



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** PÉREZ ÁLVAREZ, EMILIO MANUEL

**Referencia:** RYC-2008-03022

**Area:** Química

**Número de orden:** 1 **Correo electrónico:** emiliomperez@quim.ucm.es

**Título:**

Nanotubos orgánicos autoensamblados. Precursores de bombas de iones artificiales.

**Resumen de la Memoria:**

Proponemos sintetizar una serie de macrociclos electroactivos decorados con bisureas para la formación de nanotubos orgánicos mediante autoensamblaje. La cavidad de los nanotubos autoensamblados será utilizada en varios campos de investigación, como el reconocimiento molecular, catálisis, síntesis con plantilla, y transporte pasivo de iones a través de membranas lipídicas. Las dos características claves de los sistemas propuestos son: 1) la inclusión de centros electroactivos, lo que nos permitiría controlar los procesos de ensamblaje-desensamblaje mediante un estímulo limpio, como la electroquímica y 2) las estructuras simples y simétricas de los macrociclos propuestos deberían permitir la introducción de una gran variedad estructural con relativamente poco esfuerzo sintético. Además, se pretende utilizar los nanotubos autoensamblados para formar poros unimoleculares selectivos para aniones, y estos a su vez como fragmentos para la construcción de bombas de iones artificiales basadas en un mecanismo de tipo "Brownian ratchet". Estas Brownian ratchets son bien conocidas dentro de la biofísica, pero el diseño de fragmentos moleculares que permitan su aplicación práctica es un área prácticamente inexplorada. We propose to synthesize a series of electroactive bisurea macrocycles for their self-assembly into stimuli-responsive organic nanotubes. We plan to utilize the cavity of the nanotubes in a wide range of research fields, such as molecular recognition, catalysis, templated synthesis and passive ion transport through lipid membranes. The two key features of these first structures are: 1) the inclusion of redox centres, which allows for control over the assembly-disassembly process by means of a residue-free stimulus, such as electrochemistry; and 2) the simple, symmetric structure of the macrocycles, based on already established synthetic methods, which should allow for the inclusion of a high degree of structural variety at a relatively low synthetic cost. Furthermore, we intend to exploit the supramolecular ensembles to form unimolecular redox-gated anion-selective ion pores, which in turn, we intend to use as stimuli-responsive fragments in the construction of electrochemically powered molecular pumps, based on a brownian ratchet mechanism. This type of flash-ratchet mechanisms have already been described in the literature, but the design of molecular fragments that would allow for their practical realisation is still underexplored. Finding the necessary stimuli-responsive fragments and learning how to put them together would be the ultimate goal of this research proposal.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

Me licencié en Ciencias Químicas por la Universidad de Salamanca en junio 2000, encontrándose mi expediente entre el 10% de los mejores de mi promoción. Durante mi último año de carrera, y en el posterior, llevé a cabo mi Trabajo de Grado "Diseño y síntesis de un receptor molecular para derivados de  $\alpha$ -aminoácidos", bajo la dirección de Joaquín Rodríguez Morán, que fue calificado como Sobresaliente cum Laude. Durante esta etapa, adquirí conocimientos sólidos sobre síntesis orgánica, reconocimiento molecular, e interacciones no covalentes. El trabajo desarrollado en Salamanca se vio reflejado en dos publicaciones en Tetrahedron Letters. En Octubre de 2001 me trasladé a la Universidad de Edimburgo para realizar mi tesis doctoral bajo la supervisión de David A. Leigh, investigando en la construcción y aplicación de satélites moleculares como maquinaria molecular. En mi estancia de tres años y medio en Edimburgo estuve expuesto a una gran variedad de disciplinas científicas, desde la síntesis orgánica al nivel más avanzado o la ciencia de materiales hasta la física teórica que estudia la maquinaria molecular que encontramos en la Naturaleza. De mi tesis doctoral "Hydrogen-bonded synthetic molecular machines" se extrajeron varias publicaciones en las mejores revistas de química y ciencia de materiales internacionales. Además, recientemente fue reconocida por la IUPAC como una de las cinco tesis más sobresalientes en Ciencias Químicas a nivel mundial en 2005. Desde Edimburgo, tuve la oportunidad de colaborar con grupos de investigación italianos (F. Zerbetto), holandeses (P. Rudolf), ingleses (D. Haddleton), etc. Desde Marzo de 2005 formo parte del grupo de Materiales Moleculares Orgánicos del Prof. Nazario Martín, de la Universidad Complutense de Madrid, a partir de Noviembre como investigador contratado bajo el programa Juan de la Cierva. En este periodo he tenido la ocasión de aprender sobre la síntesis y propiedades de materiales electroactivos, especialmente sobre la química de fullerenos y derivados de tetraiafulvaleno. La labor de investigación realizada en estos años ha resultado, por el momento, en cinco publicaciones de máximo nivel internacional.



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** MARTIN ROMO, RUBEN

**Referencia:** RYC-2008-03487

**Area:** Química

**Número de orden:** 2 **Correo electrónico:** maparusa@yahoo.es

**Título:**

Activación de CO<sub>2</sub> via funcionalización de Enlaces C-H

**Resumen de la Memoria:**

Incorporar criterios de sostenibilidad es hoy aceptado por gobiernos e industrias como una iniciativa necesaria para alcanzar objetivos socio-económicos y ambientales. El descubrimiento de nuevas transformaciones sintéticas utilizando fuentes de energía renovables es hoy en día uno de los grandes retos de la química orgánica preparativa. En este contexto, la mejor alternativa es utilizar dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) como materia prima, evitando así un consumo excesivo del petróleo y reduciendo emisiones de CO<sub>2</sub>. Además, CO<sub>2</sub> es barato, abundante y es un reactivo químico aceptado por criterios medioambientales. Por otro lado, hay una creciente demanda por métodos con "economía atómica". En este contexto, la funcionalización de enlaces C-H es una estrategia que ha revolucionado la comunidad científica permitiendo establecer nuevas tácticas y estrategias sintéticas completamente innovadoras. El objetivo de esta propuesta científica es establecer una combinación de dos disciplinas: funcionalización de enlaces C-H y activación de CO<sub>2</sub>. Así, se proporcionarán soluciones sencillas y concretas a procesos químicos relevantes para la investigación académica e industrial, sin perder de vista su impacto ambiental. Por ejemplo, la síntesis de ácidos carboxílicos, un proceso de gran importancia para la industria farmacéutica, se consigue hoy en día con procedimientos muy poco rentables tanto económica como ambientalmente, como por ejemplo la hidrólisis de nitrilos, oxidación de fragmentos previamente oxidados o bien mediante reacciones con cantidades estequiométricas de complejos organometálicos. Por consiguiente, el desarrollo de una metodología catalítica que permita acceder a estos compuestos mediante inserciones de CO<sub>2</sub> sería muy atractivo desde el punto de vista académico e industrial. La amplia experiencia adquirida en mis estancias postdoctorales en dos de los centros más prestigiosos en el desarrollo de nuevas metodologías sintéticas basadas en metales de transición, como son el Max-Planck Institut für Kohlenforschung y el Massachusetts Institute of Technology, me permitirán abordar este proyecto con muchas garantías. Desde un punto de vista metodológico, la combinación de métodos experimentales y computacionales serán imprescindibles para entender estos procesos químicos y poder diseñar mejoras sustanciales de los mismos. El carácter multidisciplinario de este proyecto permite la alternativa de utilizar CO<sub>2</sub> supercrítico, mucho más benigno ambientalmente. De esta manera se podrían establecer activas colaboraciones con otros grupos de investigación y/o compañías farmacéuticas.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

El solicitante, Ruben Martin Romo, se licenció en Ciencias Químicas por la Universidad de Barcelona (1999). Acto seguido, inició su tesis doctoral en el departamento de Química Orgánica de la Universidad de Barcelona bajo la supervisión del profesor Antoni Riera, obteniendo el grado de doctor en ciencias Químicas en Noviembre de 2003 con la calificación de Summa Cum Laude. Su trabajo se centró en el diseño de nuevas aproximaciones sintéticas a la síntesis total de inhibidores de glicosidas, enzimas involucrados en muchas enfermedades metabólicas, como el cáncer, HIV o diabetes. Durante su doctorado, realizó una estancia de 3 meses en el Max-Planck Institut für Kohlenforschung bajo la dirección del profesor Alois Fürstner. Tras el doctorado, se incorporó al grupo del profesor Alois Fürstner con una prestigiosa beca postdoctoral Alexander von Humboldt. Durante ese tiempo, su investigación se centró en la implementación de catalizadores de hierro para reacciones de cross-coupling con haluros de alquilo y reacciones de cicloisomerización o cicloadición. Durante ese tiempo, se realizaron además estudios mecanísticos, pudiéndose aislar y caracterizar especies intermedias de las reacciones anteriormente mencionadas, permitiendo el diseño de nuevas transformaciones sintéticas. Desde abril de 2005 hasta la fecha actual realiza su segunda estancia postdoctoral como becario postdoctoral (MEC) en el Massachusetts Institute of Technology bajo la dirección del profesor Stephen L. Buchwald. Su investigación actual se centra en el desarrollo de reacciones catalizadas por sales de cobre o paladio para la formación de enlaces carbono-carbono y carbono-nitrógeno. Durante ese tiempo ha dirigido personalmente la investigación de 4 alumnos visitantes. En resumen, durante la totalidad de su trayectoria científica hasta la fecha ha realizado estancias pre- y postdoctorales en centros de investigación de prestigio internacional (Max-Planck Institut y Massachusetts Institute of Technology), ha formado parte del equipo investigador de proyectos financiados por entidades públicas y privadas y ha presentado diversas comunicaciones en congresos, incluidas presentaciones orales. El solicitante es autor de 15 publicaciones (14 de ellas como primer autor), de las cuales 2 son artículos de revisión: (1) Org. Lett. 2000, 2, 93. (2) Tetrahedron 2001, 57, 6367. (3) J. Org. Chem. 2002, 67, 6896. (4) Angew. Chem. Int. Ed. 2004, 43, 3955 (seleccionado como "very important paper"). (5) J. Org. Chem. 2005, 70, 2325. (6) Chem. Lett. 2005, 34, 624. (7) J. Am. Chem. Soc. 2005, 127, 12236. (8) Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7079 (seleccionado como "hot paper"). (9) J. Am. Chem. Soc. 2007, 129, 3844. (10) Org. Lett. 2007, 9, 3379. (11) Angew. Chem. Int. Ed. 2007, 38, 7236 (seleccionado como "hot paper"). (12) Org. Lett. 2007, 9, 5521. (13) J. Am. Chem. Soc. 2008, 130, 1992. (14) Acc. Chem. Res. 2008 (aceptado para publicación, actualmente en prensa). (15) J. Am. Chem. Soc. 2008 (enviado).



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** LOPEZ FERNANDEZ, JAVIER

**Referencia:** RYC-2008-02493

**Area:** Química

**Número de orden:** 3 **Correo electrónico:** JAVIER.LOPEZ@URV.CAT

**Título:**

Estructuras con propiedades magnéticas y conductoras: estudio mecano-cuántico de polioxometalatos y cadenas atómicas metálicas extendidas en fase homogénea y heterogénea

**Resumen de la Memoria:**

La principal motivación del proyecto de investigación es avanzar, usando herramientas computacionales basadas en la mecánica cuántica, en el conocimiento de dos tipos de estructuras con propiedades magnéticas o eléctricas relevantes: los polioxometalatos (POMs) y las cadenas metálicas atómicas extendidas (EMACs). Hasta la fecha, los estudios computacionales, aunque abundantes, se realizaron con la aproximación de fase gas o simulando un disolvente con modelos de continuo. Se pretende dar un paso más y avanzar hacia sistemas periódicos. Las líneas principales de investigación son dos: Primero, modelizar POMs de gran tamaño, como  $[\text{Cu}_{20}\text{Cl}(\text{OH})_{24}(\text{H}_2\text{O})_{12}(\text{P}_8\text{W}_{48}\text{O}_{184})]^{25-}$ , un macroanión en el que los 20 átomos de Cu son paramagnéticos, estudiar sus propiedades magnéticas y dar explicación a las medidas experimentales. También se ahondará en la comprensión de sistemas con lantánidos y actínidos, para los que se han realizado cálculos DFT preliminares. El estudio de dichos sistemas levanta un gran interés debido a sus posibles aplicaciones en campos como la catálisis. Asimismo existe un creciente interés en reacciones catalizadas por unidades de Keggin o similares adsorbidas sobre superficies y en la estabilización de nanopartículas por POMs. Modelizar la adsorción de estos óxidos metálicos requiere técnicas periódicas. Se iniciará el estudio con el sistema  $\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}$  sobre la superficie de Ag(100). Posteriormente se intentará comparar este resultado al de aniones de diferente carga, como  $\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$  y  $\text{AlW}_{12}\text{O}_{40}$ . Alternativamente se analizará la adsorción, más débil, sobre superficies de Au. Una vez realizado el estudio de la adsorción de POMs, se pretende estudiar la coadsorción de éstos con pequeñas moléculas como CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O y átomos de H y O. Segundo, el estudio teórico de EMACs, cadenas con propiedades magnéticas y conductoras que, junto a su reducido tamaño y sencillez, pueden convertirse en elementos clave en nanoelectrónica. Los objetivos son dos fundamentalmente: (i) analizar en profundidad el magnetismo y la conducción eléctrica, las variables que influyen y, a ser posible, la cuantificación de tales fenómenos. Los estudios conllevarán el análisis DFT o CASSCF/CASPT2 de la estructura electrónica, diversos estados de spin y de los orbitales moleculares involucrados. Y (ii), explorar la adsorción sobre superficies metálicas, un proceso ya descrito sobre capas metálicas de oro, que permite medir la conducción eléctrica.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

Formación- Doctorado europeo Cum Laude y mención especial del tribunal, obtenido en octubre de 2003. Titulado "Theoretical study of the basicity and the redox properties of heteropolyanions". Dirigido por Josep M. Poblet y Carles Bo.- Licenciatura en Química por la Universitat de Barcelona (1999). Carrera científica- Becario predoctoral (Universitat Rovira i Virgili): 01-09-1999 hasta 31-08-2003.- Profesor Asociado (Universitat Rovira i Virgili): 20-11-2003 hasta 31-08-2004.- Becario Postdoctoral MECD (Université Louis Pasteur, Estrasburgo): 01-09-2004 hasta 31-08-2006.- Profesor Lector (Universitat Rovira i Virgili): desde 04-09-2006. Publicaciones en revistas- 23 artículos publicados o aceptados (5 en J. Am. Chem. Soc., 2 en Angewandte Chemie, 1 en Chemical Society Reviews, 8 en Inorganic Chemistry, 1 en Dalton Trans. entre otros). Contribuciones orales o poster en varios congresos de ámbito nacional e internacional. Cursos recibidos- "Curs interuniversitari de doctorat en Química teòrica i computacional". Universitat Jaume I, Castellón (2000). - "Multilayer hybrid methods: IMOMM, ONIOM and others". Centre de Supercomputació de Catalunya, Barcelona (2000). Idiomas- Título oficial de nivel en lengua inglesa "First Certificate" (1998).- Curso online de edición de textos científicos. Universitat Rovira i Virgili (2004). Conocimientos en tecnologías de la información- Programación: nivel medio-alto de FORTRAN y nociones de C y TCL-TK.- Diseño de páginas web: nivel medio-alto de PHP, HTML, y nociones en el uso de MySQL, gestor de bases de datos tipo Structured Query Language.- Sistemas operativos: a nivel administrador sistemas Linux, UNIX y Windows. A nivel usuario Mac/OS.- Programas de cálculo científico: ADF, Gaussian, Turbomole, Jaguar.- Uso de sistemas de colas de cálculo, explotación de clusters de PC's en paralelo y supercomputadoras tipo Sun y HP.- Paquetes de visualización y análisis molecular: Crystallmaker, Molekel, ADFview, Molden, Cerius y otros.- Experiencia en el acceso a la base de datos Cambridge Structural Database (CSD). Docencia Siete años de actividad docente en la Universitat Rovira i Virgili, todos para la Licenciatura de Química, plan 1993. Materias impartidas:- "Aplicación de la Informática a los Problemas Químicos" (2º año): cursos 1999/2000 (30 h), 2000/01 (30 h), 2001/02 (30 h), 2002/03 (30 h), 2003/04 (15 h).- "Termodinámica Química" (2º año): cursos 2001/02 (30 h), 2002/03 (30 h), 2003/04 (30 h).- "Experimentación en Química Analítica y Química Física I" (2º año): cursos 1999/2000 (75 h), 2000/01 (75 h), 2006/07 (75 h), 2007/08 (75 h, coordinador de la asignatura).- "Experimentación en Química Avanzada II" (3º año): cursos 2000/01 (30 h), 2001/02 (9 h), 2003/04 (30 h).- "Espectroscopia molecular" (3º año): cursos 1999/2000 (15 h), 2006/07 (30 h), 2007/08 (30 h).- "Enlace Químico y Estructura de la Materia" (1º año): cursos 2006/07 (23 h), 2007/08 (23 h).- "Química Física Avanzada" (3º año): cursos 2003/04 (10 h), 2006/07 (45 h), 2007/08 (45 h). Otros- Participación y coordinación en el stand de la Facultad de Química en la Semana de la Ciencia celebrada en Tarragona en noviembre de 2007.- Miembro del tribunal de tesis de Alfred Gil Arranz (Universitat Rovira i Virgili, Tarragona, 2007).- Participación si



