim.*, 9 (2006), p. 982-1000. DOI: 10.1016/j.crci.2006.01.004.
- [10] PARERAS, G.; SIMON, S.; POATER, A.; SOLÀ, M. «Successive Diels-Alder cycloadditions of cyclopentadiene to [10]CPP $\text{C}_{60}$ : A computational study» *J. Org. Chem.*, 87 (2022), p. 5149-5157. DOI: 10.1021/acs.joc.1c03116.
- [11] LIU, T. X.; WANG, X.; ZHANG, P.; YANG, P.; LI, X.; ZHANG, G. «Assembly of diverse [60]fullerene-fused tricyclic scaffolds via a palladium-catalyzed cascade [2+2+2] annulation reaction».

*Org. Lett.*, 24 (49) (2022), p. 9102–9106. DOI: 10.1021/acs.orglett.2c03764.

[12] ARTIGAS, A.; CASTANYER, C.; ROIG, N.; LLEDÓ, A.; SOLÀ, M.; PLA-QUINTANA, A.; ROGLANS, A. «Synthesis of fused dihydroazepine derivatives of fullerenes by a Rh-catalyzed cascade process». *Adv. Synth. Catal.*, 363 (15) (2021), p. 3835–3844. DOI: 10.1002/adsc.202100644.

[13] TROST, B. M. «Palladium-catalyzed cycloisomerizations of enynes and related reactions». *Acc. Chem. Res.*, 23 (2) (1990), p. 34–42. DOI: 10.1021/ar00170a004.

[14] AUBERT, C.; BUISINE, O.; MALACRIA, M. «The behavior of 1,*n*-enynes in the presence of transition metals». *Chem. Rev.*, 102 (3) (2002), p. 813–834. DOI: 10.1021/cr980054f.

[15] DIVER, S. T.; GIESSERT, A. J. «Enyne metathesis (enyne bond reorganization)». *Chem. Rev.*, 104 (3) (2004), p. 1317–1382. DOI: 10.1021/cr020009e.

[16] LLEDÓ, A.; VERDAGUER, X.; RIERA, A. «The enantioselective Pauson–Khand reaction». A: RIOS TORRES, Ramon (ed.). *The Pauson–Khand reaction: Scope, variations, and applications*. Chichester, West Sussex: Wiley, 2012. DOI: 10.1002/9781119941934.ch6.

[17] YASUI, T.; NAKAZATO, Y.; KURISAKI, K.; YAMAMOTO, Y. «Enantioselective construction of 5–6–5 tricyclic lactone framework bearing a quaternary bridgehead carbon via Rh-catalyzed asymmetric [2+2+2] cycloaddition of enediyne». *Adv. Synth. Catal.*, 363 (2021), p. 4182–4189. DOI: 10.1002/adsc.202100513.

[18] ARTIGAS, A.; PLA-QUINTANA, A.; LLEDÓ, A.; ROGLANS, A.; SOLÀ, M. «Expedient preparation of open-cage fullerenes by rhodium(I)-catalyzed [2+2+2] cycloaddition of diynes and C<sub>60</sub>: An experimental and theoretical study». *Chem. Eur. J.*, 24 (42) (2018), p. 10653–10661. DOI: 10.1002/chem.201802298.

[19] CHINCHILLA, R.; NÁJERA, C. «The Sonogashira reaction: A booming methodology in synthetic organic chemistry». *Chem. Rev.*, 107 (3) (2007), p. 874–922. DOI: 10.1021/cr050992x.

[20] LLOYD-JONES, G. C. «Mechanistic aspects of transition metal catalysed 1,6-diene and 1,6-enyne cycloisomerisation reactions». *Org. Biomol. Chem.*, 1 (2) (2003), p. 215–236. DOI: 10.1039/b209175p.

[21] CASTANYER, C.; ARTIGAS, A.; INSA-CARRERAS, N.; SOLÀ, M.; PLA-QUINTANA, A.; ROGLANS, A. «Rh-catalyzed cycloaddition of C<sub>60</sub> with enynes: Unveiling the mechanistic pathway». *Adv. Synth. Catal.*, 366 (2024), p. 862–869. DOI: 10.1002/adsc.202301189.

[22] SANFORD, M. S.; LOVE, J. A.; GRUBBS, R. H. «Mechanism and activity of ruthenium olefin metathesis catalysts». *J. Am. Chem. Soc.*, 123 (27) (2001), p. 6543–6554. DOI: 10.1021/ja010624k.

[23] KINOSHITA, A.; MORI, M. «Ruthenium catalyzed enyne metathesis». *Synlett*, 1994 (12) (1994), p. 1020–1022. DOI: 10.1055/s-1994-34973.



P. Godori



A. Pla-Quintana



A. Roglans

**Pau Godori** és llicenciat en química (2022) per la Universitat de Girona, amb un treball de fi de grau sobre la síntesi d'enins per a la funcionalització de ful·lerens mitjançant un procés en cascada catalitzat per ruteni. Posteriorment, va cursar el Màster en Formació del Professorat d'ESO i Batxillerat, Formació Professional i Ensenyament d'Idiomes (2023). Des del setembre de 2023 treballa en un institut d'educació secundària.

**Anna Pla-Quintana** és doctora en química (2000) per la Universitat de Girona i actualment és professora agregada del Departament de Química i investigadora a l'Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC) d'aquesta mateixa universitat. Els seus interessos de recerca abasten el desenvolupament metodològic i els estudis mecanístics de les reaccions de cicloaddició de substrats poliinsaturats, el desenvolupament de processos en cascada basats en la metàtesi carbè-alquí i l'ús de la catàlisi predictiva com a eina per a optimitzar i millorar els processos químics.

**Anna Roglans** és doctora en química (1994) per la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB). Després d'una estada postdoctoral a la Universitat de Waterloo (Canadà) i d'una altra al Departament de Química de la UAB, l'any 1999 va obtenir una plaça de professora titular a la Universitat de Girona. Des de l'any 2010 és catedràtica de química orgànica en el Departament de Química i investigadora a l'Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC) de la mateixa universitat. Els seus interessos de recerca inclouen l'estudi metodològic i mecanístic de processos catalítics emprant metalls de transició; en particular, les reaccions de ciclació de substrats poliinsaturats i la funcionalització de ful·lerens.