



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: PITA MARTÍNEZ, MARCOS

Referencia: RYC-2009-04170

Area: Química

Correo electrónico: pitamarcos@gmail.com

Título:

Desarrollo de nanobiodispositivos basados en la integración de nanoestructuras complejas con biocatalizadores y otras biomoléculas con capacidad sensora

Resumen de la Memoria:

En el presente proyecto se desarrollarán diferentes tipos de nanoestructuras basadas en nanopartículas magnéticas. En primer lugar se sintetizarán dichas nanopartículas, y se modificarán con diferentes materiales tales como sílice, metales o diferentes polímeros para crear diferentes materiales compuestos. Cada uno de estos materiales se estudiará en el contexto de su organización ordenada de tal modo que se puedan crear nanoestructuras complejas, para lo cual se utilizarán reacciones químicas entre grupos funcionales previamente inmovilizados sobre las nanopartículas vía funcionalización a partir de agentes silanizantes, monocapas autoensambladas ó reacciones de acoplamiento respectivamente. Además se utilizarán campos magnéticos y otras fuerzas para el ensamblaje de dichas nanoestructuras. Una vez se disponga de las nanoestructuras adecuadas se utilizarán como base para la integración de entes biológicos tales como biocatalizadores enzimáticos y otras enzimas, anticuerpos o ácidos nucleicos, a la vez que se integrarán con dispositivos sensores de carácter óptico (Resonancia de Plasmón Superficial, Infrarrojo, Raman, UV-Vis), electroquímico (electrodos modificados), aparatos complementarios a los mismos (Microbalanza de cristal de cuarzo) u otras posibilidades. Una vez se disponga de los nanobiodispositivos adecuados que integren las nanoestructuras, las biointerfases y los elementos transductores de señal se utilizarán para desarrollar nano-biosensores, nano-biocatalizadores y biopilas de combustible nanoestructuradas. Además se podrán utilizar dichos nanobiodispositivos con sistemas enzimáticos capaces de operar con lógica Booleana, de manera que sea el propio sistema el que, mediante la catálisis de determinadas reacciones enzimáticas concatenadas ofrezcan una señal final ya analizada que sea función de las diferentes entradas que tenga la red de computación enzimática. Este tipo de señal se puede acoplar a un sistema de respuesta y actuar de manera autónoma en consecuencia de las variaciones en el entorno que se detecten a través de las múltiples señales de entrada. El resultado final serían nanobiodispositivos capaces de actuar con lógica Booleana y ofrecer una respuesta activa al problema inicial.

Resumen del Curriculum Vitae:

Mi primera etapa como investigador comenzó en el Instituto de Catálisis del CSIC. Allí me incorporé en el grupo del profesor Víctor M. Fernández en la línea de investigación sobre inmovilización de proteínas redox sobre superficies electroactivas. Mi tarea principal consistió en sintetizar nanopartículas magnéticas con diferentes recubrimientos (sílice, oro, plata-oro) que se utilizaron para inmovilizar diferentes biomoléculas (enzimas, anticuerpos, ácidos nucleicos) de manera orientada. Para perfeccionar la síntesis de nanopartículas magnéticas realicé una estancia trimestral en la U. de Utrecht, con el profesor Albert Philipse. Como resultado de esta investigación se consiguió una patente extendida a la UE, USA y Japón, licenciada a la empresa Solutex que además han dado pie a una publicación al demostrar un biosensor de DNA. En este tiempo también se sintetizaron nanopartículas de oro (sin núcleo magnético), que sirvieron como plataforma para inmovilizar de manera orientada y específica, a través de monocapas autoensambladas, proteínas redox, trabajo publicado en el JACS. Otra parte de mi investigación en este período fue la inmovilización de lacasas sobre electrodos de oro a través de monocapas de tioles, que la llevé a cabo durante dos estancias trimestrales en la U. de Lund (Suecia), colaboración de la que salieron dos artículos publicados. Al poco de terminar la Tesis Doctoral me incorporé en la Universidad de Clarkson (Nueva York, USA) bajo la dirección del Profesor Evgeny Katz, donde actualmente continúo. Aquí formamos un grupo de investigación multidisciplinar, donde se interrelacionan la nanotecnología con biosensores, pilas de combustible, electroquímica y muchas otras ramas para definir el marco y las posibles salidas de un nuevo concepto en biocomputación: el uso de reacciones químicas catalizadas enzimáticamente de manera que formen operaciones de computación siguiendo la lógica Booleana. Alrededor de este concepto en el grupo se han diseñado diversas reacciones enzimáticas capaces de ofrecer una señal sólo cuando la combinación de señales entrantes produce una señal saliente positiva. Así se diseñaron diversas puertas lógicas (AND, OR, XOR_i) y concatenación de ellas, utilizándose además en conjunto con materiales con capacidad de respuesta. Entre estos materiales se encuentran membranas que se abren y cierran con cambios de pH, emulsiones que cambian de fase O/W a W/O, o nanopartículas que se agregan/disgregan con la actuación de la lógica enzimática. Dichas puertas lógicas también se han acoplado a un electrodo modificado con un polímero capaz de abrirse y cerrarse, permitiendo el paso de la corriente sólo cuando la red de lógica enzimática así lo dicta. También se han conseguido sistemas de transducción de la señal basados en nanopartículas magnéticas recubiertas con oro, a modo de continuación de mi trabajo predoctoral. Además mantenemos una línea de desarrollo teórico y modelización de las puertas lógicas enzimáticas para su optimización y adecuación a los sistemas electrónicos, minimizando el ruido químico. De todo este trabajo han surgido 19 publicaciones en revistas punteras del sector como Nano Letters o JACS (5) entre otros, y una patente provisional. El éxito en este grupo llevó a mi ascenso a profesor asistente de investigación a comienzos del 2009.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: LUQUE ALVAREZ DE SOTOMAYOR, RAFAEL

Referencia: RYC-2009-04199

Area: Química

Correo electrónico: q62alsor@uco.es

Título:

Nanomateriales de diseño para la producción de energía y productos químicos de alto valor añadido

Resumen de la Memoria:

La necesidad de disminuir las emisiones, el consumo de energía y la producción de residuos, así como el fin cada vez más cercano de la era del petróleo, ha dado lugar a la potenciación y desarrollo de las denominadas tecnologías sostenibles que emplean fuentes alternativas de materias/materiales renovables, cumpliendo con los requisitos anteriormente mencionados y que están llamadas a jugar un papel fundamental en el futuro. Los biocombustibles son una de estas alternativas que pueden contribuir significativamente al incremento de la demanda energética previsto para los próximos 10-20 años, así como a la reducción de emisiones gaseosas (ej. CH₄, CO₂) para paliar el fenómeno del calentamiento global. Asimismo, la producción sostenible de productos químicos de alto valor añadido es otro de los retos importantes de la Química del siglo XXI y que puede contribuir sobremanera al desarrollo de países subdesarrollados/en vías de desarrollo en el futuro. Por otra parte, la nanotecnología (o nanociencia en general) es un campo de investigación que ha experimentado un enorme desarrollo en los últimos años debido a las propiedades específicas de muchos materiales en la nanoescala, que les confieren una gran aplicabilidad en diversas áreas entre las que se incluyen la medicina, la catálisis, los sensores y los dispositivos ópticos y (opto)electrónicos. Teniendo en cuenta todas estas consideraciones, en el proyecto a desarrollar, se aunarán esfuerzos para unir estas tres áreas diferentes de conocimiento para la preparación de biocombustibles y productos químicos de alto valor añadido mediante la utilización de nanomateriales de diseño. De esta forma, se pretenden sintetizar diferentes tipos de sólidos básicos/ácidos nanoporosos como catalizadores (ej. Óxidos metálicos, materiales carbonosos, sílices) y como soportes de nanopartículas metálicas/óxidos metálicos (ej. Fe, Cu, Ag, Au, Pt, Pd, Ru, Rh), así como una variedad de nanomateriales entre los que se incluyen nanofibras, nanobastones, nanoprismas y nanotubos como catalizadores y/o soportes de nanopartículas. Estos nanomateriales serán posteriormente empleados en una serie de procesos para la preparación de energías alternativas entre los que se incluyen la transesterificación de aceites vegetales/de desecho con un elevado contenido en ácidos grasos libres a biodiesel (bases sólidas: MgO, SrO y mezclas de ambos; sólidos ácidos: ácidos Starbon®; biocatalizadores: lipasas inmovilizadas sobre materiales nanoporosos), la preparación de nuevos biocombustibles y productos químicos de alto valor añadido a partir del craqueo catalítico de aceites y biomasa (mediante sólidos ácidos y/o nanopartículas metálicas soportadas de Pt, Pd, Rh, Ru y Cu sobre soportes ácidos), bio-aceites mediante la pirólisis rápida de biomasa, la producción de biocombustibles mediante reacciones de Fischer-Tropsch (utilizando nanopartículas soportadas de Fe y Cu) y el procesamiento de triglicéridos/ácidos grasos/glicerina (via reducción e hidrogenolisis utilizando nanopartículas soportadas de Rh, Ru y Cu) para la obtención de otros biocombustibles y productos de alto valor añadido. Las reacciones propuestas se llevarán a cabo siguiendo los principios de la Química Sostenible mediante la utilización de condiciones suaves de reacción, el uso de microondas y ultrasonidos, disolventes benignos con el medioambiente, etc.

Resumen del Curriculum Vitae:

Rafael Luque se licenció en Química (1996-2001) por la Universidad de Córdoba con Premio Extraordinario de Licenciatura (2002) y finalizó su tesis en 2005 con una beca FPU del Ministerio de Educación en el Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Córdoba bajo la dirección de los Profs. Juan Manuel Campelo Pérez y José María Marinas Rubio. Su formación se completó con dos estancias breves de 9 meses (entre 2003 y 2004) en el Green Chemistry Centre of Excellence (GCCE) de la Universidad de York (Reino Unido) bajo la supervisión del Dr. Duncan Macquarrie. Al finalizar su tesis, el Dr. Luque volvió a la Universidad de York con un contrato post-doctoral de 3 años financiado por la EPSRC (2005-2008) para realizar un proyecto multidisciplinar en el GCCE, supervisado por el Prof. James Clark, en colaboración con el Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Manchester. Paralelamente al desarrollo de su proyecto post-doctoral, el Dr. Luque fue premiado con un proyecto multidisciplinar de innovación en investigación (IRPPF) como investigador principal para el estudio de la viabilidad económica, medioambiental y química en la producción del biodiesel (2006-2007). Sus contribuciones científicas más relevantes se han centrado en la síntesis y caracterización de nuevos (nano)materiales y sus aplicaciones en catálisis ácida (utilizando principalmente materiales mesoporosos ácidos), redox (usando nanopartículas de metales y óxidos metálicos soportadas sobre materiales nanoporosos) y en la preparación de biocombustibles (e.j. biodiesel y biocombustibles que integran la glicerina en su estructura). Pese a su juventud, el solicitante posee más de 45 artículos publicados en revistas de elevado índice de impacto (>4.5) como son 2 Chem. Soc. Rev., 1 Angew. Chem., 3 Chem. Commun., 2 Chem. Eur. J., 10 Green Chem., 2 J. Catal., 1 Appl. Catal. B (más de la mitad como autor principal (23) y 5 más como primer autor), publicados entre 2005 y 2009, acumulando más de 150 citas. Además, el solicitante es co-autor de 8 capítulos de libro y 2 patentes, y posee 5 artículos más enviados y 10 en preparación. El Dr. Luque es actualmente el editor del libro sobre biocombustibles "Handbook of biofuels: Processes and Technologies" que será publicado por la editorial Woodhead Publishing en 2010. El índice h del solicitante es de 9, con una media de 5 citas por artículo. También cabe destacar su participación en más de 10 proyectos nacionales e internacionales, formando parte en la actualidad del Proyecto Europeo SUSTOIL sobre biorefinerías y biocombustibles del Séptimo Programa Marco. Asimismo, ha presentado sus resultados en más de 45 congresos internacionales, incluyendo 8 presentaciones orales, 2 charlas invitadas y una ponencia invitada en un curso de verano sobre biocombustibles. El solicitante es revisor científico habitual de las revistas de la RSC, Elsevier, ACS, Springer y Taylor & Francis y habiendo revisado más de 70 artículos en el periodo 2007-2008, incluyendo la revisión de dos libros: Catalysis de Gadi Rothenberg, con un artículo publicado en la revista Chemistry World (Julio 2008) y The measurement of Lewis Basicities and Affinities para Grenoble Sciences. Como reconocimiento a los méritos contraídos en su breve pero intensa carrera investigadora y docente, su biografía se encuentra recogida en la edición 2009 de Who is Who in the World.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: POYATOS LORENZO, MACARENA

Referencia: RYC-2009-04022

Area: Química

Correo electrónico: poyatosd@qio.uji.es

Título:

Preparación de reciclables para procesos de formación de enlaces C-C, C-N y C-O

Resumen de la Memoria:

El objetivo principal de esta línea de investigación es la preparación de catalizadores soportados en matrices sólidas para procesos de activación C-H que impliquen la formación de enlaces C-C, C-N y C-O. Estas transformaciones constituyen la base sintética para la obtención de un gran número de compuestos orgánicos con aplicaciones farmacéuticas, por lo que considero que esta línea puede dar lugar no sólo a publicaciones importantes, sino también a patentes que faciliten la transferencia tecnológica entre centros de investigación públicos y empresas. Se emplearán catalizadores para procesos de tipo *hydrogen-borrowing*, (HB). El funcionamiento de estos catalizadores se basa en su papel como mediadores en la transferencia de dos átomos de hidrógeno, entre una sustancia que actúa como reductora y una molécula que se hidrogena. Teniendo en cuenta esta idea básica, la línea de investigación se desarrollará en dos fases: i) Fase I: Desarrollo de catalizadores para procesos de formación de enlaces C-C, C-N y C-O por mecanismos de tipo HB. Exigiremos al catalizador elevada actividad en condiciones de reacción suaves y en ausencia de aditivos, lo cual facilitará su funcionamiento una vez esté heterogeneizado (Fase II). Inicialmente emplearemos hidruros de Cp*Ir(III) y (areno)Ru(II), con ligandos básicos escogidos de una amplia librería de ligandos obtenidos durante mi carrera investigadora. ii) Fase II: Preparación de catalizadores heterogéneos basados en compuestos metálicos formando parte integral de la estructura de materiales híbridos orgánicos-inorgánicos mesoporosos. La heterogeneización se realizará a través de enlaces covalentes, por condensación hidrolítica de restos silano incorporados en el compuesto metálico. Una vez comprobada la heterogeneización, se procederá a su estudio en catálisis. Se realizarán también estudios de reciclabilidad de los catalizadores heterogeneizados.