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** DESCALZO LÓPEZ, ANA BELÉN

**Referencia:** RYC-2008-02121

**Area:** Química

**Número de orden:** 4 **Correo electrónico:** andeslo@yahoo.es

**Título:**

Combinación de indicadores fluorescentes infrarrojo cercano y materiales nanométricos. Nuevas estrategias para nanosensores ópticos para pequeños analitos y/o biomarcadores

**Resumen de la Memoria:**

Este proyecto multidisciplinar tiene como objetivo explorar nuevas posibilidades para sensores químicos ópticos mediante la combinación de las propiedades espectroscópicas óptimas de fluoróforos rojo / infrarrojo cercano (NIR) con recursos de la química de materiales. El objetivo es la construcción de nanosondas fluorescentes eficaces para la detección óptica de pequeños analitos de interés bioquímico, clínico o medioambiental, tales como oxoaniones, poliaminas y (poli)sacáridos. Los métodos basados en la detección por fluorescencia son muy apreciados por su sensibilidad, porque ofrecen gran cantidad de información, son métodos no destructivos y además permiten medidas en tiempo real y resueltas espacialmente. La región rojo / NIR del espectro comprendido entre 650 y 900 nm es ventajosa ya que aquí, la absorción del agua, dispersión de la luz, autofluorescencia o absorción por tejidos y células es mínima. Estas atractivas características, junto con el desarrollo de fuentes de excitación y detectores para el NIR asequibles y potentes, han incrementado la demanda de nuevos fluoróforos o materiales fluorescentes que puedan ser excitados y emitan dentro de esta zona espectral. La estrategia clásica (molecular) para la construcción de sensores químicos fluorescentes normalmente implica el acoplamiento covalente de un fluoróforo a un receptor. Sin embargo, el diseño de ligandos para la coordinación efectiva de analitos en muestras acuosas puede ser costoso. La investigación de nuevos materiales aquí está conduciendo al desarrollo de sondas con propiedades mejoradas. Materiales sensores (ya sea polímeros de silice u orgánicos) pueden prepararse en forma de nanopartículas. La encapsulación de indicadores en nanopartículas presenta varias ventajas. Es posible su distribución en células, la fotoestabilidad y la sensibilidad mejoran (miles de fluoróforos pueden ser incorporados en una única partícula) y los indicadores están protegidos de interferentes y un ambiente puramente acuoso. Adicionalmente, permite la creación de sistemas de detección avanzados. Por ejemplo, el indicador y un segundo fluoróforo pasivo pueden encapsularse en la misma partícula para medidas ratiométricas. Por otro lado, la fijación de colorantes y receptores artificiales en ensamblajes nanométricos pueden cambiar completamente las propiedades moleculares. El anclaje de múltiples receptores en la superficie de las nanopartículas proporciona múltiples sitios de coordinación con el analito. Además, procesos como transferencia de energía o amplificación de la señal pueden ocurrir debido a la proximidad espacial de los fluoróforos / analitos en las partículas nanométricas. Se planean diferentes estrategias para la detección. Por ejemplo, la coordinación de oxoaniones puede mejorarse por el aislamiento de los indicadores del agua en el núcleo de nanopartículas poliméricas. Por otro lado, analitos polivalentes como poliaminas y polisacáridos pueden enlazar simultáneamente más de una nanopartícula e inducir su agregación. Esto último puede ser empleado para la señalación vía procesos de transferencia de energía de fluorescencia por resonancia (FRET) mediante el empleo de nanopartículas funcionalizadas con pares FRET dador-aceptor.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

La candidata Ana B. Descalzo finalizó sus estudios de Química en la Universidad de Valencia en 1999. En 2000-2004 realizó su tesis doctoral "Síntesis y estudio de derivados de 3-H-fenoxazin-3-ona y aminometilntraceno en disolución y soportados sobre sólidos mesoporosos tipo MCM-41 para su aplicación como sensores moleculares ópticos" en el Departamento de Química de la Universidad Politécnica de Valencia con una beca FPI del Ministerio de Ciencia y Tecnología bajo la dirección de Ramón Martínez Máñez y Juan Soto Camino, obteniendo la calificación de Sobresaliente Cum Laude. Durante su doctorado, realizó dos estancias breves en 2002 y 2003 en el Instituto Federal para la Investigación y Prueba de Materiales (BAM), en Berlín (Alemania) con Knut Rurack. Los resultados obtenidos durante las estancias predoctorales y las posibilidades de trabajo en el laboratorio de la Div. I.52-Bioanalytics-Fluorescence Spectroscopy, equipado con instrumentación state-of-the-art para fluorimetría, la animaron a realizar una estancia postdoctoral en el mismo centro. Para su postdoc, fue premiada con dos becas de reconocido prestigio como Alexander von Humboldt Fellowship (01.07.2005 – 31.08.2006) y Marie Curie Intreuropean Fellowship (01.09.2006-31.08.2008). La principal línea de investigación durante su estancia postdoctoral ha comprendido la síntesis y caracterización de nuevas sondas fluorescentes rojo / infrarrojo cercano, empleando fundamentalmente colorantes tipo (hemi)cianina, boro-dipirrometano (BODIPY) y porfirinas expandidas. Ha adquirido una base sólida en técnicas de espectroscopía de fluorescencia UV-Vis-NIR en el estado estacionario y resuelta en el tiempo (con un fluorímetro láser de impulsos ultracortos Ti:Sapphire para la medida de procesos de decaimiento de fluorescencia en el dominio de los pico- a los microsegundos) y ha preparado nanopartículas y capas poliméricas dopadas con algunos de los colorantes para su aplicación analítica y en técnicas de imaging. Ha empleado programas mecanocuánticos (Gaussian 03) para la predicción de propiedades moleculares (transiciones ópticas, orbitales moleculares y optimización de geometrías) y ha entrado en contacto con otras técnicas como microscopía confocal láser de barrido, fotoluminiscencia FTIR y espectroelectroquímica. Durante los ocho años de su carrera investigadora, la candidata ha participado en 8 proyectos de investigación, ha publicado un total de 18 artículos, la mayoría en revistas de alto índice de impacto como Angew. Chem. Int. Ed. (3) J. Am. Chem. Soc. (2), Adv. Mater. (1), Chem. Commun. (3), Org. Lett. (1) ó J. Mater. Chem. (2), siendo primera autora en 10 de ellos. Entre éstos, se incluye un trabajo de revisión "The supramolecular chemistry of organic-inorganic hybrid materials" publicado en 2006 en Angewandte Chemie. Así mismo, es co-autora de 3 patentes, 2 de ellas internacionales y de 14 comunicaciones a congresos y reuniones científicas.



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** RENDÓN MÁRQUEZ, NURIA

**Referencia:** RYC-2008-02295

**Area:** Química

**Número de orden:** 5      **Correo electrónico:** nuria@iiq.csic.es

**Título:**

Complejos de metales de transición con ligandos arilóxidos voluminosos soportados en sílice. Activación C-H. Ciclopropanación de alquenos.

**Resumen de la Memoria:**

La Química Organometálica de superficies (SOMC) ha experimentado un importante auge en los últimos años como consecuencia en parte del gran interés que la industria química ha mostrado por este campo, puesto que supone una nueva herramienta para la síntesis racional, la comprensión y la mejora de catalizadores heterogéneos. En los años noventa, J.-M. Basset y colaboradores publicaron uno de los primeros catalizadores heterogéneos bien definidos, un compuesto tris(alquilo) de zirconio soportado en sílice. Desde entonces se ha descrito en la bibliografía la inmovilización de complejos de numerosos metales de transición (Ti, Zr, Hf, V, Ta, Cr, Mo, W, y Re) y se han investigado numerosas reacciones de estos complejos organometálicos soportados, como las de metátesis de olefinas, polimerización de olefinas, transesterificaciones, oxidaciones y reducciones. El proyecto propuesto pretende investigar la síntesis de diferentes complejos de metales de transición con ligandos voluminosos, fundamentalmente derivados de 2,6-difenil fenol (P. P. Power, I. P. Rothwell y otros autores), y en concreto el uso de éstos como ligandos auxiliares que a su vez coordinados a un centro metálico se pueden soportar en sílice. Se conocen algunos compuestos de Zn(II) y Cd(II) que son activos en la copolimerización de epóxidos y dióxido de carbono, mientras que ciertos derivados de wolframio se han empleado en la metátesis de olefinas. Más recientemente se ha descrito en la bibliografía (J-M Basset y colaboradores) arilóxidos de zirconio soportados en sílice como catalizadores en la reacción de homologación de propano. En este contexto, en la línea de trabajo propuesta, se pretenden sintetizar, de una parte, complejos de diferentes metales de transición (Au, Pd, Pt,...) con estos ligandos arilóxidos voluminosos (caracterización estructural, reactividad y estudio de mecanismos de reacción: activación C-H, ciclopropanación de alquenos) y, de otra parte, su posterior soporte en sílice y caracterización de las especies formadas en superficie. El objetivo principal será la formación de catalizadores potenciales ajustando la coordinación en torno al metal para poder llegar a un control en la reactividad y selectividad de los procesos a estudiar.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

La solicitante, Nuria Rendón Márquez, se licenció en Ciencias Químicas por la Universidad de Sevilla en 2001. Alumna interna del departamento de Química Inorgánica con una beca-colaboración del MEC (curso 2000-01). Beca Introducción a la Investigación en el grupo de Química Organometálica y Catálisis Homogénea del Instituto de Investigaciones Químicas (Centro mixto Universidad de Sevilla - CSIC), dirigido por el Profesor Ernesto Carmona Guzmán, y bajo la supervisión de la Dra. Margarita Paneque Sosa (2001). En 2002, inició sus estudios de doctorado bajo la dirección de los doctores Manuel López Poveda y Margarita Paneque Sosa, financiados por una beca predoctoral FPU del MEC. Los trabajos de investigación durante este periodo (2002-2005) culminaron con la obtención del grado de Doctora en Ciencias Químicas por la Universidad de Sevilla en diciembre de 2005 con la calificación de Sobresaliente Cum Laude. Su Tesis Doctoral (Premio Extraordinario de Doctorado por la Universidad de Sevilla) titulada "Reactividad de alquinos frente a complejos de Ir y TpMe<sub>2</sub>", se basó en el estudio de las reacciones de activación de enlaces C—H y de formación de enlaces C—C en presencia de metales de transición. Estancia predoctoral (2004) en el Departamento de Química de la Universidad de York (Reino Unido) bajo la supervisión del Dr. Robin Perutz (estudio de la reactividad de complejos de Rodio con ligandos ciclopentadienilo o tris(pirazolil)borato con piridinas fluoradas, activaciones de enlaces C-F). En el marco de una Acción Integrada, estancia posdoctoral (2006) en el Laboratorio de Química Orgánica y Organometálica de la Universidad de Burdeos I (Francia), bajo la supervisión del Dr. Sylvain Nlate (anclaje de catalizadores organometálicos de Rh e Ir en la esfera exterior de dendrímeros funcionalizados). La solicitante ha participado en varios proyectos de investigación: BQU2001-1995, CTQ2004-00409/BQU y EXC/2005/FQM-672. Ha colaborado como profesora asistente en docencia de prácticas de laboratorio de la Licenciatura de Química, en las asignaturas de Química Inorgánica I, Ampliación de Química Inorgánica y Experimentación en Síntesis Inorgánica. En la actualidad, y desde noviembre de 2006, disfruta de una beca posdoctoral del MEC en el Laboratorio de Química Organometálica de Superficies LCOMS, CPE-Lyon (CNRS), Villeurbanne (Francia), bajo la supervisión del Dr. Christophe Copéret. Líneas de investigación: Estudio de la estructura de sitios activos de Fe en sílice (catalizadores en reacciones de oxidación), complejos imido-alquilideno de Mo bien definidos soportados en sílice (catalizadores en metátesis de olefinas) y el estudio de las propiedades ópticas en complejos de elementos lantánidos soportados en sílice. Parte de los resultados obtenidos, tanto en su etapa predoctoral como posdoctoral, se han publicado en revistas de reconocido prestigio internacional: 1 Angewandte Chemie International Edition (VIP), 3 Journal of the American Chemical Society, 4 Organometallics, 1 Dalton transactions, 1 Chemistry, a European Journal, 1 European Journal of Inorganic Chemistry (1 Organometallics y 1 Chemical Communication enviados). También se han presentado 10 contribuciones a congresos tanto internacionales como de ámbito nacional.



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** ALCARAZO VELASCO, MANUEL

**Referencia:** RYC-2008-02486

**Area:** Química

**Número de orden:** 6      **Correo electrónico:** alcarazo@mpi-muelheim.mpg.de

**Título:**

Aplicaciones de ligandos de tipo carbodifosforano en catálisis homogénea

**Resumen de la Memoria:**

Estudios teóricos recientes sobre el enlace y la reactividad de los carbodifosforanos  $C(PR_3)_2$  han renovado el interés en esta clase excepcional de ligandos. Estos compuestos presentan un átomo de carbono (0) central estabilizado por dos ligandos de tipo fosfina. Estudios teóricos de las propiedades de estos compuestos muestran que son capaces de actuar como ligandos extremadamente donadores de tipo sigma y pi. De hecho, se predice que deben ser incluso más donadores que los ya clásicos carbenos N-heterocíclicos. Sería interesante llevar a cabo el estudio experimental de las propiedades calculadas teóricamente y su posible implicación en procesos catalíticos en los que ligandos extremadamente donadores muestran un papel fundamental. Una de las reacciones donde estos ligandos podrían tener propiedades prometedoras es el caso de la metátesis de olefinas. De esta reacción no sólo se conoce detalladamente su mecanismo, sino que está probado que la actividad catalítica del catalizador depende enormemente de la capacidad donadora de los ligandos coordinados al átomo central de Ru. Adicionalmente, aún son necesarios catalizadores para este proceso que sean más reactivos y al mismo tiempo selectivos, especialmente para su aplicación en la síntesis de productos naturales complejos con diversas funcionalidades. Considerando los enormes requerimientos estéricos de estos compuestos, otra área en la que podrían encontrar aplicaciones es en el campo de las "parejas de Lewis frustradas". Cuando requerimientos estéricos excesivos impiden la típica interacción donador-aceptor entre ácidos y bases de Lewis, se observan reactividades inusuales, como la activación reversible de hidrógeno o de olefinas en ausencia de metales. Los carbodifosforanos presentan un enorme potencial en este área, no sólo porque son mucho más modulables estéricamente que las fosfinas (al ser posible combinar dos fosfinas distintas alrededor del mismo carbono central), sino también porque son donadores potenciales de cuatro electrones en vez de sólo dos y por tanto la activación simultánea de más de una molécula y la interacción entre dos moléculas distintas activadas podría ser posible. Adicionalmente, será llevada a cabo la síntesis de versiones quirales así como versiones cíclicas de estos compuestos a partir de bifosfinas quirales para evaluar sus posibles aplicaciones en el campo de la catálisis asimétrica. Una previsible aplicación de estos ligandos es en los procesos catalizados por Au(I), donde las versiones asimétricas son aún hoy escasas. Por último, se estudiarán también las posibles aplicaciones de los carbodicarbenos diprotonados en el campo de la organocatálisis. La acidez de estos compuestos, de fórmula general  $H_2C(PR_3)_2^{++}$ , es similar a la de los ácidos fosfóricos quirales derivados de binol que son usados ampliamente como organocatalizadores. Así, cabe esperar una reactividad similar con la ventaja adicional de la fácil síntesis de los catalizadores propuestos.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

Me licencié en Ciencias Químicas en la Universidad de Sevilla en 2000. Realicé mi doctorado entre 2001 y 2005 en el Departamento de Química Bioorgánica del Instituto de Investigaciones Químicas del CSIC. Durante este tiempo disfruté de una Beca predoctoral FPU concedida por el ministerio de Educación. Mi tesis, con la que obtuve la calificación de sobresaliente cum laude y el premio extraordinario de doctorado fue dirigida por los doctores J.M. Lassaletta y R. Fernández. En mi Tesis llevé a cabo el estudio de la química de coordinación de las bishidrazonas quirales de glioxal y su aplicación en catálisis asimétrica. También estudié durante este periodo la síntesis de nuevos carbenos N-Heterocíclicos con sustituyentes dialquilamino así como otros carbenos basados en estructuras heterocíclicas no utilizadas hasta el momento. Adicionalmente, durante este periodo realicé varias estancias breves en centros de reconocido prestigio como las Universidades de Oxford, con el Prof. J.M. Brown o la Universidad de Aarhus con el Prof. K.A. Jorgensen. Los resultados de estas investigaciones fueron publicadas en artículos aceptados en revistas de reconocido prestigio internacional: Chem. Commun, 2004, 298; JACS, 2004, 13242; JACS, 2005, 3290; siendo el primer autor en todas ellas. Posteriormente me incorporé, con una beca postdoctoral del ministerio de Educación, al Max Planck Institute für Kohlenforschung bajo la dirección de su director, el profesor Alois Fürstner. Desde un primer momento mi supervisor me permitió llevar a cabo mis propios proyectos, siendo el primero de ellos la introducción de un carbeno N-hererocíclico clásico en la estructura de un ciclofano. De esta forma estudiamos cómo las propiedades electrónicas de los carbenos se podían modificar a través del espacio al cambiar los sustituyentes sobre el segundo anillo aromático del ciclofano. Este trabajo ha sido publicado recientemente en JACS, 2007, 12676. El segundo de los temas en los que he estado trabajando implica el estudio de la química de coordinación de ene-1,1-diaminas, compuestos que presentan propiedades electrónicas similares a las de los iluros por la polarización del doble enlace C=C. Esta investigación también ha sido publicada en una revista de reconocido prestigio como Angew. Chem. (DOI 10.1002/ANIE.200705798 publicado online 17 marzo 2008) Concluída la beca postdoctoral del MEC obtuve una beca postdoctoral de la sociedad Max Planck que me ha permitido continuar mi estancia en el mismo centro. En estos momentos estudio la química de coordinación de carbodifosfinas y carbodicarbenos, así como sus posibilidades como ligandos en el campo de la catálisis homogénea. Desde que obtuve esta última beca codirijo también las tesis doctorales de dos estudiantes de doctorado. La primera estudia las posibilidades de síntesis asimétrica de ciclofanos plano-quirales y sus aplicaciones en catálisis asimétrica y la segunda versa sobre la síntesis total de metabolitos oxilipínicos aislados del alga marrón Eisenia bicyclis y el estudio de la actividad biológica de estos compuestos. Finalmente cabe decir que los resultados obtenidos durante estos años de trabajo han sido presentados como comunicaciones orales o tipo póster en numerosos congresos tanto internacionales (7) como nacionales(5).



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** DEUPI I CORRAL, XAVIER

**Referencia:** RYC-2008-02289

**Area:** Química

**Número de orden:** 7 **Correo electrónico:** Xavier.Deupi@uab.es

**Título:**

Farmacología molecular computacional de los receptores acoplados a proteína G

**Resumen de la Memoria:**

Mi investigación se centra en el estudio de la estructura y el mecanismo de activación de los receptores acoplados a proteína G (GPCRs). Mi objetivo consiste en diseñar nuevos compuestos con actividad farmacológica dirigidos a determinadas subfamilias de estos receptores. Líneas de investigación principales: a) Descubrir la función de combinaciones de aminoácidos específicas en las secuencias de los GPCRs mediante el uso de métodos computacionales. Estas combinaciones estabilizan estructuras locales en la proteína que confieren especificidad hacia sus ligandos naturales. Uno de mis objetivos fundamentales consiste en entender a nivel molecular como las interacciones ligando-receptor se traducen en una determinada respuesta fisiológica. Esta información permitirá el diseño de nuevos y mejores fármacos. Inicialmente, en esta línea de investigación trabajaré en receptores de péptidos (neuroquinina-1, oxitocina y vasopresina) y de la prostaglandina (CRTH2). Estos proyectos se desarrollarán en colaboración con el Prof. Pardo y la Prof. Campillo, en la Facultad de Medicina de la Universidad Autónoma de Barcelona. Los estudios teóricos se complementan mediante la colaboración con los grupos experimentales del Dr. Shafer (St. Jude Childrens Hospital, Memphis, USA), del Dr. Granier (INSERM, Montpellier, Francia), y de la Dra. Kostenis, (Institute for Pharmaceutical Biology, Bonn, Alemania). b) Estudio del receptor beta 2 adrenérgico como modelo para dilucidar el mecanismo de activación de los GPCRs. Mediante el estudio de receptores marcados con sondas fluorescentes, pretendo averiguar como pequeñas diferencias en las funcionalidades químicas de los ligandos se amplifican hasta convertirse en distintos comportamientos fisiológicos del receptor. Este proyecto se desarrolla en colaboración con el grupo del Prof. Kobilka (Stanford University, USA). c) Obtención de la estructura cristalográfica de los complejos de GPCRs con sus proteínas efectoras para obtener información precisa sobre la estructura su estado activo. Esta información es clave para el estudio del modo de unión de los ligandos agonistas a esta familia de proteínas. Este proyecto se desarrolla en colaboración con el Dr. G. Schertler (MRC-LMB, Cambridge, UK) y el Dr. C. Smith (University of Florida, USA). Quiero destacar la multidisciplinariedad de estas líneas de investigación, que aúnan los esfuerzos de científicos españoles, europeos y estadounidenses en los campos de la química computacional, la biología estructural y la biología molecular, con el objetivo de desarrollar nuevos fármacos con actividad terapéutica.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

SITUACIÓN PROFESIONAL Investigador contratado Juan de la Cierva. Universidad Autónoma de Barcelona FORMACIÓN ACADÉMICA Doctor en Bioquímica y Biología Molecular (Universidad Autónoma de Barcelona) 2003 Licenciado en Química Orgánica (Instituto Químico de Sarriá, Universidad Ramon Llull) 1998 PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN MÁS RELEVANTES Human Frontier Science Program (Program Grant). LIP0050/2009. P.I. Clay Smith (resolución en Marzo 09) Instituto de Salud Carlos III. RETICS RD07/0067/0008. P.I.: Leonardo Pardo Belgian Federal Office for Scientific, Technical and Cultural Affairs. IAP-network P6/14 (07-11). P.I.: Leonardo Pardo CICYT (Ref. SAF2006-04966) (06-09). P.I.: Leonardo Pardo European Commission. FP6 LSHB-CT-2003-503337 (03-06). P.I.: Leonardo Pardo Belgian Federal Office for Scientific, Technical and Cultural Affairs. IAP-network P5/30. (02-06). P.I.: Leonardo Pardo CICYT (Ref. SAF2002-01509) (03-05). Leonardo Pardo PUBLICACIONES MÁS RELEVANTES Kobilka, B., Deupi, X., Trends in Pharmacological Sciences, 28:397-406 (2007) Deupi, X., Kobilka, B., Advances in Protein Chemistry, 74:137-66 (2007) Dolker N., Deupi X., Theoretical Chemistry Accounts, 118:579-588 (2007) Deupi, X., et al., Current Topics in Medicinal Chemistry, 7:991-8 (2007) Springael JY, de Poorter C, Deupi X, et al., Cellular Signalling. 19:1446-56 (2007) Pardo L, Deupi X, et al., Chembiochem. 2;8(1):19-24 (2007) Yao X, Parnot C, Deupi X, et al., Nature Chemical Biology, 2(8): 417-22 (2006) Swaminath, G., Deupi, X., et al., Journal of Biological Chemistry, 280(23): 22165-71 (2005) Urizar E., Claeysen S., Deupi X., et al., Journal of Biological Chemistry, 280 (17): 17135-41 (2005) Deupi, X., et al., Biophysical Journal, 86(1 Pt 1): 105-15 (2004) Olivella, M., Deupi, X., et al., Biophysical Journal, 82(6): 3207-13 (2002) Lopez-Rodriguez, M.L., Vicente, B., Deupi, X., et al., Molecular Pharmacology, 62(1): 15-21 (2002) Govaerts, C., Blanpain, C., Deupi, X., Journal of Biological Chemistry, 276(16): 13217-25 (2001) Deupi, X., et al., Biophysical Journal, 79(5): 2754-60 (2000) ESTANCIAS EN CENTROS DE RECONOCIDO PRESTIGIO INTERNACIONAL Laboratory of Molecular Biology (Medical Research Council) (Cambridge, UK) (07) Stanford University School of Medicine (Stanford, USA). Postdoctoral stage (03-05) CINECA Supercomputing Center (Cassalecchio di Reno, Italy) (01) PARTICIPACIÓN EN CONTRATOS DE INVESTIGACIÓN Laboratorios Salvat, S.A. desde 01/01/08 hasta 31/12/09. Investigador Principal: Xavier Deupi CONGRESOS MÁS RELEVANTES XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica (San Lorenzo del Escorial, España) (07) Gordon Research Conference. Molecular Pharmacology. Ventura (California, USA) (07) Experimental Biology 2003. Federation of American Societies for Experimental. San Diego (California) (03) XVIIth International Symposium on Medicinal Chemistry. European Federation for Medicinal Chemistry. Barcelona (España) (02) XXII Congreso Nacional de la Sociedad Española de Farmacología y XI Congreso Nacional de la Sociedad Española de Química Terapéutica. Valencia (España) (99) OTROS MÉRITOS Acreditación como Profesor Lector por la Agencia para la Calidad del Sistema Universitario en Catalunya (06) Beca Postdoctoral, Ministerio de Educación, Cultura y Deporte (03-04) Profesor Asociado. Universidad Autónoma de Barcelona (98-03) Técnico de Investigación Vita-Invest, S.A. (00-01)



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** SALGUEIRIÑO MACEIRA, VERONICA

**Referencia:** RYC-2008-02202

**Area:** Química

**Número de orden:** 8 **Correo electrónico:** vsalgue@usc.es

**Título:**

Nanopartículas Magnéticas de Núcleo Múltiple para Aplicaciones Bio-relacionadas

**Resumen de la Memoria:**

Nanopartículas superparamagnéticas sintetizadas mediante métodos químicos estándose ampliamente utilizadas en aplicaciones "bio-relacionadas" como la purificación de biomoléculas, separación celular, como agentes de contraste o en sensores. Además, combinadas con biomoléculas permiten nuevas rutas en diagnósticos médicos, en la liberación de fármacos o en terapias anticáncer. Dos pasos clave aseguran el desarrollo de estas aplicaciones: la biocompatibilidad de las nanoestructuras y la caracterización completa de las propiedades magnéticas que presentan. Por tanto, las líneas de investigación que se proponen se centran en la producción de nanopartículas magnéticas biocompatibles y de propiedades magnéticas ajustables a la aplicación final para las que han sido diseñadas. La imposición de trabajar con nanomateriales magnéticos biocompatibles como óxidos de hierro o aleaciones de FePt complica su uso en ciertas aplicaciones pues generalmente presentan un momento magnético relativamente bajo a temperatura ambiente. Teniendo en cuenta que la barrera de energía debida a la anisotropía es proporcional al volumen de las nanopartículas, por debajo de un cierto tamaño, la energía térmica supera dicha barrera de energía anisotrópica, llevando al momento magnético total de la nanopartícula a fluctuar, por encima de  $k_B T$ , lo que imposibilita determinadas aplicaciones. Sin embargo, mediante métodos de química coloidal se pueden poner en práctica técnicas y procesos que permitan la obtención de nanocompuestos con momentos magnéticos más grandes. Puesto que crecer el tamaño de partícula no es una opción viable puesto que se supera el límite superparamagnético provocando su agregación y precipitación, la solución puede venir dada por una situación intermedia de agrupaciones de nanopartículas superparamagnéticas (de tamaño y monodispersidad finales en función de los ligandos y surfactantes que controlan la estabilidad coloidal), de forma que el momento magnético se vea incrementado. Esta solución la ofrecen los "composites" de nanopartículas superparamagnéticas de núcleo múltiple y encapsulados en óxido de silicio. Este recubrimiento asegura su estabilidad y facilita su funcionalización con biomoléculas por lo que además se mantendrán relacionados los distintos momentos magnéticos (ajustables en este caso mediante el número de nanopartículas magnéticas en el núcleo múltiple final del composite) y la diferente afinidad por ciertos analitos, ajustando además la velocidad magnetoforética. Además, una de las cuestiones de mayor interés en estos sistemas se refiere a las interacciones dipolares entre partículas, dependiendo de la distancia entre ellas (parámetro controlable mediante el recubrimiento con silice). Así, distribuciones de nanopartículas magnéticas, ordenadas (mediante procesos de cristalización) o al azar, crearán dependiendo de dicho parámetro una competición en el alineamiento de los momentos magnéticos, de forma que se induzca un estado colectivo y la consecuentelajación magnética. Las líneas de investigación se centran así en la síntesis química de composites de momento magnético elevado, su funcionalización y caracterización magnética en función de las posibles aplicaciones "bio-relacionadas", subrayando por tanto el carácter multidisciplinar de la propuesta.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