Resumen del Curriculum Vitae:

Realicé mi doctorado en el departamento de Química Inorgánica y Orgánica de la Universidad Jaume I de Castellón, bajo la dirección del Prof. Eduardo Peris. Mi tesis doctoral, titulada "Diseño de catalizadores homogéneos con ligandos carbeno N-heterocíclico bidentado y pinza. Estudio de sus propiedades y aplicaciones catalíticas", con mención europea, obtuvo la calificación de Apto Cum Laude y fue galardonada con el premio extraordinario de doctorado. Durante mi Tesis Doctoral trabajé en el diseño, síntesis y coordinación de ligandos del tipo carbeno N-heterocíclico (NHC), así como en el estudio de las propiedades catalíticas de los compuestos metálicos obtenidos. En este tiempo, trabajé en el diseño de nuevos ligandos NHC capaces de coordinar en forma quelato y en desarrollo de nuevas estrategias de metalación de los mismos. Fruto del trabajo realizado en este periodo (oct. 01-feb. 05), publiqué nueve trabajos directamente relacionados con mi Tesis Doctoral, todos estos publicados en revistas de ámbito internacional y de elevado índice de impacto. Durante este periodo realicé tres estancias predoctorales en centros de reconocido prestigio: 1) Universidad Rovira i Virgili de Tarragona, bajo la dirección de la Prof. Carmen Claver y la Dra. Elena Fernández; 2) Universidad de Yale, bajo la dirección del Prof. Robert Crabtree y 3) Universidad Louis Pasteur, bajo la dirección del Prof. Lutz Gade. He realizado dos estancias postdoctorales en centros de reconocido prestigio: 1) Universidad Louis Pasteur de Estrasburgo (10 meses), bajo la dirección del Prof. Lutz H. Gade y el Dr. Stephane Bellemin; 2) Universidad de Yale, bajo la dirección del Prof. Robert H. Crabtree. Esta última estancia fue financiada por una beca dentro del programa de becas postdoctorales del Ministerio de Educación y Ciencia. En mi primera estancia post-doctoral trabajé en la síntesis de nuevos ligandos basados en una unidad oxazolona quiral y su coordinación a diferentes metales de transición. Durante mi estancia en Estados Unidos participé en diferentes proyectos de investigación. El primero de estos proyectos tenía como objetivo el diseño de compuestos orgánicos para su empleo como posibles materiales para el almacenamiento de hidrógeno. En el segundo de los proyectos, trabajé en la síntesis y coordinación de un nuevo ligandos NHC plano. En estos cerca de tres años, he publicado un total de seis trabajos, lo que da una idea de mi productividad durante ese tiempo. La labor investigadora realizada hasta ese momento me permitió la obtención de un contrato del subprograma Juan de la Cierva, del que disfruté desde el 1 de febrero de 2008. Este contrato me ha permitido compaginar mi labor investigadora con la actividad docente. Desde mi incorporación he publicado tres artículos en las revistas Chemistry A European Journal (2) y Chemical Reviews (1). En la actualidad estoy desarrollando como investigadora principal un proyecto financiado por la Generalitat Valenciana y la Fundación Bancaixa-UJI. Las publicaciones derivadas de mi trabajo durante estos años han recibido más de 600 citas y mi índice "h" es 14 (fuente ISI web of Science consultada el 16 de febrero de 2009), lo que da una idea de la repercusión de mi actividad investigadora. Poseo la evaluación positiva para las figuras de Profesor Ayudante Doctor, Contratado Doctor y Profesor de Universidad Privada por parte de la ANECA.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: POATER TEIXIDOR, ALBERT

Referencia: RYC-2009-05226

Area: Química

Correo electrónico: al1eric1111@hotmail.com

Título:

Simulaciones con Dinámica Molecular Ab Initio de la metátesis de olefinas para el Diseño y Desarrollo de nuevos Catalizadores de Rutenio

Resumen de la Memoria:

Diversos estudios en mecánica cuántica han sido realizados para racionalizar el mecanismo de metátesis de olefinas promovida por catalizadores de rutenio. Sea como sea, con la única excepción de un estudio viejo de un sistema muy simplificado, todos los resultados computacionales hasta la fecha han sido realizados con técnicas estáticas. Aunque muy útiles, estos estudios no han sido capaces de captar los efectos derivados del comportamiento dinámico de estos sistemas, lo cual limita nuestro conocimiento de esta importante reacción. Este proyecto está enfocado en una simulación de dinámica molecular ab initio de metátesis de olefinas catalizada por rutenio. Tomando ventaja del paquete CP2K para hacer simulaciones de dinámica molecular ab initio, la caracterización dinámica investigará el camino de reacción de la reacción de la metátesis desde los reactivos hasta los productos. A partir de las simulaciones se reconstruirán las superficies de energía libre conectando los reactivos al intermedio clave metalociclobutano de rutenio y finalmente a los productos. Además, se harán también simulaciones para clarificar los caminos de isomerización que conectan diferentes caminos de reacción correspondientes a diferentes isómeros geométricos del catalizador, y que son apodados como caminos de reacción "side" o "bottom". Dentro de la dinámica molecular, la metadinámica y el muestreo del camino de reacción serán las utilidades escogidas ya que son los enfoques metodológicos más prometedores para investigar la reacción. Se contará con la colaboración del Prof. L. Cavallo (University of Salerno). Cuando se consigan los objetivos fijados arriba, un proyecto aún más ambicioso se planteará para aplicar los conocimientos adquiridos en la primera parte para el estudio de sistemas moleculares complejos que estáticamente no estén bien descritos, requiriendo el papel concertado de tres unidades en reacciones catalíticas. El primer estudio clave será estudiar el papel del contraión en catalizadores de oro involucrados en catálisis de reacciones con olefinas, que se llevará a cabo con la colaboración del Prof. F. D. Toste (UC Berkeley). El éxito de esta parte radicará en la comprensión de estudios existentes llevados a cabo estáticamente con el clásico DFT. Por otra parte se abordará la polimerización de epóxidos que conduce a poliéteres estereoregulares y epóxidos enantiopuros con la colaboración del Prof. G. W. Coates (Cornell University).

Resumen del Curriculum Vitae:

La licenciatura en química termina al final del primer cuatrimestre de 2001, 3 años y medio después de su inicio, hito en la Universitat de Girona. Mi parte doctoral inicial, un año, tuvo carácter totalmente experimental en química inorgánica bajo la supervisión del Prof. Antoni Llobet del prestigioso ICIQ, carácter que se reconvirtió en gran parte en teórico gracias a una beca FPU del MEC con la dirección de los Prof. Miquel Duran y Prof. Miquel Solà, culminándose el doctorado en abril de 2006. Durante el doctorado mi actividad investigadora se centró inicialmente en la síntesis y caracterización de compuestos de rutenio, así como su aplicación en catálisis. A continuación se abordó el estudio teórico de estos sistemas catalíticos y al mismo anticancerígenos, y abriendo la principal línea de investigación de la tesis, activación de O₂ y enlaces C-H y C-C aromáticos mediante complejos macrocíclicos de cobre. Mi formación científica se vio ampliada en centros de prestigio internacional con estancias en la Pontificia Católica Universidad de Santiago de Chile con el Prof. A. Toro-Labbé (1 mes) para el conocimientos de clusters; con la Prof. Odile Eisenstein en Montpellier (4 meses) me inicié con catalizadores de Schrock válidos para la metátesis de olefinas o en el Joint Research Centre de Ispra con la Dra. A. Gallegos (4 meses), donde repetí ya como postdoc con estudios en QSAR y también en la aplicación medicinal de compuestos nanoagujas de carbono como transportadores de partículas. Paralelamente mi ambición multidisciplinar me permitió licenciarme en Economía y también en ADE, aparte de culminar un máster/DEA en Economía y Empresa en la UdG. Toda esta formación me ha permitido gestionar mejor los recursos, así como optimizar la coordinación en los proyectos. En enero del 2007 inicié el postdoc actual con el Prof. Luigi Cavallo en la Università di Salerno con la beca postdoctoral del MEC, y ahora dispongo de la Beatriu de Pinós. La temática principal gira entorno a la metátesis de olefinas catalizada por los conocidos compuestos de Grubbs que la valieron el Premio Nobel en 2005. El estudio empezó con los programas de mecánica cuántica clásicos, requiriendo luego la dinámica molecular para describir la realidad dinámica. Soy coautor de 30 trabajos de investigación publicados en revistas internacionales de alto índice de impacto en química general y específica (1 Angew. Chem. Int. Ed., 3 J. Am. Chem. Soc., 1 Coord. Chem. Rev., 3 Chem. Eur. J., 1 J. Comput. Chem., 1 J. Phys. Chem. B, 7 Inorg. Chem., 1 Organometallics, 2 Dalton Trans., 3 Eur. J. Inorg. Chem., 1 Chem. Phys. Lett., 1 Regul. Toxicol. Pharmacol., 1 IDRUGS, 1 Tour. Econ.) y 2 capítulos de libro en NATO ASI Science Series book de Springer. Hay otros artículos enviados (2 J. Am. Chem. Soc., 1 Inorg. Chem.) y en preparación. Hay que destacar que soy primer autor en 16 y principal autor en 8 publicaciones, y también que sido referee en una decena de ocasiones. La asistencia a una treintena de congresos, la mayoría internacionales, ha dado lugar a 15 comunicaciones orales y 17 pósters, destacando la conferencia invitada en la escuela NATO de metátesis de olefinas del 2008 en Bucarest. He participado en 14 proyectos, destacando los dos más recientes, uno con el Mare Nostrum y otro europeo del FP7. He sido acreditado como Profesor Colaborador y Lector por la Generalitat de Catalunya, gracias a los méritos científicos y a los 24 créditos impartidos en docencia durante el doctorado.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: DÍEZ GONZÁLEZ, SILVIA

Referencia: RYC-2009-04322

Area: Química

Correo electrónico: sdiez@iciq.es

Título:

Catálisis Funcional con Cobre en Química Orgánica: Un Enfoque Multidisciplinar

Resumen de la Memoria:

Los retos medioambientales a los que se enfrenta nuestra sociedad requieren procesos de producción más limpios. Un prejuicio general atribuye a la química la mayoría de los problemas de contaminación, cuando en realidad las ciencias químicas pueden proporcionar las mejores soluciones en estos temas cruciales. Una de las formas más evidentes para el desarrollo de procesos más eficientes es el uso de catalizadores. Un catalizador contribuye a que una determinada reacción química se produzca con mayor rapidez y en condiciones más suaves, lo que conlleva una innegable menor necesidad de energía. A pesar de la importancia de metales como el platino, o el níquel en la química moderna, estamos aún muy lejos de la eficiencia de los catalizadores de la Naturaleza: los enzimas. En este proyecto de investigación, llevaremos a cabo la preparación y aplicación en catálisis de nuevos catalizadores metálicos bien definidos, con una atención particular en el cobre como centro de reacción. Este es un campo atractivo de investigación ya que el cobre es un metal no tóxico y barato. A pesar del reciente resurgir de la catálisis con cobre, los sistemas catalíticos bien definidos son aún sorprendentemente escasos y sus aplicaciones potenciales en muchas reacciones orgánicas siguen inexploradas. Prepararemos una librería de catalizadores con diversas familias de catalizadores y sales de cobre que será objeto de estudios estructurales y catalíticos. Nuestros esfuerzos se centrarán principalmente (pero no se limitarán) en reacciones de cicloadiciones dipolares, acoplamiento cruzado y funcionalización mediante procesos de activación de enlaces C-H. Estas transformaciones han sido elegidas por su gran número de aplicaciones potenciales en química orgánica. Serán investigadas cuestiones esenciales como el control de la regio- y estereoselectividad de las reacciones, respetando los criterios actuales de sostenibilidad. Los estudios mecanísticos serán esenciales en este proyecto, y utilizaremos todas las técnicas espectroscópicas, cinéticas y computacionales disponibles, junto con la identificación y aislamiento de intermedios de reacción relevantes, usualmente muy inestables.

Resumen del Curriculum Vitae:

Tras efectuar mi último año de carrera en la Université Paris-Sud 11 (Francia) como estudiante Erasmus, permanecí en este centro para realizar una tesis doctoral gracias a la financiación del Gobierno Vasco (2000-2004). El tema de estudio fue la preparación de análogos de esteroides con un átomo de silicio en posición cuaternaria. Tras la lectura, me incorporé como post-doctor al grupo de investigación del profesor Steven P. Nolan en la University of New Orleans (USA). Ahí mi trabajo estuvo mucho más centrado en la química organometálica y concretamente, en las aplicaciones catalíticas de diferentes complejos metálicos con carbenos N-heterocíclicos (2004-2006). Realicé diversos proyectos con complejos de níquel, oro o rutenio, pero mi trabajo acabó centrándose en la química del cobre. Tras integrar la línea de investigación existente sobre reacciones de hidrosililación, pronto se me dio la oportunidad de gestionarla de manera independiente. No sólo amplí las aplicaciones de los complejos existentes en el laboratorio, sino que desarrollé una nueva familia de catalizadores. En 2006, el profesor Nolan fue nombrado Group Leader en el Instituto Catalán de Investigación Química (ICIQ), Tarragona. En ese momento y como reconocimiento a mi trabajo, fui ascendida a Coordinadora Científica de Grupo. Desde entonces, mi grado de implicación y de responsabilidad ha llevado de manera natural a mi condición de *corresponding author* en mis publicaciones. Se puede decir que mis primeros pasos en investigación han sido prolíficos. En total, cuento con 28 publicaciones en revistas internacionales de prestigio (3 *Angew. Chem., Int. Ed.*, 1 *Chem. Commun.*, 3 *Chem.-Eur. J.*, 2 *J. Org. Chem.*, 2 *Organometallics*), siendo el primer autor en 18 de ellas y el *corresponding author* en 10. Mi trabajo se ha visto además recompensado con 17 comunicaciones (10 orales y 7 pósteres) en conferencias internacionales y una patente. También me gustaría señalar que durante dos años, he dirigido con éxito una colaboración industrial con BayerCropScience (Alemania) sobre reacciones de acoplamiento catalizadas por paladio. Me gustaría recalcar que he recibido personalmente varias invitaciones de publicación. Así, he contribuido con un capítulo a un libro editado por Wiley-VCH escrito por una selección de jóvenes investigadores europeos. Además, en estos momentos estoy editando un libro sobre carbenos N-heterocíclicos en una nueva colección lanzada por la Royal Society of Chemistry. Desde principios de año, he integrado el grupo de investigación del profesor Feliu Maseras, también en el ICIQ. Este movimiento hacia la química teórica me está permitiendo adquirir conocimientos en este campo que se ha convertido en esencial para la catálisis, mi principal área de interés.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: BAREA MARTÍNEZ, ELISA MARÍA

Referencia: RYC-2009-04255

Area: Química

Correo electrónico: ebaream@ugr.es

Título:

BIONANOMOFs: REDES METALORGÁNICAS NANOESTRUCTURADAS CON APLICACIONES BIOMÉDICAS Y MEDIOAMBIENTALES.