**TITULACIÓN ACADÉMICA:** Licenciada en Química (1999) por la Universidad de Santiago de Compostela - Doctora en Química (Julio 2003) por la Universidad de Vigo. Sobresaliente Cum Laude por unanimidad, Título con Mención Europea y Premio Extraordinario de Doctorado 2004 (Universidad de Vigo). **BECAS DISFRUTADAS:** Beca FEUGA (Fundación Universidad-Empresa) (Xunta de Galicia) (Febrero-Abril 2000) - Beca de Colaboración Universidad de Vigo/Arizona State University (Enero-Diciembre 2002). - Beca Predoctoral de Estancia en el Extranjero (Universidad de Vigo) (Septiembre-Diciembre 2002) - Beca Postdoctoral en el Extranjero (European Community's Human Potential Programme) (Unión Europea) (Julio 2003-Agosto 2004) (Universität Duisburg-Essen) - Beca Postdoctoral de Estancia en el Extranjero (Universidad de Santiago de Compostela) (Enero-Junio 2006, Universität Duisburg-Essen). **ESTANCIAS EN EL EXTRANJERO:** 6 meses durante el periodo Predoctoral en Alemania (Junio-Agosto 2001) y Reino Unido (Septiembre-Diciembre 2002) y 28 meses durante el periodo Post-doctoral en diferentes centros de reconocido prestigio internacional (Universität Duisburg-Essen, Alemania (19 meses), Arizona State University, Estados Unidos (8 meses), CNRS, Francia (1 mes)). **IDIOMAS:** Castellano, Inglés y Gallego. Conocimientos de Francés y Alemán. **ÁREAS DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA:** Química-Física de Nanoestructuras. Diseño, Síntesis y Caracterización de materiales a escala nanométrica, metales, magnéticos, híbridos (óptica y magnéticamente activos), nanotubos de carbono, materiales nanoestructurados (ópales y cristales coloidales), nanopartículas cristalinas. Propiedades ópticas (luminiscencia y bandaplasmónica superficial) y magnéticas (superparamagnetismo). **PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN:** Ha participado en 10 proyectos de investigación (a nivel de comunidad autónoma, nacionales y europeos). Están además pendientes de resolución otros 3 proyectos, uno del MEC como IP, y dos europeos, uno como colaborador y otro como Workpackage IP. **PUBLICACIONES:** 42 publicaciones en revistas de alto índice de impacto. De las publicadas; 15 presentan un índice de impacto mayor de 6, 2 ostentan más de 100 citas, 2 han ocupado la PORTADA de Advanced Functional Materials y J. Materials Chemistry, 2 pertenecen a la categoría de Highlight y Review en J. Materials Chemistry y Advanced Materials respectivamente y en el 43% de las publicaciones el candidato es el corresponding author, además de 2 capítulos de libro y 4 proceedings. El número de citas referidas a estas publicaciones asciende a 604 (SciFinder). Colaborador referee de las revistas: Langmuir, J. of Materials Chemistry, Small, Chem. Mater., Adv. Func. Mater., Adv. Mater., Macromolecular Rapid Comm., New Journal of Chemistry, Journal of Colloids and Interface Science, Organic Fin Decarrera" de Química y codirección de una tesis doctoral. CAP





MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** PAVLOV, VALERY

**Referencia:** RYC-2008-03065

**Area:** Química

**Número de orden:** 9 **Correo electrónico:** vpavlov@icbiomagune.es

**Título:**

Sistemas artificiales biocatalíticos replicativos

**Resumen de la Memoria:**

La replicación de las moléculas biológicas es la base de la vida. A lo largo de la evolución, la selección natural ha escogido diferentes sistemas bioquímicos capaces de sintetizar nuevas moléculas. La Naturaleza ha seleccionado los ácidos desoxirribonucleicos, los polipéptidos y los lípidos como construcciones principales de todos los seres vivos conocidos, debido a la variedad de estructuras primaria, secundaria y terciaria. El diseño de los sistemas autorreplicativos presentes en la naturaleza no es la única solución posible al problema de la replicación de sistemas catalíticos. En otro ambiente químico y bajo otras condiciones físicas, podrían ser viables otros sistemas de replicación. El diseño de sistemas de replicación artificiales bajo unas condiciones físico-químicas definidas, podría proporcionar interesantes nanoestructuras con amplias posibilidades de aplicación en la industria y en biomedicina. Así, el objetivo principal de este proyecto es el diseño y desarrollo de sistemas catalíticos replicativos y/o autorreplicativos en los que la cascada de autorreplicación pueda ser desencadenada por proteínas, ADN, partículas virales o bacterias. La estrategia principal consistirá en el uso de nanopartículas combinadas con ADN, oligonucleótidos, polipéptidos y enzimas y proteínas nativas o recombinantes. El proyecto integra reacciones bioquímicas y la química de nanomateriales. Se utilizarán varios tipos de nanopartículas, que podrán ser empleadas para la inmovilización de sustratos enzimáticos, tales como grupos éster, polipéptidos, oligonucleótidos, a los que se unirán los elementos de la cascada de replicación. El corte de estos elementos conllevará la liberación en el medio de ensayo de los elementos necesarios para la cascada de replicación. Estos elementos liberados, tales como ADN, oligonucleótidos, polipéptidos, pequeñas moléculas funcionales y nanopartículas, se ensamblarán para dar lugar a nanoestructuras capaces de romper y liberar a su vez otros nuevos elementos de las nanopartículas, consiguiéndose de este modo una síntesis autoalimentada de los elementos biocatalíticos.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

Family name: Pavlov Forename: Valery ID/Passport no: 51N1866303 Date of birth : 09.04.1971 Gender: Male Nationality: Russian Federation PRESENT PROFESSIONAL POSITION Institution: CIC BiomaGUNE Faculty, School or Institute: Institute of Inorganic Chemistry Department: Biofunctional Nanomaterials Unit Address: Paseo Miramon 182, 20009, San Sebastian Country: SPAIN Telephone (indicate prefix, number and extension): +34 943 00 53 08 Fax: =+34 94 300 53 15 E-mail: vpavlov@icbiomagune.es Field of study (UNESCO codes): 2301, 2302 Professional status: Group Leader Start date: 1.3.2005 PRESENT RESEARCH AREA Brief summary (key words). Nanotechnology, nanoparticles, DNA, enzymes ACADEMIC BACKGROUND Bachelor Centre Date Organic Chemistry Chuvash State University, Cheboksary, Russia 30.6.1996 Ph.D. Centre Date Chemical Engineering Universidad Rovira i Virgili, Tarragona, Spain 28.1.2005 PAST SCIENTIFIC EXPERIENCE (\*) Position R -acetylhydrazide) and its Oxidative Reconstitution with Apo Horse Radish Peroxidase: Towards Triggered Generation of Horse Radish Peroxidase Angew. Chem. Int. Ed. submitted 3. V. Pavlov, M. Zorn, R. Kraemer, Biophys. Res. Commun. 349, 1011-1015, 2006 4. Y. Weizmann, Z. Cheglakov, V. Pavlov, I. Willner, Nature Protocols, v. 1, 554 - 558, 2006 5. B. Shlyahovsky, V. Pavlov, L. Kaganovsky, I. Willner, Angew. Chem. Int. Ed., v. 45, 4815-4819, 2006 6. Y. Weizmann, Z. Cheglakov, V. Pavlov, I. Willner, Angew. Chem. Int. Ed., v. 118, 2238-2242 (2006) 7. Y. Xiao, V. Pavlov, T. Niazov, A. Dishon, M. Kotler, NATO Security through Science, Series B: Physics and Biophysics (2005), 1 (Defense against Bioterror), 199-205. 8. V. Pavlov, B. Shlyahovsky, I. Willner, J. Am. Chem. Soc., Vol. 127, 6522-6523 (2005) and so on...



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** CANALES MAYORDOMO, MARIA ANGELES

**Referencia:** RYC-2008-03224

**Area:** Química

**Número de orden:** 10 **Correo electrónico:** acanales@rovi.es

**Título:**

Estudios de reconocimiento molecular. Caracterización estructural de compuestos orgánicos y biomoléculas mediante RMN. Obtención de la estructura tridimensional de biomoléculas.

**Resumen de la Memoria:**

Mi línea principal de investigación se engloba en el área del reconocimiento molecular. En este campo he realizado contribuciones significativas, especialmente estudiando interacciones entre carbohidratos y proteínas, pero también he realizado estudios básicos en moléculas orgánicas modelo, así como estudios de interacción entre receptores proteicos y moléculas orgánicas, tanto naturales como de diseño. En estos años, he conseguido una formación multidisciplinar, fundamental para abordar problemas en química moderna, conociendo y desarrollando trabajos en síntesis orgánica, biología molecular, y especialmente en técnicas modernas de RMN y métodos de modelización molecular. Es mi interés continuar en este campo tan atractivo, en la frontera de la química, la biología, la biofísica y la biomedicina. En mi opinión, la investigación en este campo debe aportar datos y conocimientos definitivos para conocer las interacciones moleculares básicas que regulan los procesos de la vida, tanto los beneficiosos para esta, como aquellos que conducen a procesos patológicos. Desde esta perspectiva, mi formación actual, adquirida en mis períodos pre y postdoctorales, complementados con mi estancia en una empresa farmacéutica debe permitirme actuar e implicarme en proyectos relacionados con el diseño racional de fármacos y sondas de interacción, basados en el conocimiento de las conformaciones bioactivas y energías de interacción de los ligandos en el sitio de reconocimiento de los receptores. Desde mi punto de vista, la ciencia actual es un proceso altamente competitivo y el abordaje de proyectos punteros como aquellos en los que pienso involucrarme solamente puede realizarse desde una perspectiva global, con grupos de investigación sólidos en al menos un área de conocimiento, y con colaboraciones y ramificaciones en otras áreas colindantes. Solamente así puede competir al máximo nivel en el mundo científico actual.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

1-07-2001 hasta el 17-03-2005 SUFFICIENCIA INVESTIGADORA UAM/Instituto Química Orgánica CSIC Junio 2002 TÍTULO: Desarrollo y puesta a punto de nuevos experimentos de RMN: Dinámica y conformación de la lactosa-U-13C en su estado libre y asociada a lectinas. PUBLICACIONES: tres publicaciones, siendo la más relevante: M. Martín Pastor, A. Canales, F. Corzana, J. L. Asensio, J. Jiménez Barbero. Limited flexibility of lactose detected from residual dipolar couplings using molecular dynamics simulations and steric alignment methods. J. Am. Chem. Soc., 127, 3589-95, 2005 Índice de impacto: 7.42 TESIS DOCTORAL UAM/Centro de Investigaciones Biológicas CSIC Marzo 2005 TÍTULO: Estudios sobre el complejo monomérico, con actividad mitogénica, formado por el factor de crecimiento para fibroblastos ácido (FGF1) y un hexasacárido de diseño, análogo de heparina. Una visión estructural y dinámica utilizando RMN. DIRECTOR DE TESIS DOCTORAL: Jesús Jiménez Barbero PUBLICACIONES: cinco publicaciones, siendo la más relevante: A. Canales, R. Fayos, J. Angulo, R. Ojeda, M. Martín Pastor, P. Nieto, M. Martín Lomas, R. Lozano, G. Giménez Gallego, J. Jiménez Barbero Conformational Flexibility of a Synthetic Glycosylaminoglycan Bound to a Fibroblast Growth Factor. FGF-1 Recognizes both the 1C4 and 2So Conformations of a Bioactive Heparin-like Hexasaccharide. J. Am. Chem. Soc., 127, 5778-9, 2005 Índice de impacto: 7.42 ESTANCIAS EN CENTROS DE INVESTIGACIÓN: estancia de tres meses en el laboratorio del Prof. Thomas Peters de la Universidad de Lübeck, Alemania. 18-03-2005 hasta el 15-11-2006 ESTANCIA POST-DOCTORAL Centro de Investigaciones Biológicas CSIC 18.03.05-15.11.06 PUBLICACIONES: seis publicaciones siendo las más relevantes: J. Jiménez Barbero, A. Canales, P. T. Northcote, R. M. Buey, J. M. Andreu, F. Díaz. NMR determination of the bioactive conformation of Peluroside A bound to microtubules. J. Am. Chem. Soc., 128, 8757-65, 2006 Índice de impacto: 7.69 G. Terraneo, D. Potenza, A. Canales, J. Jiménez Barbero, K. Baldrige, A. Bernardi A simple model system for the study of carbohydrate-aromatic interactions. A simple model system for the study of carbohydrate-aromatic interactions. J. Am. Chem. Soc. 129, 2890-2900, 2007 Índice de impacto: 7.69 16-11-2006 hasta la actualidad ESTANCIA POST-DOCTORAL Laboratorios Farmacéuticos ROVI 16.11.06-Actualidad PUBLICACIONES: 5 publicaciones aceptadas, de ellas la más relevante es: A. Canales, R. Matesanz, N. M. Gadner, J. M. Andreu, I. Paterson, J. F. Díaz, J. Jiménez Barbero The bound conformation of microtubule-stabilizing agents (II): NMR insights on the bioactive 3D structure of discodermolide and dictyostatin Chem. Eur J. en prensa Índice de impacto: 5.02 PATENTES: Los estudios realizados en esta etapa han contribuido a la solicitud de la patente española ES20060002146 y la solicitud internacional WO200802009 relativas a promotores de absorción de fármacos y a la solicitud de patente española ES2292351 y la solicitud internacional WO2008006925 relativas a métodos de despolimerización de heparina. La política interna de ROVI impide que yo pueda figurar como participante en las patentes.



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

## SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2008

**Nombre:** GARCIA GARRIDO, SERGIO EMILIO

**Referencia:** RYC-2008-02464

**Area:** Química

**Número de orden:** 11 **Correo electrónico:** garciagsergio@uniovi.es

**Título:**

Diseño de nuevos sistemas supramoleculares conteniendo complejos de metales de los grupos 7 y 8: Hacia una catálisis altamente eficiente y selectiva

**Resumen de la Memoria:**

Los catalizadores más activos y selectivos conocidos en la naturaleza son los enzimas. Suele basarse primordialmente en la alta especificidad, en cuanto a la forma y el tamaño, que posee el entorno que rodea su centro activo, de manera que únicamente el sustrato adecuado pueda acceder a él. Sin embargo, este tipo de quimioselectividad raramente se manifiesta en los catalizadores metálicos convencionales descritos hasta ahora en la bibliografía, y actualmente constituye un área de máxima prioridad a la hora de diseñar nuevas metodologías catalíticas encaminadas a la consecución de procesos orgánicos altamente eficientes y selectivos. Una forma novedosa de emular este tipo de selectividad conformacional de los enzimas en los catalizadores organometálicos clásicos consiste en encapsularlos dentro de sistemas supramoleculares predefinidos, de manera que sean estos últimos los que actúen de forma análoga a como lo hace el entorno que rodea al centro activo de un enzima, y únicamente permitan el acceso al catalizador organometálico o centro activo a un único tipo de sustrato que cumpla con unas características de forma y tamaño determinadas y definidas por dicho entorno supramolecular (Science, 2007, 316, 5821, 85-88). Con esta idea en mente, la línea central que pretendo desarrollar dentro del presente Programa Ramón y Cajal se encuentra marcada en la búsqueda de nuevos sistemas constituidos por diferentes complejos organometálicos, encapsulados dentro de una estructura supramolecular que les confiera un entorno altamente específico, de forma que en su conjunto puedan actuar como catalizadores eficientes y selectivos en distintos procesos orgánicos. En concreto, se emplearán complejos organometálicos de rutenio y renio cuya actividad catalítica ya ha sido ampliamente contrastada en procesos como isomerizaciones, activación de enlaces C-H, formación de enlaces C-C, etc. Estos catalizadores serán encapsulados dentro de estructuras supramoleculares de diferentes formas geométricas (tetraedros, octaedros, cubos, etc.), donde los vértices estén ocupados por distintos iones metálicos ( $Ga^{3+}$ ,  $Al^{3+}$ ,  $In^{3+}$ ,  $Fe^{3+}$ ,  $Ti^{4+}$ ,  $Ge^{4+}$ , ...) y sus aristas estén formadas por una extensa variedad de ligandos puente conteniendo diversos grupos funcionales que, en su conjunto, confieran un entorno altamente específico al catalizador en cuanto a la forma y el tamaño del sustrato. Paralelamente, también se estudiará la posibilidad de emplear este tipo de estructuras supramoleculares en el reconocimiento y atrapamiento de diferentes cationes metálicos, como pueden ser los del uranio, plomo, cadmio, mercurio, etc., y aniones, como nitratos, fosfatos, sulfatos, etc., de interés principalmente medioambiental. Con ello pretendo aprovechar una amplia experiencia, adquirida durante las diferentes etapas de mi formación, en el campo de la química supramolecular, la química organometálica y la catálisis, con el objetivo final de diseñar una nueva generación de sistemas catalíticos eficientes, económicamente rentables y altamente selectivos.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

He cursado mis estudios de Licenciatura en la Universidad de Oviedo, obteniendo el título de Licenciado en Química en septiembre del año 2000. Durante el último año de licenciatura inicié mi labor investigadora como colaborador en el grupo del Prof. José Gimeno Heredia, perteneciente al Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la Universidad de Oviedo. En el año 2001 me fue concedida una beca del Ministerio de Ciencia y Tecnología para la Formación de Personal Investigador (FPI), beca que se prolongó hasta julio del año 2005. Durante este periodo, he participado como investigador colaborador en dos proyectos financiados por el Ministerio de Ciencia y Tecnología, cuyo Investigador Principal ha sido el Prof. Gimeno. Por otra parte, he realizado una estancia breve en el Instituto de Investigaciones Químicas Isla de la Cartuja (Sevilla, España), bajo la dirección del Científico Titular del CSIC Antonio Pizzano Mancera. El 1 de abril del año 2005 procedí a la lectura y defensa de mi tesis doctoral titulada "Complejos  $\eta^3$ -alilo de rutenio(II) y rutenio(IV): Actividad catalítica en procesos de transferencia de hidrógeno, sustitución propargílica e isomerización de alcoholes alílicos y propargílicos", bajo la dirección del Dr. Victorio Cadierno Menéndez y el Prof. José Gimeno Heredia, recibiendo la máxima calificación sobresaliente cum laude. Esta tesis doctoral ha sido galardonada con dos premios: i) El Premio San Alberto Magno a la mejor tesis doctoral del año 2005, concedido por el Excelentísimo Colegio Oficial de Químicos de Asturias y León; y ii) El Premio Extraordinario de Doctorado del año 2005. Posteriormente, en diciembre del año 2005, me fue concedida una beca posdoctoral del Ministerio de Educación y Ciencia, lo que me permitió incorporarme al grupo de investigación del Prof. Philip A. Gale en Southampton, Reino Unido. Durante este tiempo participé en varios proyectos de investigación entre los que destacan: i) La síntesis de nuevos sistemas supramoleculares y su aplicación en el reconocimiento, atrapamiento y transporte de iones a través de membranas celulares; y ii) El desarrollo de catenanos, rotaxanos y otros sistemas macrocíclicos similares, así como su aplicación en el campo de los motores moleculares. Al finalizar mi estancia posdoctoral en el grupo del Prof. Gale en diciembre del 2007, me reincorporé al grupo del Prof. Gimeno en la Universidad de Oviedo, donde me encuentro actualmente, a través de un contrato adscrito al programa Consolider-Ingenio 2010. Como resumen, el trabajo que he venido desarrollando se ha visto plasmado en la publicación de 22 artículos de investigación en las revistas de mayor prestigio en sus respectivas áreas, así como 2 revisiones y un capítulo de libro. He participado en diferentes proyectos de investigación, abordando con ello campos muy diversos de la química, obteniendo becas tanto predoctoral como posdoctoral del Gobierno de España, recibido dos premios que destacan la calidad de mi tesis doctoral y participado en diversas tareas docentes sumando un total de 235 horas lectivas impartidas. A consecuencia de todos estos méritos, recientemente he recibido la evaluación positiva por parte de la Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación (ANECA) a los efectos de poder ser contratado como Profesor Ayudante Doctor en universidades públicas.



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** MACHAIN BERAZA, JON MATTIN

**Referencia:** RYC-2008-03216

**Area:** Química

**Número de orden:** 12 **Correo electrónico:** jonmattin.matxain@ehu.es

**Título:**

Bioquímica Cuántica: estrés oxidativo en proteínas causado por especies reactivas de oxígeno y nitrógeno, y su prevención por medio de antioxidantes

**Resumen de la Memoria:**

El interés en los procesos donde median radicales libres en organismos vivos se ha incrementado exponencialmente durante la última década. Los radicales son intermediarios corrientes en reacciones bioquímicas ordinarias. Uno de los tipos de radicales que son más abundantemente producidos en las reacciones bioquímicas naturales son las especies reactivas de oxígeno (ROS) y nitrógeno (RNS). Sin embargo, debido a la sobreproducción o mal control fisiológico de estas especies, pueden causar un daño severo a un amplio abanico de macromoléculas. En particular, la oxidación de proteínas causa alteraciones en la comunicación tanto intra- como inter- celular, así como una pérdida de la actividad enzimática. Estas oxidaciones son prevenidas por antioxidantes. Sin embargo, el mecanismo de estas reacciones y sus posteriores caminos metabólicos, son, en la mayoría de los casos, confusos. El objetivo de este proyecto de investigaciones doble. Por un lado, se pretende profundizar en el conocimiento sobre el mecanismo de oxidación y los productos oxidados que derivan en una pérdida de la actividad enzimática, y por otro lado, se estudiará su prevención por medio de antioxidantes. Para ello se realizarán estudios combinados de Mecánica Cuántica (QM) y Mecánica Cuántica / Mecánica Clásica (QM/MM). Se usarán métodos QM puros para estudiar la oxidación de las cadenas laterales de los residuos de aminoácidos, la rotura del enlace peptídico y la prevención de estos procesos por antioxidantes. Sin embargo, para tener en cuenta el ambiente proteico, se realizarán cálculos de QM/MM, donde una parte más pequeña de la proteína es tratada por métodos QM (DFT), mientras que el resto del sistema es considerado mediante campos de fuerza MM. Concretamente, se elegirá una proteína en particular, como enzima modelo: la sintetasa de glutamato de la bacteria E. coli, para la que se tienen buenos datos experimentales. Posteriormente, este procedimiento teórico será aplicado a la sintetasa de glutamato humana para estudiar su desactivación. Estos estudios nos permitirán, por un lado, construir una nueva estrategia teórica para el estudio de radicales en biología desde un punto de vista computacional, y por el otro, proporcionará una información fundamental sobre los procesos oxidativos en proteínas y su prevención por medio de antioxidantes.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

El candidato, Dr. Jon M. Machain, comenzó su carrera investigadora en el grupo de Química Teórica de la Universidad de Utrecht (Holanda), bajo la supervisión del Prof. Dr. Frans B. van Duijneveldt. Allí permaneció dos años, para posteriormente iniciar el doctorado en octubre de 1998 en el grupo de Química Teórica de la Facultad de Química de la Universidad del País Vasco. Se doctoró en Julio de 2002 con la tesis europea titulada "Small Clusters of II-VI Materials", bajo la supervisión del Prof. Dr. Jesus M. Ugalde, otorgándosele el premio extraordinario de doctorado. Posteriormente, continuó en el mismo centro como investigador contratado, centrándose en su principal línea de investigación: "Nanopartículas de materiales inorgánicos: propiedades, dopado y (auto)ensamblado". En enero de 2005 fue contratado como investigador postdoctoral en el grupo de Biofísica Teórica de la Universidad de Örebro (Suecia), dirigido por el Prof. Dr. Leif A. Eriksson, por un periodo de dos años. Allí inició una nueva y diferenciada línea de investigación: "Estrés oxidativo en proteínas causado por especies reactivas de oxígeno y nitrógeno, y su prevención por medio de antioxidantes", continuada posteriormente en el grupo de Química de la Dr. Rita C. Guedes en la Universidad de Lisboa, donde realizó una nueva estancia postdoctoral de un año. Actualmente es investigador contratado en el grupo de Química Teórica de la universidad del País Vasco, hasta finales de 2008. El candidato cuenta con 29 publicaciones, a las que hay que añadir los trabajos aceptados para su publicación y enviados a publicar, que hacen un total de 33. Destacan 1 Angewandte Chemie International Edition, 1 Journal of the American Chemical Society, 3 Chemistry. A European Journal, 1 Journal of Medicinal Chemistry, 3 Journal of Physical Chemistry B, 1 ChemPhysChem, 5 Journal of Physical Chemistry A y C y 5 Physical Review A. En la mayoría de los trabajos el candidato es primer autor, y en varios de los más recientes es además el autor principal. También cabe destacar las conferencias, comunicaciones y posters presentados en varios congresos internacionales, así como las invitaciones recibidas para impartir conferencias en centros de investigación de gran reconocimiento internacional, donde sobresalen las conferencias invitadas en la Royal Institution, Davy Faraday Institute de Londres en 2003 y el Donostia International Physics Center, de San Sebastián, en 2007.



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

## SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2008

**Nombre:** RODIL RODRIGUEZ, MARIA DEL ROSARIO

**Referencia:** RYC-2008-02528

**Area:** Química

**Número de orden:** 13 **Correo electrónico:** rrodil@udc.es

**Título:**

Estudio de contaminantes ambientales mediante nuevas metodologías analíticas de preparación de muestra y técnicas cromatográficas combinadas con espectrometría de masas

**Resumen de la Memoria:**

La línea de investigación principal propuesta se centra en el desarrollo de metodología analítica validada que pueda ser útil a la comunidad científica para el control y estudio de la distribución y comportamiento de diversos contaminantes ambientales. La metodología analítica desarrollada será medioambientalmente responsable, principalmente intentando que el consumo de disolvente sea el menor posible al igual que los residuos generados, pero sin olvidarnos de los requerimientos de los nuevos métodos en cuanto a rapidez, automatización así como elevada sensibilidad y selectividad. Para ello se utilizarán técnicas como extracción con fluidos supercríticos (SFE), extracción acelerada a elevada presión (PLE), dispersión de la matriz en fase sólida (MSPD), extracción asistida por microondas (MAE) o extracción con agua sobrecalentada (PSWE) para la extracción de los analitos de muestras sólidas, mientras en el caso de muestras líquidas se utilizarán técnicas como extracción en fase sólida (SPE), microextracción en fase sólida (SPME), extracción por absorción mediante barras agitadoras (SBSE), microextracción en fase líquida (LPME) o extracción con disolventes asistido de membranas (MASE). Para la determinación de los analitos se utilizarán principalmente técnicas cromatográficas acopladas a espectrometría de masas (GC-MS, GC-MS/MS o LC-MS/MS). Para continuar con el avance en el desarrollo de metodología analítica se buscarán materiales alternativos mediante la síntesis de nuevos absorbentes/adsorbentes o la aplicación de materiales ya existentes con fines analíticos. Además, la metodología analítica desarrollada se empleará para el estudio de diversos contaminantes en el medio acuático y para elucidar las posibles rutas de degradación de los contaminantes en el medio ambiente.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

La solicitante obtuvo su licenciatura en Química en el año 2000 y su grado de doctora en Química en mayo de 2005 en la Universidad de Santiago de Compostela, obteniendo la calificación de sobresaliente cum laude y el Premio Extraordinario de Doctorado. Durante su etapa predoctoral en el prestigioso grupo de investigación "Cromatografía y Quimiometría", dirigido por el Prof. Rafael Cela Torrijos, la solicitante participó activamente en dos proyectos nacionales. Durante este período realizó dos estancias en centros internacionales de prestigio: 3 meses en "Department of Analytical Chemistry- University of Stockholm" (Suecia) bajo la dirección del Dr. Carlo Crescenzi y 3 meses en "Institute for Environmental Technology- Technical University of Berlin" (Alemania) bajo la dirección del Dr. Thorsten Reemtsma. Tras el doctorado, la investigadora se incorporó al grupo del Dr. Popp en "Department of Analytical Chemistry, UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle" (Alemania) mediante un contrato financiado por dicha institución. Durante esta etapa de 10 meses la solicitante investigó en nuevas técnicas de extracción para la determinación de contaminantes medioambientales. Además, durante esta etapa se ha desarrollado una nueva fase adsorbente para sistemas de microextracción en colaboración con "Leibnitz Institute for Surface Modification (IOM)" y la empresa Gerstel. En 2007 (Abril-Septiembre) la investigadora realizó una estancia de 6 meses en el mismo centro en esta ocasión bajo la supervisión de la Dra. Monika Möder y tiene concedida una ayuda bajo el Programa "José Castillejo" para el desarrollo de una nueva estancia de 5 meses en 2008 (Abril-Agosto) en el mismo centro. Desde abril de 2006, tras un proceso altamente competitivo en el que obtuvo la 6ª posición entre los 29 contratos concedidos en el área de Química, la Dra. Rodil es investigadora "Juan de la Cierva" en el Departamento de Química Analítica de la Universidad de A Coruña. Durante este tiempo ha participado en tres proyectos, dos financiados por la Xunta de Galicia y uno por el Ministerio de Educación y Ciencia y ha trabajado en el desarrollo de nuevas técnicas de extracción para la determinación de contaminantes emergentes, desarrollando métodos multiresiduo y en estudios de fotodegradación y degradación química por cloración. En resumen, la solicitante tiene una experiencia posdoctoral total de 16 meses en el Helmholtz Zentrum für Umweltforschung-UFZ (Alemania) más 5 meses a desarrollar en el mismo centro durante 2008 y 24 meses desde su incorporación como investigadora "Juan de la Cierva" en la Universidad de A Coruña. Su actividad investigadora puede resumirse en su participación de forma directa en 6 proyectos, 20 artículos publicados en revistas de prestigio de las áreas de química analítica y medio ambiente (12 como primer autor y 7 como "corresponding author"), entre ellos 4 en la acreditada revista Analytical Chemistry publicada por ACS, otro artículo en revisión y 3 más en preparación. También, ha presentado 30 comunicaciones a congresos (6 fueron orales) y además participa como revisora en revistas internacionales del área de química analítica.