Resumen de la Memoria:

Las redes metalorgánicas abiertas (MOFs) son una nueva clase de materiales cristalinos sintéticos constituidos por iones metálicos enlazados a espaciadores orgánicos, de manera que se genere una red porosa. En los últimos diez años, este campo de investigación ha experimentado una apreciable evolución como consecuencia del empleo de los MOFs en procesos de separación, adsorción de gases, sensores, catálisis heterogénea y aplicaciones biológicas. Los MOFs poseen algunas características que mejoran las de los materiales microporosos convencionales (ej. zeolitas y carbones activos), tales como: i) estructuras porosas flexibles y bien ordenadas que muestran comportamientos dinámicos en respuesta a moléculas huésped; ii) el carácter funcionalizable de las superficies de los canales, lo que permite modular sus propiedades de reconocimiento molecular y de catálisis selectiva; y iii) un esqueleto estructural que, al igual que en sólidos densos, es responsable de propiedades físicas como magnetismo, conductividad y características ópticas. En este contexto, la línea de investigación principal del candidato consiste en el diseño, síntesis, caracterización estructural y estudio de las propiedades físico-químicas de nuevos polímeros metalorgánicos macroscópicos (MOFs) y nanoscópicos (NMOFs) con potenciales aplicaciones biomédicas y medioambientales. La candidata está especialmente interesada en el potencial uso de estos sistemas para: i) la liberación controlada de moléculas de interés biomédico (ej. monóxido de nitrógeno, monóxido de carbono y fármacos); ii) la captura y descomposición fotocatalítica de compuestos volátiles nocivos (ej. amoníaco, sulfuro de hidrógeno, sulfuro de carbonilo, sulfuro de dietilo, benceno, etc.); y iii) la integración de NMOFs en filtros de aire y tejidos protectores. En resumen, los desafíos que afronta esta línea de investigación son lograr: i) la síntesis de MOFs; ii) el escalado de dichos materiales a tamaño nanoscópico (NMOFs); iii) el estudio de la variación de sus propiedades físico-químicas con el estado de agregación; y iv) conseguir la optimización de sus propiedades como receptores/liberadores de moléculas de interés biológico y descontaminantes medioambientales. Para ello, se prestará un especial interés a la modulación de la funcionalización de su superficie porosa mediante la elección adecuada de los iones metálicos, los espaciadores orgánicos, las condiciones de reacción y las modificaciones post-sintéticas.

Resumen del Curriculum Vitae:

Licenciada en Ciencias Químicas por la Universidad de Granada (2001). Realicé mi Tesis Doctoral con una Beca de Formación de Profesorado Universitario (FPU) en el Departamento de Química Inorgánica de dicha Universidad y obtuve el grado de Doctor (sobresaliente cum laude, Mención Europea) en diciembre de 2004. Durante mi Tesis Doctoral, investigué sobre el diseño, síntesis y caracterización de las propiedades físico-químicas de compuestos de coordinación polinucleares discretos y extendidos. Dicho período de formación se complementó con las estancias en los grupos de los Profesores B. Lippert (Universidad de Dortmund, Alemania) y N. Masciocchi (Universidad de Insubria, Italia). Con éste último, hice una estancia postdoctoral (2005), enmarcada en un proyecto de acción integrada Hispano-Italiana, dedicada a la síntesis y caracterización estructural de polímeros de coordinación porosos (PCPs) con potencial aplicación en el almacenamiento y la purificación del hidrógeno. A continuación, obtuve una beca postdoctoral del Ministerio de Educación y Ciencia (MEC) (2006-2008) para llevar a cabo estudios sobre la síntesis, caracterización estructural y estudio de las propiedades físico-químicas de clusters organometálicos, en el grupo del Prof. G. D'Alfonso (Universidad de Milán, Italia). Desde el 1 de enero de 2008, disfruto de un Contrato de Incorporación de Doctores de la Universidad de Granada y desarrollo mi labor investigadora en el Departamento de Química Inorgánica estudiando metodologías para la modificación post-sintética de redes metalorgánicas abiertas con el fin de optimizar sus propiedades catalíticas y adsorbentes. Durante mi carrera, he participado en trece proyectos de investigación financiados por el MEC (Plan Nacional I+D y Acciones Integradas), la Unión Europea (Acciones COST, Large Scale Integrating Project FP7), el Ministerio Italiano y la Junta de Andalucía. Los resultados de mi actividad científica se han visto reflejados en un total de dieciocho publicaciones en revistas de reconocido prestigio internacional, tales como Journal of the American Chemical Society (2), Chemistry: A European Journal (2), Journal of Materials Chemistry (1), Chemistry of Materials (2), Inorganic Chemistry (6), Dalton Transactions (2), etc. Además, debo destacar el libro "Interés Medioambiental del Almacenaje de Hidrógeno en Medios de Automoción" que fue galardonado con el Premio Carrefour de Medioambiente 2005. Asimismo, soy una de las inventoras de una patente internacional que se ha extendido a Europa y a los EEUU y que está siendo explotada por SIAD (Società Italiana Acetilene & Derivati). Actualmente, estoy dirigiendo dos Tesis Doctorales y he dirigido dos trabajos de fin de carrera. He elaborado material docente que ha sido publicado en la revista Journal Chemical Education y he participado en un Proyecto de Innovación Docente. En marzo de 2005, obtuve la evaluación positiva de la ANECA para ser contratada como "Profesor Ayudante Doctor". He sido ponente y ponente invitada en distintas universidades y reuniones científicas nacionales e internacionales. Finalmente, mi trayectoria académica ha sido premiada con el Primer Premio Nacional de Fin de Carrera de Educación Universitaria en los Estudios de Química del MEC y el Premio Carrefour de Medioambiente 2005.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: GODARD , CYRIL

Referencia: RYC-2009-04248

Area: Química

Correo electrónico: cyril.godard@urv.cat

Título:

Nuevos catalizadores de hierro para la síntesis de aminas y alcoholes quirales.

Resumen de la Memoria:

Actualmente en la mayoría de procesos químicos se requiere la utilización de catalizador. Por ello la eficiencia y la baja toxicidad del catalizador son clave para lograr procesos sostenibles de bajo impacto medioambiental. La principal línea de investigación que se presenta en este proyecto está orientada al diseño y desarrollo de catalizadores novedosos y eficientes basados en metales de transición. Dicha línea de investigación es altamente interdisciplinaria e implica las áreas de química organometálica, catálisis homogénea, nanocatálisis y catálisis asimétrica. Un objetivo inicial de este proyecto es la optimización de sistemas catalíticos quirales basados en hierro para producir compuestos enantioméricamente puros mediante procedimientos respetuosos con el medio ambiente. Para la consecución de este objetivo general se plantean nuevas estrategias como el uso de construcciones quirales para mejorar la enantioselectividad o el uso de ligandos quirales solubles y estables en medio acuoso. En el área de la catálisis, el conocimiento de los mecanismos implicados es de una importancia crítica para el diseño de catalizadores nuevos y más eficientes. Por consiguiente, se realizarán estudios mecanísticos con técnicas específicas de Resonancia Magnética Nuclear como, por ejemplo, métodos de Alta Presión o de Polarización Inducida por Para-Hidrógeno y de espectrometría de masas electrospray. Tales métodos permitirán la detección y caracterización de intermedios clave aun cuando estén presentes en bajas concentraciones. Además harán posible un estudio del comportamiento de estas especies bajo condiciones de reacción. Cuando sea necesario se aplicarán otras técnicas basadas en estudios cinéticos y en experimentos de marcaje con deuterio. Como una estrategia alternativa a la utilización de catalizadores moleculares, se explorará el uso de catalizadores basados en nanopartículas metálicas, cuya potencialidad se deriva de su particular estructura electrónica y de su gran área superficial, combinando las ventajas de las catálisis homogénea y heterogénea. Se llevarán a cabo estudios mecanísticos sobre la formación del nanocatalizador y sobre las interacciones superficie-ligando-sustratos durante los procesos catalíticos. Además, se explorará el potencial de estos catalizadores en reacciones que actualmente no son catalizadas por sistemas moleculares como la reducción de arenos.

Resumen del Curriculum Vitae:

My name is Cyril Godard and I was born in Saint-Rémy, France, the 14th of May 1974. I completed my undergraduate studies at the Université de Bourgogne, Dijon, in 1998. In 1999, I completed a Master in Research in Toulouse during which I performed a 6 months experimental work on DFT studies of carbomer molecules and their preparation (Chem. Commun., 2000, 1833; Chem.-A Eur. J. 2001, 7, 1165; New. J. Chem. 2001, 25, 572). In 1999, I started a Ph-D entitled ζ Photochemical substitution and bond activation reactions at cyclopentadienyl rhodium. Synthesis and NMR studies ζ at the University of York, UK, under the supervision of Prof. Simon B. Duckett and Prof. Robin N. Perutz. (Chem. Commun. 2002, 2836 and 2003, 2332; Dalton Trans. 2004, 3218). I obtained the title of Doctor of Philosophy in Chemistry in July 2004. In 2002, I had started a post-doctoral project based on mechanistic study using modern NMR techniques entitled ζ Para-Hydrogen enhanced NMR methods for the study of hydroformylation catalysts ζ in the group of Prof. Simon B. Duckett (Chem. Commun. 2004, 1826; Dalton Trans. 2004, 2601; J. Am. Chem. Soc. 2005, 127, 4994; Dalton Trans. 2006, 3350; Eur. J. Inorg. Chem. 2006, 1803; Dalton Trans. 2008, 4270 Magn. Res. Chem. 2008, 46, S107; Dalton Trans. 2009 (in press)). In 2005, I started a new post-doctoral project based on asymmetric catalysis at the Universitat Rovira i Virgili in Tarragona, Spain, in the group of Prof. Carmen Claver, within the framework of an european network. This project dealt with the study of carbonylation reactions catalysed by palladium catalysts (Helv. Chim. Acta, 2006, 89, 1610; Dalton Trans. 2007, 5524; Eur. J. Inorg. Chem., 2007, 2582; Eur. J. Inorg. Chem., 2008, 4625; Dalton Trans. 2008, 853; Chapter in Modern Carbonylation Methods, Ed. L. Kollar; Chapter in Catalytic Asymmetric Synthesis, Ed. I. Ojima in press). In 2006, I worked on the synthesis of ζ salen ζ type ligands as post-doctoral researcher in a PETRI project aimed at developing useful catalysts for a process that is currently used on an industrial scale by REPSOL YPF. In 2007, I started to work on the preparation of metallic nanoparticles and their use as catalysts in various catalytic processes as ζ Juan de la Cierva ζ researcher. Two articles concerning projects in collaboration with other research groups were recently accepted for publications (Eur. J. Org. Chem. 2009, DOI: 10.1002/ejoc.200801093 and Organometallics, 2009, accepted for publication). I am co-supervising a Ph-D project started in 2007 entitled ζ Asymmetric catalysis using ligands derived from carbohydrates. Application in C-C bond formation reactions ζ that is being completed by Ms. Angelica Balanta Castillo. This work led so far to the publication of a communication (Chem. Commun. 2008, 6197). I am currently co-authors of 22 publications in internationally recognised journals, and of 2 book chapters. Several other publications are currently submitted or in preparation. During my career, I have been involved in 11 research projects, including 3 that were funded by international industries.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2009

Nombre: LAVANDERA GARCIA, IVAN

Referencia: RYC-2009-04831

Area: Química

Correo electrónico: lavanderaivan@uniovi.es

Título:

Empleo de oxidoreductasas y deshalogenasas aplicadas a la síntesis de derivados de alto valor añadido

Resumen de la Memoria:

La Biotatálisis es una tecnología que en los últimos años ha ido acrecentando su importancia en cuanto a su aplicabilidad industrial para la obtención de productos farmacéuticos/químicos mediante el uso de procesos altamente quimio-, regio- y enantioselectivos, ya que normalmente tienen lugar utilizando condiciones suaves de reacción y no agresivas con el medio ambiente utilizando enzimas, por lo que se la puede encuadrar dentro de la recientemente denominada Química Verde o Química Sostenible. Así, en los sectores de la química fina y de la industria farmacéutica son cada vez más los procesos en los que al menos una de las etapas hace uso de biocatalizadores, puesto que es especialmente interesante la obtención de compuestos quirales con elevada pureza óptica. Dentro de esta disciplina se encuadra el proyecto que se pretende desarrollar durante estos cinco años, el cual consiste en la aplicación de nuevos tipos de biocatalizadores para sintetizar eficaz y selectivamente compuestos de alto interés biológico. Así, mediante el uso de oxidoreductasas como son las alcohol deshidrogenasas se obtendrán diversos intermedios de interés de manera enantio pura a través de procesos de bioreducción de cetonas o de resoluciones cinéticas mediante oxidación selectiva de mezclas racémicas de alcoholes secundarios. Se hará especial hincapié en la bioreducción de cetonas activadas en posición alfa con diferentes grupos electroattractores, como halógenos, nitrilo, azido, nitro, tiocianato,... puesto que los alcoholes quirales obtenidos presentan una gran importancia en la industria farmacéutica. Se prestará especial atención al reciclado del cofactor, usando siempre que sea posible la metodología del sustrato acoplado, es decir, utilizar otro alcohol o cetona barato como reactivo en exceso (cosustrato) para llevar a cabo la transferencia de hidrógeno. Se optimizará el medio de reacción diseñando la síntesis de nuevos análogos del cofactor además de nuevos líquidos iónicos que actúen a la vez como disolvente de la reacción y cosustrato para poder así minimizar los costes del proceso aumentando la productividad del mismo. Asimismo, se pretende utilizar nuevas enzimas como son las halohidrina deshalogenasas y las transaminasas para sintetizar otros derivados de gran interés de manera enantio pura como son los epóxidos, las aziridinas y las aminas primarias a través de procesos en cascada o procesos tándem. Se desarrollará una nueva metodología (PIKAT) para obtener de manera simultánea compuestos quirales de alto valor biológico como son alcoholes secundarios, sulfóxidos, cetonas quirales y óxidos de aminas, entre otros, partiendo de compuestos fácilmente accesibles y minimizando la cantidad de reactivos necesarios para así maximizar la productividad del proceso. En algunos de estos ejemplos se emplearán las enzimas sobreexpresadas en *E. coli* para poder escalar más fácilmente dichos procesos. Para alcanzar alguno de los objetivos propuestos se colaborará con los Prof. Wolfgang Kroutil (Graz) y Marco W. Fraaije (Groningen). Por último, en otro de los apartados de la investigación se van a realizar estudios de modelización molecular aplicados a la explicación de los resultados experimentales obtenidos así como al diseño de nuevos biocatalizadores que presenten mejores selectividades y estabilidad frente a disolventes orgánicos.