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** PÉREZ SOLSONA, SANDRA

**Referencia:** RYC-2008-03276

**Area:** Química

**Número de orden:** 14 **Correo electrónico:** spsqam@iiqab.csic.es

**Título:**

Contaminantes emergentes quirales en el medio acuático: aplicación de técnicas de espectrometría de masas para el estudio del destino de fármacos quirales y sus metabolitos

**Resumen de la Memoria:**

El agua es un recurso limitado y es la auténtica clave de la vida en la tierra. Después de su utilización en múltiples aplicaciones en el hogar y la industria, vuelve generalmente al ciclo del agua. Los estudios recientes confirman la presencia de una multitud de productos farmacéuticos en aguas residuales tratadas y en aguas superficiales; así que estos compuestos se han clasificado como contaminantes emergentes. La preocupación principal con respecto a los productos farmacéuticos en el medio ambiente que provienen del tratamiento animal, de la acuicultura y del tratamiento de seres humanos, reside en su actividad farmacológica inherente es su continua entrada en el medio acuático. La quiralidad como una característica estructural de los fármacos ha recibido muy poca atención en el análisis del medio ambiente, a pesar de que muchos medicamentos se comercializan como racematos. La estereoquímica, sin embargo, puede ser un factor determinante de la actividad farmacológica enantiomérica de las drogas, así como su perfil farmacocinético en los organismos vivos. Efectos biológicos, tales como la toxicidad, mutagénicos, carcinogénicos y de alteración endocrina actividad, generalmente son estereoselectivos, aunque también lo son los procesos de biotransformación que tienen lugar en los organismos vivos y el medio ambiente. Dada la preocupación pública y científica por la presencia de compuestos farmacéuticos en el medio ambiente y su comportamiento en gran parte desconocido en términos de destino y de los efectos sobre salud en los organismos, las líneas actuales de la investigación del candidato se centran en desarrollar herramientas de análisis para fármacos quirales y sus metabolitos humanos que provienen de las aguas residuales con el fin de estudiar su presencia, distribución, y los procesos de transformación que sufren en el medio acuático. La investigación también tiene como objetivo el estudiar los procesos de degradación bióticos y abióticos en sistemas de ingeniería y naturales con el interés particular en la elucidación de las rutas de transformación. Estas tareas se basan en el empleo de técnicas de espectrometría avanzadas, espectrometría de masas con cuadrupolo-tiempo de vuelo (QqToF-MS), y espectrometría de masas con cuadrupolo-trampa lineal (QqLIT-MS), para la caracterización estructural de los productos de la transformación

**Resumen del Curriculum Vitae:**

La candidata Sandra Pérez Solsona obtuvo el grado de doctor en ciencias químicas en la Universidad de Barcelona en marzo 2003, con la calificación Excelente cum laude por unanimidad. La tesis doctoral se realizó en el departamento de Química Ambiental en el Instituto de Investigaciones Químicas y Ambientales (IIQAB-CSIC) en el prestigioso grupo del Prof. Damià Barceló. El trabajo se centro en el estudio de la presencia, del destino, de la distribución y de la ecotoxicología de los PAH en matrices ambientales acuosas, sólidas y gaseosas. El desarrollo de las nuevas metodologías analíticas se basó en una variedad de técnicas de extracciones químicas y biológicas en combinación con sistemas cromatográficos acoplados a la espectrometría de masas (GC-EI-MS, LC-APCI-MS). Realización de estancias durante el periodo de la tesis en el Max Plank Institute de Mainz/Alemania (6 semanas), en la Universidad de Mainz/Alemania (2 meses), en el King's Collage en Londres/Inglaterra (2 semanas) y en la Universidad de Oporto/Portugal (2 semanas). Las estancias en el extranjero permitieron al candidato ganar experiencia y adquirir habilidades en técnicas de espectrometría de masas y además en llevar a cabo e interpretar ensayos de toxicidad y bioquímicos. Posteriormente realizó una estancia posdoctoral en la State University of New York at Buffalo/EE.UU. (mayo 2003- 2005) en la que se familiarizó con técnicas avanzadas de espectrometría de masas (IT-MS y QqToF-MS) para la identificación de metabolitos y productos de degradación de compuestos farmacéuticos en el medio ambiente. En octubre 2003 fue becada por el Ministerio de Educación y Ciencia para estudiar el destino ambiental de las cianotoxinas en aguas superficiales (State University of New York at Buffalo/USA). Aprovechó la oportunidad para profundizar sus conocimientos acerca de las rutas de biodegradación de contaminantes orgánicos en diferentes compartimentos medioambientales. La aplicación de técnicas avanzadas de masas representó un pilar para conseguir sus objetivos en la investigación. La candidata se encargó de la supervisión de estudiantes de doctorado aportando sus conocimientos en ciencias ambientales adquiridos previamente. Inmediatamente después de acabar su estancia en la State University of New York at Buffalo, la candidata volvió a Barcelona para incorporarse en el grupo de investigación del profesor Damià Barceló del Departamento de Química ambiental del IIQAB-CSIC de Barcelona con un contrato Itinerario Integrado de Inserción Profesional (I3P). Actualmente, su investigación se centra en el análisis y el estudio del destino ambiental dando especial énfasis a la eliminación de fármacos en plantas depuradoras de tratamiento de aguas residuales industriales y municipales con procesos convencionales y como no convencionales (procesos de oxidación avanzados y reactores de membrana). El candidato también se dedica paralelamente a estudios de identificación de productos de transformación de fármacos. Se utilizan técnicas de espectrometría de masas: triple cuadrupolo (QqQ), trampa de iones (IT), y los híbridos cuadrupolo-tiempo de vuelo (QqToF) y cuadrupolo-trampa de iones lineal (QqLIT). De toda esta experiencia laboral y científica se derivan 18 artículos en revistas científicas de prestigio internacional 3 capítulos de libro y 20 contribuciones a congresos internacionales



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** DE LOS SANTOS ÁLVAREZ, NOEMÍ

**Referencia:** RYC-2008-02377

**Area:** Química

**Número de orden:** 15      **Correo electrónico:** npsa3@yahoo.es

**Título:**

DESARROLLO DE APTASENORES Y SELECCIÓN IN-VITRO DE NUEVOS APTÁMEROS PARA LA DETECCIÓN ELECTROQUÍMICA DE ANTIBIÓTICOS AMINOGLICÓSIDOS Y OTRAS MOLÉCULAS DE INTERÉS CLÍNICO

**Resumen de la Memoria:**

Se propone el diseño, preparación y caracterización de fases sensoras basadas en el empleo de aptámeros como elemento de reconocimiento molecular que se integrarán en sistemas de transducción electroquímica para la detección de moléculas de interés clínico como los antibióticos aminoglicósidos, prolaminas, etc. Para algunas de estas moléculas ya se han descrito aptámeros aunque nunca han sido usados con fines analíticos. Por ello, se propone emplear este tipo de secuencias ya conocidas para el desarrollo de métodos de análisis, con el objetivo último de encontrar una metodología de aplicabilidad general a cualquier aptámero, incluso los aún no conocidos. De hecho, se pretende llevar a cabo el aislamiento e identificación de aptámeros contra moléculas para las cuales aún no se haya descrito una secuencia de alta afinidad (por ejemplo, glicósidos cardiacos, prolaminas y citoquinas) haciendo uso del método de selección in-vitro de ácidos nucleicos (SELEX). Una vez identificada la secuencia, se caracterizará su afinidad y selectividad hacia el ligando. En cualquiera de los dos casos (aptámeros previamente descritos o identificados en el transcurso del proyecto), se estudiarán diferentes técnicas electroquímicas para llevar a cabo la transducción del evento de reconocimiento aptámero-analito en superficie. En principio se estudiará la posibilidad de realizar la detección sin necesidad de marcas empleando espectroscopia de impedancia faradaica, técnica muy sensible a cambios en la interfase. Como alternativas se propone la detección voltamétrica que requeriría el empleo de enzimas en ensayos de formato sándwich o con marcas electroactivas y la espectroscopia de plasmón de superficie (SPR) tanto como técnica de detección como de caracterización de la interacción aptámero-ligando.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

La solicitante obtuvo su Licenciatura en Ciencias Químicas por la Universidad de Oviedo en 1997 con excelentes calificaciones y recibió el Premio Extraordinario de Licenciatura al año siguiente por su Tesis describiendo un nuevo sistema catalítico para la oxidación de NADH. También ha recibido el Premio San Alberto Magno de Investigación y Desarrollo Tecnológico en 2001 por el desarrollo de un método analítico para la determinación de lactato deshidrogenasa en suero humano. Tras la consecución del grado de Doctor en 2002 se trasladó durante 6 meses a Cornell University para estudiar otros sistemas catalíticos. A su regreso obtuvo un contrato de incorporación de doctores al que renunció después de un año para completar su estancia postdoctoral nuevamente en Cornell University trabajando en el campo de las pilas de combustible. Actualmente se ha reincorporado al laboratorio de Electroanálisis de la Universidad de Oviedo trabajando en el desarrollo de aptasensores electroquímicos con un contrato Clarín de reincorporación de doctores. Ha codirigido una tesis de licenciatura y está codirigiendo una Tesis Doctoral. La solicitante es autora de 16 publicaciones (14 artículos y 2 capítulos de libro) cuyo índice de impacto medio es de 3,55 (significativamente mayor que el índice medio del primer cuartil de química analítica, 3,36). Entre ellas destacan un JACS y 2 Analytical Chemistry. Además es censora del Journal of Electroanalytical Chemistry y Bioelectrochemistry entre otras revistas internacionales y ha obtenido la evaluación positiva de la ANECA para las figuras de Profesor Contratado Doctor, Profesor Universidad Privada y Profesor Ayudante Doctor.



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** BERNA CANOVAS, JOSE

**Referencia:** RYC-2008-02647

**Area:** Química

**Número de orden:** 16 **Correo electrónico:** ppberna@um.es

**Título:**

CONTROL DEL MOVIMIENTO SUBMOLECULAR EN MÁQUINAS MOLECULARES SINTÉTICAS

**Resumen de la Memoria:**

El control del movimiento es la clave para producir verdaderas máquinas y motores moleculares sintéticos capaces de hacer trabajo a nivel molecular. El estudio del cambio de propiedades de materiales como respuesta a estímulo específico es de suma importancia en numerosas aplicaciones tecnológicas. Prueba de ello es que las investigaciones desarrolladas en el campo de la Nanotecnología son una prioridad explícita de los comités de investigación de la Unión Europea. Este proyecto busca investigar nuevas estrategias y metodologías para controlar los procesos traslacionales relativos de moléculas asociadas de manera no covalente. Se ha proyectado el diseño de varios sistemas moleculares basados en la estructura molecular de un [2]rotaxano conteniendo una o dos estaciones haciendo uso de procedimientos sintéticos bien conocidos. De los productos resultantes de estos estudios podrían derivarse numerosas aplicaciones dentro de un contexto multidisciplinar. Asimismo, el empleo de rotaxanos portadores de grupos organofosforados ofrece una perspectiva muy prometedora en la construcción de nuevas y mejoradas máquinas moleculares diseñadas para desempeñar una gran diversidad de tareas. Se ha planeado emplear diversos procesos competitivos basados en el reconocimiento molecular y la formación reversible de enlaces covalentes o coordinados para llevar a cabo operaciones conmutables en lanzaderas moleculares. Teniendo en cuenta estos procesos, lo que se propone en esta memoria de actividades es la preparación de máquinas moleculares catalítico-reactivas y conmutables mediante procesos de encapsulación reversible y la síntesis de máquinas fotoactivas capaces de modular sus propiedades mediante el apantallamiento o la exposición espacial de un fragmento molecular heteroconjugado. También se ha considerado la investigación, en lanzaderas moleculares, de la conmutación mecánica a nivel molecular de la fluorescencia para una colección de fluoróforos integrados en ellos y la del cambio de las propiedades magnéticas haciendo uso de metales paramagnéticos y radicales orgánicos estables. Además, aprovechando las metodologías ya conocidas y/o las nuevas adquiridas, se ha proyectado la síntesis de un músculo molecular sintético mejorado que funcione bajo la influencia de un estímulo químico y/o fotoquímico.-La versión completa de esta memoria de actividades se encuentra en el correspondiente archivo adjunto.-See the English version of this summary in the corresponding attached document of description of the research activity.MEDIANTE PALABRAS CLAVE:Auto-ensamblaje, enlaces de hidrógeno, síntesis usando plantillas, rotaxanos, reconocimiento molecular, compuestos organofosforados, fotoquímica, heterociclos, catálisis, propiedades ópticas no lineales, movimiento browniano controlado, motores y máquinas moleculares, cambio de propiedad, fluorescencia, magnetismo, monocapas auto-ensambladas, nanotecnología.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

José Berná obtuvo el título de Lic. en Ciencias Químicas por la U. de Murcia (1998) y comenzó su carrera investigadora el mismo año en el Grupo de Q. Orgánica Sintética obteniendo el grado de doctor en 2003, bajo la supervisión del Dr. Mateo Alajarín, con el apoyo de una Beca FPU del MEC y defendiendo la tesis "Síntesis y estudio estructural de tris(fosfazidas) y tris(iminofosforanos) macrobíclicos quirales". De la labor investigadora realizada en su Tesis cabe destacar la publicación de ocho artículos entre ellos un Angew. Chem. y un Chem. Eur. J. Durante este periodo realizó un par de estancias en los Dept. de Química del King's College London de Londres (UK) y de la U. de Uppsala (Suecia). Los conocimientos científicos, técnicas experimentales y actitudes adquiridas en su etapa predoctoral le permitieron integrarse como investigador posdoctoral (beca posdoctoral del MEC, 2004-06) en el grupo del Prof. David A. Leigh (Premio Descartes de Investigación Europea, 2007) en la U. de Edimburgo (UK) formado por 25 investigadores de doce países diferentes. Fruto de esa integración ha sido la publicación de ocho artículos destacando: "Transporte macroscópico mediante máquinas moleculares sintéticas" en Nature Mat. Uno de los aspectos más importante de este trabajo ha sido su carácter multidisciplinar, donde el candidato ha estado involucrado en aspectos sintéticos y fotoquímicos de estas máquinas moleculares y ha tenido la oportunidad de introducirse en el campo de las monocapas y su caracterización, llegando a realizar una estancia en el Zernike Institute for Advanced Materials de Groningen con la Prof. P. Rudolf. A continuación, como contratado de la U. de Edimburgo (2006-2007), participó en la puesta en marcha de una nueva metodología para la preparación de rotaxanos mediante el uso de plantillas metálicas activas de cobre y paladio lo que le ha supuesto la publicación de un artículo en J. Am. Chem. Soc. y dos en Angew. Chem. firmados como primer autor. Desde marzo de 2007, el candidato trabaja como contratado posdoctoral de la U. de Murcia y ha retomado su investigación con organofosforados para publicar un Org. Lett. y un Chem. Commun., firmando éste último como autor principal. Por su experiencia en este tipo de compuestos ha publicado 3 capítulos del prestigioso tratado Houben-Weil ([www.science-of-synthesis.com](http://www.science-of-synthesis.com)). A lo largo de su carrera se puede apreciar la diversidad de temas abarcados, desde la preparación de macrobíclicos quirales, cicloadiciones con heterociclos y estudios de catálisis (durante su Tesis) hasta la Q. Supramolecular (durante su etapa posdoctoral) incluyendo la preparación, caracterización y aplicación de monocapa. A todo ello habría que añadir la realización ocasional de proyectos en Q. Medicinal dentro la industria farmacéutica y la preparación de compuestos de interés en la industria de perfumes. Es coautor de 22 publicaciones (incluyendo 3 capítulos de libro y una revisión) en revistas internacionales con proceso de revisión por pares de reconocido prestigio. En la mayoría, realizador principal de la investigación y primer autor en cinco de ellas. Además, su trabajo ha sido motivo de 23 comunicaciones presentadas en congresos nacionales(2) e internacionales(21), varias de ellas orales. Ha participado en 5 grandes proyectos financiados por organismos públicos (1 internacional, 2 nacionales y 2 regionales).





MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** NAVARRO VAZQUEZ, ARMANDO

**Referencia:** RYC-2008-03806

**Area:** Química

**Número de orden:** 17 **Correo electrónico:** uscqoanv@cesga.es

**Título:**

Desarrollo de software científico y aplicación a la Resonancia Magnética Nuclear

**Resumen de la Memoria:**

La resonancia Magnética Nuclear (RMN) requiere en la interpretación de sus datos, contrastar los valores de las magnitudes obtenidos en diversos experimentos tales como constantes de acoplamiento escalares o dipolares, intensidades en experimentos NOE etc.. con valores obtenidos a partir de predicciones basadas en distintos modelos, bien de carácter empírico, fenomenológico o ab initio. El cómputo de los valores obtenidos en experimentos NOE tipo NOESY o ROESY es abordado en la mayoría de los casos mediante el cálculo completo de la matriz de relajación (CORMA). En mi línea de trabajo me propongo extender la aplicación de este método a sistemas en disolución, primordialmente acuosa, teniendo en cuenta de forma explícita los espines de las moléculas de disolvente. En una primera etapa realizaremos diversos cálculos de dinámica molecular en sistemas simples. La extracción de las funciones de correlación sobre estas dinámicas y el posterior promediado conducirán a las intensidades de NOE, los cuales serán contrastados con valores experimentales, esperando obtener información sobre la importancia del disolvente en estos experimentos. En una segunda etapa los cálculos basados en campos de fuerzas serán reemplazados por dinámicas ab initio basadas en el método de Car-Parrinello, lo cual nos permitirá evaluar el papel que juega el intercambio químico entre los diferentes protones lábiles en las intensidades obtenidas. Otro aspecto de mi investigación tiene un aspecto más práctico y que creemos de gran interés para la comunidad científica de RMN. Recientemente en nuestro grupo de investigación hemos desarrollado una plataforma de software (NMRDev), la cual está concebida como una serie de librerías e interfaces de programación en C++ orientada a la implementación de algoritmos relevantes al cálculo de propiedades en RMN. Dentro de esta plataforma hemos desarrollado un módulo para el cálculo de constantes escalares mediante ecuaciones empíricas (tipo Karplus etc..), de forma automática. En nuestro proyecto nos proponemos la unión de nuestro módulo con el programa de refinamiento de estructuras XPLOR-NIH. Esperamos de esta forma proporcionar una vía útil para la implementación de las numerosas ecuaciones disponibles en la bibliografía, especialmente para sistemas peptídicos o glicosídicos. Finalmente pretendemos abordar un trabajo de naturaleza más experimental, en el cual pretendemos estudiar la aplicabilidad de la medida de constantes residuales dipolares (RDCs) a la determinación de la estructura en moléculas pequeñas, así como el estudio de la aplicabilidad de esta metodología a problemas conformacionales. Nuestro grupo ha desarrollado un módulo propio de cómputo de RDCs orientado a este tipo de moléculas, sobre el cual nos proponemos abordar la resolución de problemas multiconformacionales así como la implementación de métodos automáticos de resolución de estructuras.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

Mi experiencia como investigador en los últimos años ha estado centrada en la aplicación y desarrollo de metodologías computacionales a diversos problemas. Por una parte, he trabajado, durante mi etapa de tesis y parte de mi etapa post-doctoral, en la aplicación de diversos métodos ab initio al estudio de la estructura y reactividad en moléculas altamente insaturadas, trabajos que ha sido publicado en revistas como Journal of American Chemical Society o Accounts of Chemical Research. Otra parte importante de mi trabajo durante este tiempo fue la investigación estructural, en colaboración con el prof Paul von Raqué Schleyer y el grupo del prof. Peter Lievens, de clusters metálicos de pequeño tamaño tales como C(Li)<sub>n</sub>, O(Li)<sub>n</sub> o O(In)<sub>n</sub>, trabajo que ha sido publicado en revistas del área de física como Journal of Chemical Physics o European Physical Journal. Debo destacar además que poseo experiencia en síntesis orgánica, adquirida en mi etapa de tesis, especialmente en la síntesis de heterociclos nitrogenados, publicándose mi trabajo en revistas como Journal of Organic Chemistry o Tetrahedron Letters. Durante mi estancia post-doctoral en el grupo del profesor Javier Sardina y durante mi última etapa como Investigador contratado en la Universidad de Santiago de Compostela mediante el programa Isidro Parga-Pondal, mi investigación ha estado muy centrada en el desarrollo de software aplicado a la Resonancia Magnética Nuclear. Entre Debemos destacar el programa MestRe-S, un simulador en tiempo real de un espectrómetro de RMN, el cual está siendo distribuido como software educacional por la empresa MestReLab Research, y en especial el programa NMRDev, una plataforma general para la implementación de algoritmos relevantes a la computación en RMN, el cual ha dado lugar a un contrato de desarrollo y un contrato de investigación con la empresa MestReLab Research. Además soy investigador principal de un proyecto financiado por la Xunta de Galicia (PGIDIT07PXIB209025PR) financiado por un período de tres años y participo a tiempo completo en un proyecto del MEC CTQ2007-65310 el cual es IP el Ryc Dr. V. S. Pedregal



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** FERNANDEZ RODRIGUEZ, MANUEL ANGEL

**Referencia:** RYC-2008-02846

**Area:** Química

**Número de orden:** 18 **Correo electrónico:** manu.fdez.riguez@gmail.com

**Título:**

Nuevos procesos de cicloadiación catalíticos empleando metales de transición

**Resumen de la Memoria:**

La línea principal de investigación propuesta en la presente memoria se enmarca dentro de las áreas de Química Orgánica y Química Organometálica y se centra en el desarrollo de nuevos procesos catalíticos. Las reacciones catalizadas por metales de transición han revolucionado la síntesis orgánica permitiendo la elaboración de moléculas complejas altamente funcionalizadas a partir de reactivos simples. Sus aplicaciones van desde la síntesis total de compuestos de interés médico o farmacológico hasta el desarrollo de nuevos materiales y procesos industriales. En la última década los complejos metálicos de cobre, platino, plata y, especialmente, oro han mostrado un relevante papel como catalizadores en procesos de activación de enlaces múltiples C-C actuando como ácidos de Lewis blandos carbofilicos. Esta activación facilita el ataque de nucleófilos débiles en reacciones de formación de enlaces C-C y C-heteroátomo. Dentro de este tipo de transformaciones, las reacciones de cicloisomerización han sido ampliamente estudiadas; sin embargo, los procesos catalíticos de cicloadiación intermolecular han sido poco desarrollados a pesar de su mayor relevancia sintética. La línea de investigación propuesta en esta memoria pretende el estudio y desarrollo de este tipo de cicloadiaciones catalíticas. En este sentido, el proceso de cicloadiación [4+2] hetero-deshidro-diels-alder entre 1,3-eninos capto-dativos (push-pull) y nitrilos en presencia de complejos de oro descrito recientemente (J. Am. Chem. Soc. 2008, 130, 2764-2765) supone un prometedor inicio de la investigación presentada. Dicho proceso comienza con la adición nucleófila del nitrilo sobre el triple enlace del enino, cuya naturaleza electrónica es crítica para que la reacción evolucione hacia las piridinas tetrasustituidas finales. Los objetivos de la investigación propuesta comprenden el estudio de la reactividad de estos nuevos sistemas capto-dativos frente a distintos nucleófilos insaturados en presencia de complejos de Au y otros metales como Cu, Ag y Pt. Así por ejemplo, el empleo de compuestos carbonílicos o imínicos podría conducir de manera análoga a derivados de dihidropiridona, dihidropiridina y dihidropiridona en procesos formales [4+2] en los que además se crearían dos centros estereogénicos. Se estudiarán a su vez eninos, acetilenos, así como dienófilos de diferente naturaleza electrónica con el objeto de determinar su influencia en los distintos procesos. Por otro lado, en aquellos casos en que se generen centros estereogénicos, se procederá al estudio de la versión asimétrica de la reacción mediante el empleo de catalizadores metálicos quirales no-racémicos. Otro objetivo importante de la investigación será la búsqueda de aplicaciones de las metodologías desarrolladas en la síntesis de compuestos de interés biológico o farmacológico.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

El solicitante Manuel Ángel Fernández Rodríguez se licenció en Ciencias Químicas (especialidad en Química Orgánica) por la Universidad de Oviedo en Julio de 1998. Posteriormente inició sus estudios de Doctorado en el Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, desarrollando su labor investigadora bajo la dirección de los profesores José Barluenga y Enrique Aguilar obteniendo el grado de Doctor por la Universidad de Oviedo en Noviembre de 2003 con la calificación de Sobresaliente Cum Laude y Premio Extraordinario de Doctorado. Su trabajo durante la tesis doctoral se centró en el estudio de la síntesis y reactividad de complejos carbeno de Fischer  $\square, \square$ -insaturados frente a diversos sistemas como 1,3-dipolos, orto-quinodimetanos y olefinas activadas. Durante este tiempo en la Universidad de Oviedo colaboró como profesor asistente en docencia de prácticas de laboratorio de la Licenciatura de Química. Tras el doctorado, trabajó nueve meses como becario postdoctoral en la Universidad de Oviedo en colaboración con la empresa farmacéutica Aventis. En Septiembre de 2004 se incorporó al grupo del Profesor John F. Hartwig en el Departamento de Química de la Universidad de Yale (Estados Unidos) como becario postdoctoral (MEC/Fulbright). Durante su estancia posdoctoral trabajó en el campo de las reacciones de acoplamiento cruzado catalizadas por complejos de paladio desarrollando una nueva metodología altamente eficaz y general de síntesis de sulfuros de arilo. En Diciembre de 2006 entra a formar parte del IIQAB (CSIC, Barcelona) en colaboración con el grupo del Profesor Barluenga (IQOEM, Universidad de Oviedo) dentro del Programa Juan de la Cierva. Actualmente su investigación se centra en la catálisis homogénea empleando metales de transición. Como resultado de su trayectoria investigadora, el candidato ha publicado una patente internacional, diversos trabajos en revistas de reconocido prestigio internacional (3 Journal of American Chemical Society; 2 Angewandte Chemie International Edition.; 4 Chemistry, an European Journal; 1 Organic Letters; 1 Journal of Organic Chemistry, etc), cuatro revisiones (1 Journal of Organometallic Chemistry, 1 Anales de Química, 2 colaboraciones con la Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis) y posee varios trabajos más enviados o en proceso de preparación. Además ha presentado 12 comunicaciones a congresos (6 comunicaciones orales y 6 pósters).



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** MUNOZ HERRANZ, MARIA PAZ

**Referencia:** RYC-2008-03504

**Area:** Química

**Número de orden:** 19 **Correo electrónico:** chmpmh@bristol.ac.uk

**Título:**

Ciclaciones de Bis(alenos) catalizadas por Metales de Transición

**Resumen de la Memoria:**

El principal objetivo de esta investigación consistirá en el descubrimiento y desarrollo de nuevos modos de reacción utilizando metales de transición. En concreto, se pretende estudiar las reacciones de bis(alenos) que permitan obtener estructuras cíclicas difíciles de obtener mediante métodos tradicionales. El empleo de diferentes metales de transición (Pd, Pt, Ti, Au, Ru, Rh) con diferentes propiedades electrónicas y estéricas en las reacciones de bis(alenos) permitirá modular la selectividad para obtener diferentes productos cíclicos de manera eficaz y con elevada "economía atómica". El objetivo de este proyecto no será sólo el desarrollo de nuevas metodologías, sino también el estudio mecanístico de las nuevas reacciones. La síntesis de compuestos marcados isotópicamente (2H, 13C) ayudará a seguir el movimiento de los átomos durante la reacción y permitirá proponer nuevos mecanismos. Estos estudios mecanísticos de las nuevas reacciones permitirán mejorar el conocimiento sobre la interacción de los metales con los enlaces insaturados, lo que llevará a mejorar los sistemas catalíticos empleados hasta obtener la máxima eficacia.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

**FORMACIÓN ACADÉMICA:** Licenciatura en Ciencia Químicas (UAM. 1994-1999); Diploma de Estudios Avanzados (UAM. 2001); Doctor en Ciencias Químicas (Sobresaliente cum laude; "Competing Pathways in the Cyclization of 1,6-Enynes Catalyzed by Transition Metals: Selectivity Studies"; UAM. 22-10-2004). **FORMACIÓN INVESTIGADORA:** Becaria de Colaboración (UAM, Sept 1998-Ago 1999); Becaria de la Comunidad Autónoma de Madrid (UAM. Sept 1999-Dic 1999); Becaria FPU del MEC (UAM. Ene 2000-Dic 2003); Becaria de la Fundación General de la Universidad Autónoma de Madrid (UAM. Ene 2004); Research Assistant (University of Bristol, UK. Nov 2004-Jul 2005); Becaria Postdoctoral del MEC (University of Bristol. Ago 2005-Jul 2007); Research Associate (University of Bristol, UK. Agosto 2007 -actualidad). **LISTA DE PUBLICACIONES:** Angew. Chem. Int. Ed. 2008, en prensa; J. Label Compd. Radiopharm. 2007, 50, 1072; Eur. J. Org. Chem. 2007, 25, 4146; Chem. Eur. J. 2006, 12, 8650; Chem. Eur. J. 2006, 12, 1694; Chem. Eur. J. 2006, 12, 1677; Angew. Chem. Int. Ed. 2005, 44, 6146; Organometallics 2005, 24, 1293; Angew. Chem. Int. Ed. 2004, 43, 2402; Pure Appl. Chem. 2003, 76, 453; Synthesis-Stuttgart 2003, 2898; Eur. J. Org. Chem. 2003, 706; J. Am. Chem. Soc. 2001, 123, 10511; Adv. Synth. Catal. 2001, 343; J. Am. Chem. Soc. 2000, 122, 11549. **CONTRIBUCIONES A CONGRESOS:** Pósters: "Cyclizations of enynes catalyzed by PtCl<sub>2</sub> or other transition metal chlorides: divergent reaction pathways" IASOC. Napoles. 2002; "New catalysts for cyclization of enynes" XXIX Meeting of the Spanish Royal Society of Chemistry. Madrid. 2003; "New 3,3'-Substituted Phosphoramidites for the Asymmetric Pauson-Khand Reaction" OMCOS 13. Geneva. 2005; "Strong acid promoted dealkylative lactonisation of allyl malonates" ESOC15, Dublin, 2007 (1er premio mejor póster). Comunicaciones orales: "Synthesis of New 3,3'-Substituted Phosphoramidites" Lyme Park, UK. 2005; "Binol bis-triflones: A whistle-stop tour!" Final LIGBANK Meeting. Bratislava. 2006; "Pd-Catalysed Cyclization of Dienes and Related Reactions: Mechanistic and Kinetic Aspects" III Simposium de Jóvenes Investigadores. ICIQ, 2006. **PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN:** "Novel Pd and Ru-catalyzed routes to waste-free C-C bond syntheses" (COST D12, 1998-2000); "Química organometálica del Pt, Pd y otros metales de transición. Aplicaciones sintéticas y síntesis de poliarenos" (MCyT, 2002-2004); "Mechanistic Investigations of the anionic Thia-Fries rearrangement of aryl triflates to aryl triflone" (AZ-UK, EPSRC, 200-2005); "The Pd-catalysed cycloisomerisation of 1,6-dienes: a mechanistic study" (UoB, EPSRC, 2001-2004), "Development of new catalytic protocols for alkene difunctionalisation" (EPSRC, 2007-2010); "The European Ligand Bank: An innovation Facility" (FP6-505267-1, 2003-2006); "Dispersion in the urban environment, indoor and outdoor" (Home Office, UK government)



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** ABAD PASTOR, JOSE MARIA

**Referencia:** RYC-2008-03501

**Area:** Química

**Número de orden:** 20 **Correo electrónico:** J.Abad-Pastor@liv.ac.uk

**Título:**

Síntesis de nanopartículas, Nanoclusters, desarrollo de Nanoestructuras y su utilización conjunta con biomoléculas para aplicaciones en Nanotecnología (Nanoaparatos, nano(bio)electrocatalisis, nano(bio)sensores, bioelectrónica)

**Resumen de la Memoria:**

Las principal línea de investigación propuesta esta dentro de las áreas de la Nanoquímica y la Bionanotecnología y comprende: (i) Síntesis y funcionalización de nanopartículas metálicas, nanoclusters y el desarrollo de nanoestructuras. (ii) Acoplamiento de nanopartículas con biomoléculas para aplicaciones en biosensores, bioelectrónica y nanobioelectrocatalisis. En esta línea se abordarán los siguientes apartados: (1) La síntesis de nanopartículas y nanoclusters bien definidos, su modificación y funcionalización así como su organización en nanoestructuras mediante su utilización como bloques de construcción nanométricos. Las Nanopartículas (NPs) poseen útiles propiedades catalíticas, (opto) electrónicas, y magnéticas derivadas de sus dimensiones nanométricas. Estas son adecuadas para aplicaciones en optoelectrónica, nanodispositivos, catalizadores, sensores químicos y etc. NPs funcionalizadas con elementos de reconocimiento complementarios serán utilizadas para construir ensamblamientos de 1D, 2D y 3D con una alta organización dirigidas mediante interacciones específicas. (2) La aplicación de clusters metálicos en catálisis heterogénea. Clusters metálicos (Pt, Au) subnanométricos serán depositados sobre óxidos metálicos para obtener una alta actividad catalítica en la oxidación de CO y H<sub>2</sub>. También, se desarrollarán electrocatalizadores basados en clusters de oro y platino para células de combustible y para electrooxidación de CO y metanol. (3) La utilización de nanopartículas conjuntamente con biomoléculas para el diseño racional de materiales bifuncionales nanoestructurados y su aplicación en nanodispositivos, biosensores, bioelectrónica y biocatálisis. Se llevará a cabo combinando la síntesis de nanopartículas, la nanoingeniería de superficies mediante la tecnología de formación de monocapas autoensambladas (SAMs) y la fabricación de nanointerfases biológicas para la inmovilización orientada de biomoléculas sobre superficies de oro. (4) El acoplamiento y conexión electrónica de proteínas redox sobre electrodos modificados con nanopartículas de oro para obtener una rápida y eficiente transferencia electrónica directa (DET) para su aplicación en bioelectrónica y nanoelectrocatalisis. Estos sistemas híbridos estarán formados por nanopartículas actuando como puentes electrónicos para facilitar la transferencia electrónica entre la proteína y el electrodo con el consecuente incremento en las constantes de transferencia electrónica.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

El solicitante Jose M. Abad Pastor es licenciado en ciencias químicas por la Universidad Autónoma de Madrid (Jun 1995) en la especialidad de Química Analítica. Obtuvo su doctorado en el grupo de Biosensores de la Prof. E. Lorenzo en el Dpto. de Química Analítica de la misma universidad en Enero de 2001 con la tesis "La microbalanza de cristal cuarzo como transductor en el desarrollo de biosensores". Fue investigador pionero en España en la puesta a punto y aplicación de la técnica de la microbalanza de cristal de cuarzo para el desarrollo de biosensores piezoeléctricos así como para la caracterización de procesos interfaciales publicando relevantes trabajos (Anal. Chem. 1998, 70, 2848-2855; Anal. Chim. Acta 1998, 368, 183-189) Realizó su primera estancia posdoctoral desde 2001-2004 en el grupo de bioelectrocatalisis del Prof. Víctor M. Fernández del instituto de Catálisis (CSIC) desarrollando nuevas estrategias de inmovilización orientada de biomoléculas sobre interfases sólidas y publicando importantes artículos (J. Am. Chem.Soc 2000, 122, 9808; J. Am. Chem.Soc 2002, 124, 12845). En diciembre de 2004, se incorporó al grupo del Prof. David J. Schiffrin del centro de Nanoescala de la Universidad de Liverpool como becario posdoctoral para realizar una segunda estancia posdoctoral de dos años como investigador asociado. En ese periodo se formó en la síntesis y caracterización de nanopartículas y desarrolló su propia línea de investigación basada en la inmovilización específica de biomoléculas sobre nanopartículas metálicas, siendo el autor principal y de correspondencia de los trabajos publicados en ese periodo. Desde 2006 se encuentra como investigador contratado en dicha universidad participando en un proyecto europeo. Ha publicado trabajos en las mejores revistas del área tales como Journal of the American Chemical Society (cinco artículos) o Analytical Chemistry los cuales han recibido un total de 177 citas. También ha sido censor de Journal of the American Chemical Society y participado en diferentes congresos y encuentros en el área presentando tanto oral como escrito sus resultados más relevantes obtenidos en su investigación. Igualmente, ha realizado trabajos de consultaría científica para la universidad de Liverpool.



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** CASANOVA CASAS, DAVID

**Referencia:** RYC-2008-02233

**Area:** Química

**Número de orden:** 21 **Correo electrónico:** davidcasanova@berkeley.edu

**Título:**

Estudio teórico y computacional de estados excitados moleculares y su aplicación en procesos fotoquímicos

**Resumen de la Memoria:**

El proyecto de investigación que se pretende realizar se enmarca dentro del estudio teórico y computacional de la estructura electrónica de sistemas químicos en sus estados excitados. Dicho proyecto consta de dos líneas de investigación principales estrechamente interrelacionadas. Por una parte se realizará el desarrollo y mejora de los algoritmos computacionales existentes para el estudio fotoquímico en sistemas de interés. Los objetivos principales de esta línea de investigación se centran en la obtención de nuevos algoritmos con un coste computacional razonable para aquellos casos en que los métodos existentes no proporcionan una respuesta precisión/coste satisfactoria. Este trabajo se va a realizar como desarrollador del programa Q-Chem y en colaboración con el grupo del profesor Head-Gordon. Además se aplicaran los distintos métodos desarrollados, a si como otros ya existentes, en el estudio de procesos fotoquímicos, con especial interés en el estudio de cromóforos orgánicos candidatos para actuar como dyes sensibilizadores en celdas solares de Grätzel. Dependiendo del éxito de estos dyes orgánicos, no se descarta el estudio de dyes inorgánicos, principalmente complejos de coordinación de Rutenio y Cobalto. Paralelamente se pretende introducir el uso de nuevos métodos de spin-flip en el estudio de las propiedades de estados electrónicos excitados, y principalmente al análisis de intersecciones cónicas. El éxito de estos estudios representaría una gran reducción del coste computacional de los métodos utilizados en la actualidad (SA-CASSCF y MRSDCI entre otros), haciendo posible el estudio de sistemas relativamente grandes.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

En el año 2000 me licencié en Química en la Universitat de Girona. Seguidamente inicié los estudios de Física en la Universitat de Barcelona, donde me licencié en el año 2004. Durante la realización de los estudios de doctorado (2002-2006), titulados Medidas de forma y simetría en química: algoritmos y aplicaciones y realizada en el grupo del profesor Santiago Álvarez en la Universitat de Barcelona, participé en el desarrollo y aplicación de diversas herramientas para el estudio de las propiedades de forma y simetría moleculares. Los distintos artículos que he publicado hasta el momento en este campo (un total de 13) dan testimonio de su gran utilidad en estudios de correlación estructura-propiedad. Además, la realización de esta Tesis Doctoral me permitió adquirir experiencia dentro del campo de la química teórica aplicada a compuestos inorgánicos, y finalmente alcanzar el grado de Doctor en Química en junio de 2006. En el apartado docente, he impartido un total de 700 horas de clase en la Universitat de Barcelona (departamento de Química Inorgánica). Cabe destacar la estancia de 3 meses realizada en el año 2005 dentro del grupo del profesor Thomas Ziegler en la University of Calgary (Canadá). El proyecto llevado a cabo se enmarca dentro del estudio de un nuevo método para el análisis de los efectos del disolvente en procesos químicos. Los resultados de éste quedaron plasmados en un artículo publicado en el Journal of Chemical Theory and Computation (J. Chem. Theory Comput. 2007, 3, 458-476.). Una vez terminada la tesis doctoral y hasta diciembre de 2006 permanecí en el grupo del profesor Álvarez como Ayudante LOU impartiendo la docencia correspondiente al contrato y continuando la investigación realizada dentro del grupo. En enero de 2007 me integré como investigador posdoctoral contratado en el grupo del profesor Head-Gordon en la University of California-Berkeley (EEUU). En el mes de abril del mismo año conseguí una beca posdoctoral dentro del programa conjunto MEC-Fulbright que disfruté en el mismo grupo. El proyecto posdoctoral se enmarca dentro del estudio teórico y computacional de la estructura de estados excitados moleculares. Uno de los frutos de este trabajo es un artículo ya aceptado y que será publicado en breve en el Journal of Chemical Physics. Además de los distintos avances realizados dentro de este campo a nivel teórico-computacional, esta estancia ha permitido establecer una colaboración muy interesante con el grupo del profesor Michael Grätzel para el estudio de posibles candidatos en el diseño de nuevas celdas solares de Grätzel. También cabe destacar la participación como referee en la revista Molecular Physics.



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL  
CONVOCATORIA 2008**

**Nombre:** AMORIN LOPEZ, MANUEL

**Referencia:** RYC-2008-02960

**Area:** Química

**Número de orden:** 22      **Correo electrónico:** qoamorin@usc.es

**Título:**

DESARROLLO DE BIOSENSORES DE SECUENCIAS DE ADN EMPLEANDO CICLOPÉPTIDOS

**Resumen de la Memoria:**

Dentro de las nanoestructuras, una de las construcciones más destacadas en los últimos años, tanto por sus múltiples diseños como por sus propiedades y aplicaciones, es la de los nanotubos peptídicos basados en ciclopéptidos (CP). Por consiguiente, la propuesta consiste en el desarrollo de sensores de ADN basados en CP, para lo cual sintetizaremos CP (con diseños que darían lugar a heterodímeros cuando éstos se autoensamblasen). Estos CPs contendrán grupos cromóforos que, por mediación del autoensamblaje, quedarán en una disposición adecuada para la formación de excímeros, excíplejos, o facilitando la transferencia energética o electrónica; detectándose de este modo la formación del dímero. Para ello se prepararán ciclopéptidos conjugados con los correspondientes grupos dadores (como pireno) o aceptores (como dapsilo). Los sistemas químicos que reúnen estas características son ideales para el diseño de receptores que se ensamblan y reorganizan en respuesta a la presencia de determinadas especies (ligandos -ADN o ARN en nuestro caso-) en disolución (sensores). El elemento clave en el diseño de estos sensores es la formación combinatoria de diferentes epitopos mediante la rotación relativa de los anillos que forman los nanotubos/dímeros. Así como la formación mayoritaria de uno de los dímeros, al presentar los grupos necesarios para el reconocimiento químico específico del sustrato, como, por ejemplo, una cadena oligonucleotídica. En este caso sería necesario que los CPs de este estudio dispusiesen adicionalmente de grupos que actúen como receptores moleculares (bases piridínicas o pirimidínicas complementarias); así, la presencia de una secuencia determinada de ADN que pueda ser reconocida por las correspondientes estructuras diméricas, que a su vez señalarán la presencia de dicha secuencia de bases, gracias a la característica emisión de fluorescencia por la formación de excímeros, excíplejos, FRET, etc. Por consiguiente, se sintetizarán CPs capaces de formar heterodímeros, los cuales serán conjugados con un grupo dador (ej. pireno), mientras que el otro lo será con un grupo aceptor (ej. dapsilo). La formación del dímero se detectará mediante la correspondiente emisión FRET, una vez irradiado el pireno. La parte del sensor que reconocerá el ADN consistirá en una cadena de ADN complementaria a la cadena de ADN que se desea detectar unida al CP; para ello, se sintetizarán cadenas de ADN de unos 4 o 5 beses inicialmente, que permitirán el reconocimiento de la secuencia deseada. En un paso posterior, a los CPs se les acoplará una cadena de poliargininas, con la finalidad de introducir el sensor de ADN dentro de un organismo vivo y llevar a cabo la detección de la secuencia deseada de ADN en un medio intracelular, con el fin de extender estos sensores para aplicaciones como terapia génica, detección de puntos específicos del genoma en organismos vivos, detección de Silent RNA, etc. La elección de una cadena de poliargininas se debe a sus propiedades para atravesar barreras celulares, fácil síntesis, relativa baja toxicidad, etc. Por todo ello, es un sistema empleado con gran éxito para introducir ADN, péptidos y otras moléculas. Estas construcciones podrían constituir un nuevo modelo para preparar vectores para introducir ADN, péptidos, etc. en sistemas in vivo.

**Resumen del Curriculum Vitae:**

En el último año de carrera (1999-2000) comencé a trabajar en el grupo del profesor Juan R. Granja en el campo de la química supramolecular, más concretamente en nanotubos peptídicos, para lo cual recibí una beca del departamento de Química Orgánica de la Facultad de Química de la Universidad de Santiago de Compostela. Dicha relación se extendió posteriormente, llevando a cabo, bajo su dirección, investigaciones que culminaron en la realización de la tesis de licenciatura primero, y de la tesis doctoral después, recibiendo por ésta última el Premio Extraordinario de Doctorado. Además, durante este período, disfruté de una beca de la Xunta de Galicia y una beca FPU del MEC. En este tiempo, mi trabajo dio lugar a varias publicaciones en importantes revistas en el mundo de la química, tales como: The Journal of American Chemistry Society, Angewandte Chemie (Int. Ed.), Chemistry – A European Journal, Organic Letters, etc., pudiendo calificarse mi contribución, en los artículos publicados, como de principal o muy relevante. Durante mi investigación doctoral tuve también la oportunidad de realizar dos visitas a reconocidos grupos de investigación internacionales, disfrutando para ello de sendas becas: - University of Oxford, Oxford, U. K.: 2004 (3 meses). TEMA: Investigación sobre las propiedades de ciclopéptidos capaces de insertarse en membranas lipídicas y dar lugar a nanotubos. - The Scripps Research Institute. La Jolla, California, USA.: 2002/2003 (6 meses). TEMA: Investigación sobre el diseño y síntesis de librerías peptídicas de D,L-alfa-péptidos, buscando nuevos agentes antimicrobianos y evaluación de los mismos frente a diferentes bacterias patógenas. Finalmente, durante 7 meses (2006) estuve contratado como investigador posdoctoral en dicho grupo, tras lo cual me incorporo al grupo del Profesor M. Reza Ghadiri como investigador posdoctoral, gracias a una beca MEC/Fulbright: - The Scripps Research Institute. La Jolla, California, U.S.A.: 10/2206-Presente. TEMA: Diseño y desarrollo de sistemas que nos permitan detectar la secuencia específica de una cadena de ADN, empleando para ello nanoporos. Estos nanoporos consisten en proteínas tales como la alfa-Hemolisina que se insertan en membranas lipídicas y cuando se aplica un campo eléctrico el ADN pasa a través de esta proteína (usando para ello técnicas de patch-clamp). Lista de publicaciones: J. Am. Chem. Soc., 2008, 130, 818-820. Chem. - Eur. J. 2008, 14, 2100-2111. Heterocyclic, 2006, 67, 575-583. Org. Lett. 2005, 7, 4681-4684. Angew. Chem. Int. Ed. 2005, 44, 5710-5714. Chem. - Eur. J. 2005, 11, 6539-6547. Bioorganic and Medical Chemistry 2005, 13, 5145-5153. Drug Del. Sci. Tech. 2005, 15, 87-92. J. Am. Chem. Soc. 2003, 125, 2844-2845. Esta lista de publicaciones se complementa con la participación y contribución científica realizada en 12 congresos tanto nacionales como internacionales. BECAS, PREMIOS Y HONORES: Premio Extraordinario de Doctorado. Beca MEC/Fulbright. De la fundación MEC/Fulbright. Doctor en Química, con Suma Cum Laude. Universidad de Santiago de Compostela, España. (4 de noviembre de 2005). Beca FPU. Del MEC. (01/2002 – 12/2005). Beca Xunta de Galicia. De la Xunta de Galicia, España. Para estudios de doctorado. (10/00 – 12/01). Beca colaboración del Departamento de Química Orgánica. (1999 – 2000).