Resumen del Curriculum Vitae:

Realicé mis estudios como Licenciado en Química por la Universidad de Oviedo durante cuatro años (Septiembre 1994-Septiembre 1998), especializándome en el último año de carrera en la rama de Química Orgánica obteniendo una nota media de 2.65. Cuando terminé mi licenciatura, se me presentó la oportunidad de realizar mis estudios de tercer ciclo en dicha Facultad bajo la supervisión del Prof. Vicente Gotor en su prestigioso Grupo de Investigación dedicado a la Biotatálisis. A finales de 1998 realicé un proyecto financiado por la empresa Du Pont Ibérica relacionado con la utilización de enzimas para la obtención de fungicidas, del cual obtuvimos una patente. Posteriormente, en Enero de 1999, comencé a realizar los estudios de tercer ciclo bajo la supervisión de Vicente Gotor y Miguel Ferrero dedicados a la síntesis de nuevos análogos de nucleósidos utilizando lipasas. En Abril de 1999 recibí la beca predoctoral del Principado de Asturias para realizar la Tesis Doctoral y a partir de Enero del 2000 obtuve la Beca del Ministerio de Educación y Ciencia (FPU) para seguir con dichos estudios. A raíz de dicha investigación en Septiembre de 1999 pude presentar mi Tesis de Licenciatura (Sobresaliente). Entre los meses de Abril y Junio de 2002 realicé una estancia predoctoral en Montreal (Canadá) en la McGill University bajo la supervisión del Prof. Romas Kazlauskas para llevar a cabo estudios de modelización molecular. Al final pude presentar y defender mi Tesis Doctoral titulada: Síntesis de Aminonucleósidos. Reacciones Enzimáticas y Evaluación Biológica, el día 18 de Julio de 2003 (Sobresaliente cum laude). En este período pude publicar diversos trabajos entre los que destacan dos *J. Org. Chem.* y un *ChemBioChem*, además de varias publicaciones en congresos. Una vez terminado mi período doctoral, el Prof. Vicente Gotor me ofreció la oportunidad de continuar ligado a su grupo de investigación durante un tiempo a través de diferentes contratos asociados a proyectos de investigación. Así, tuve la oportunidad de publicar un capítulo de libro, un *ChemBioChem* y un *Org. Biomol. Chem.*, entre otros. Finalmente, a partir de Junio del 2005 pude empezar mi estancia post-doctoral en el prestigioso grupo de investigación de los Prof. Wolfgang Kroutil y Kurt Faber en Graz (Austria), para comenzar así un proyecto de investigación auspiciado por la empresa DSM en el que se realizaba la búsqueda de nuevas alcohol deshidrogenasas que fueran estables a altas concentraciones de sustrato y en disolventes orgánicos. De este proyecto obtuve varias publicaciones (entre ellas *Org. Lett.* y *J. Org. Chem.*) así como varias comunicaciones orales y por invitación a congresos internacionales. Asimismo, estuve trabajando en otros proyectos de los cuales obtuve, entre otros, un *Chem. Commun.*, dos *Adv. Synth. Catal.* y un *Org. Lett.* En los últimos meses pude empezar un nuevo proyecto relacionado con el uso de nuevos biocatalizadores como son las transaminasas pudiéndome así familiarizar con su utilización aplicada a fines sintéticos, de estos estudios he podido publicar una patente, un *Angew. Chem.* y un *Adv. Synth. Catal.* En Febrero de 2009 regresé al grupo del Prof. Gotor para comenzar una nueva línea de investigación relacionada con la síntesis de compuestos de interés a través de procesos tándem biocatalizados por oxidoreductasas, publicando ya un *J. Org. Chem.* y un *Green Chem.*



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: RIBAS ARIÑO, JORDI

Referencia: RYC-2009-04954

Area: Química

Correo electrónico: jribasjr@yahoo.es

Título:

Estudio teórico de los mecanismos de la biestabilidad en materiales moleculares

Resumen de la Memoria:

El uso de materiales moleculares en el procesado de información es un campo de investigación importante por su potencial aplicación, por ejemplo, en futuros ordenadores. [1] El concepto fundamental subyacente es la biestabilidad molecular, propiedad que presentan ciertos sistemas moleculares (por ejemplo, sistemas fotocromicos, compuestos con transición de spin, imanes unimoleculares ...) de poder ser observados en dos estados diferentes entre los que puede transicionarse mediante una perturbación externa.[1a] Relacionada con la biestabilidad está la cooperatividad, una propiedad que se cree esencial pero que es poco entendida a nivel molecular, debido a la inexistencia de modelos teóricos que expliquen cómo las interacciones intermoleculares posibilitan la transmisión cooperativa de cambios moleculares a través del cristal. Dicha falta de conocimiento dificulta el diseño racional de materiales moleculares biestables. El objetivo de este proyecto es llevar a cabo por primera vez un estudio teórico-computacional de los mecanismos microscópicos responsables de la biestabilidad, primero a nivel molecular y luego estudiando las interacciones intermoleculares que originan el comportamiento cooperativo de las transiciones de fase. Los sistemas biestables seleccionados para dicho estudio son: a) Biestabilidad debida a la formación/disociación de dímeros tipo pi. Ejemplo: el radical orgánico TTTA [2], TCNE [3] y similares. b) Biestabilidad debida a transferencia de carga junto con la formación/ruptura de un enlace de coordinación. Ejemplo: el cristal molecular (BDTA)₂[M(mnt)₂] [4]. La influencia del metal, M, es muy importante. c) Biestabilidad asociada con una transferencia electrónica intramolecular. Ejemplo: los cristales moleculares basados en el radical spiro-bifenalenilo R-SBP (R= sustituyentes alquílicos) [5]. Estos sistemas adoptan distintos empaquetamientos cristalinos dependiendo de R. Se investigarán las razones por las que sólo algunos de estos sistemas son biestables. d) Biestabilidad en materiales con transición de espín [6], centrándose en los que contienen compuestos de coordinación de Fe(II). [6] Con estos ejemplos se intenta establecer, desde un marco teórico sólido, la comprensión de los mecanismos responsables de la biestabilidad en materiales moleculares.[1] (a) V. Balzani et al. Molecular Devices and Machines. A Journey into the Nanoworld. 2003, Wiley-VCH; (b) O. Kahn et al. Science. 1998, 279, 44[2] W. Fujita et al. Science, 1999, 286, 261[3] J. S. Miller et al.. Acc. Chem. Res. 2007, 40, 189[4] Y. Umezono et al. J. Am. Chem. Soc. 2006, 128, 1084[5] M.E. Itkis et al. Science. 2002, 296, 1443[6] P. Gutlich et al. Top. Curr. Chem. 2004, 233, 1

Resumen del Curriculum Vitae:

Jordi Ribas Ariño, nacido el 27-02-1979D.N.I.: 46358452-CNacionalidad: España Situación profesional actual: Investigador Asociado en el Depto. de Química Teórica de la Ruhr-Universitaet-Bochum.E-mail: jribasjr@yahoo.esTeléfono: 0034607263789Formación académica:- Licenciatura de Química por la Universidad de Barcelona (18/02/2002). Premio Extraordinario de Licenciatura. - Doctor en Química por la Universidad de Barcelona (29/09/2006). Premio Extraordinario de Doctorado.Líneas de investigación actuales:Química Teórica y Computacional, Simulaciones de dinámica molecular ab initio, Mecanoquímica, Organocatálisis, Magnetismo Molecular, Cálculos ab initio de la estructura electrónica de materiales moleculares magnéticos, Nanoestructuras de oro.Participación en proyectos de investigación:1) Estudio teórico de enlaces débiles intermolecularesGrupo de investigación: Reconocimiento Molecular, Depto. de Bioquímica y Biología molecular, Univ. de Barcelona. Duración: 1999-2001Investigador principal: Prof. Modesto Orozco2) Estudio teórico de interacciones magnéticas en cristales moleculares magnéticosGrupo de investigación: Estructura Electrónica, Depto. de Química Física, Univ de Barcelona. Duración: 1/01/2003-31/12/2006Investigador principal: Prof. Juan J. Novoa 3) Cálculos de la anisotropía magnética en Single-Molecule-MagnetsGrupo de investigación: Computational Science Materials, U.S. Naval Research Laboratory, Washington D.C.Duración: 15/09/2004-15/11/2004 y 14/09/2005-14/11/2005Investigador principal: Dr. Mark R. Pederson 4) Estudios teóricos de mecanoquímicaGrupo de Investigación: Depto. de Química Teórica, Ruhr-Universität-Bochum.Duración: 15/01/2007 hasta la actualidadInvestigador principal: Dominik MarxBecas disfrutadas:- Becario Colaborador del Departamento de Química Física de la Universidad de Barcelona. Beca concedida por el Ministerio de Educación, Cultura y Deporte. Desde Enero 2002 hasta Junio 2002.- Beca predoctoral BRD (Beca para la Investigación y Docencia) de la Universidad de Barcelona. Desde Abril 2002 hasta Diciembre 2002.- Beca predoctoral para la Formación de Profesorado Universitario del Ministerio de Educación y Ciencia. Desde Enero 2003 hasta Abril 2006.- Beca postdoctoral Humboldt de la Fundación Humboldt de Alemania para realizar una estancia postdoctoral en la Ruhr-Universität-Bochum. Desde Mayo 2007 hasta Abril 2008.- Beca postdoctoral Beatriu de Pinós de la Generalitat de Catalunya para realizar una estancia postdoctoral en la Ruhr-Universität-Bochum. Desde Mayo 2008 hasta Agosto 2009.Contratos académicos:- Investigador Asociado en el Departamento de Química Teórica de la Ruhr-Universität-Bochum (15/01/2007 - 15/04/2007). Publicaciones:27 artículos publicados en revistas internacionales. Los cinco artículos más relevantes son: - J. Org. Chem. 2002, 67, 7057.- Angew. Chem., Int. Ed. 2004, 116, 577. - Chem. Commun. 2005, 41, 5172. - J. Am. Chem. Soc., 2006, 128, 9497. - Chem. Commun. 2007, 3160.Docencia impartida:He impartido varios cursos prácticos (17.5 créditos en total) en el Departamento de Química Física de la Universidad de Barcelona.Obtención en 2007 de la Acreditación de Profesor Lector por la Agència per la Qualitat del Sistema Universitari de Catalunya.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: LLORET FILLOL, JULIO

Referencia: RYC-2009-05409

Area: Química

Correo electrónico: julio.lloret.fillol@uni-heidelberg.de

Título:

Diseño de catalizadores organometálicos estereoselectivos con ligandos adaptables mediante construcción modular e interacciones secundarias.

Resumen de la Memoria:

La producción actual de compuestos químicos y farmacéuticos se beneficia de los avances en catálisis heterogénea, molecular y bio-catálisis. El desarrollo de nuevos sistemas catalíticos, en particular, la identificación de nuevos mecanismos que permitan transformaciones químicas originales y/o promuevan reacciones catalíticas más selectivas y eficientes, ha sido clasificado como uno de los objetivos científicos-tecnológicos clave en todos los países desarrollados. En el área de la catálisis molecular mediada por metales, el ajuste de las propiedades electrónicas y geométricas del centro metálico permite modular su eficacia. Un avance enorme se ha realizado en el diseño y síntesis de sistemas catalíticos con interacciones ligando-metal primarias. Sin embargo, el papel de las interacciones secundarias (pares iónicos, puentes de hidrógeno) prácticamente inexploradas juegan un papel decisivo en los sistemas biológicos en cuanto a selectividad y eficiencia. El control de estas interacciones es crucial cuando se requiere una estereoselectividad elevada. Diferencias energéticas mínimas entre estados de transición, tan pequeñas como 2 Kcal/mol, conducen a un grado de enantioselectividad muy elevado. El análisis de las interacciones secundarias es un campo activo en la actualidad. Grandes retos quedan pendientes todavía. La propuesta científica del candidato es el desarrollo de ligandos modulares (quirales y aquirales), que incluyan receptores/dadores de puentes de hidrógeno y/o partes iónicas. Esta propiedad permitirá establecer interacciones secundarias con moléculas auxiliares y/o con los sustratos a catalizar. Esta estrategia poco explorada puede proporcionar un ajuste adicional de la situación electrónica y geométrica del centro metálico en los sistemas catalíticos conocidos actualmente. En particular, se propone el desarrollo de nuevos ligandos quirales de fósforo, fósforo-nitrógeno y nitrógeno-nitrógeno para alcanzar estos objetivos. Estos ligandos se utilizarán en combinación principalmente con metales de transición de la primera serie (Fe, Co, Ni, Cu). El estudio de su actividad se analizará en reacciones catalíticas de interés académico e industrial: hidrogenación e hidroformilación asimétrica, reacciones de acoplamiento cruzado C-C y adiciones de nucleófilos a enlaces múltiples. Desde el punto de vista metodológico, se propone estudiar los mecanismos de reacción mediante marcaje isotópico, estudios cinéticos y teóricos. Se profundizará en la comprensión de los principios que gobiernan la inducción quiral en los sistemas sintetizados mediante el diseño racional de ligandos y el modelado computacional de los estados de transición involucrados en la enantioselectividad. Estos estudios sentarán las bases del efecto de las interacciones secundarias en la inducción quiral en los catalizadores sintetizados y ayudarán al desarrollo de futuras generaciones de catalizadores más eficientes.

Resumen del Curriculum Vitae:

Actualmente, Julio Lloret Fillol ocupa una beca Marie Curie IEF en el Instituto de Química Inorgánica de la Universidad de Heidelberg. El candidato ha trabajado desde el año 2001 en 7 centros de investigación de reconocido prestigio internacional de 4 países diferentes (España, Inglaterra, Finlandia y Alemania). Completó su licenciatura en Julio del 2001 después de una estancia de Erasmus de 6 meses en la Universidad de Loughborough (UK) bajo la supervisión del Prof. Dr. Jonathan Parr. La estancia dio lugar a su primera publicación junto con el Prof. Dr. Jonathan Parr y Prof. Dr. Jack Faller (Yale University) (New J. Chem. 2002, 26, 883). Durante el segundo semestre del mismo año, estuvo contratado en el grupo del Prof. Dr. Helmut Werner (Universidad de Würzburg, Germany) donde desarrolló la síntesis de compuestos quirales de rodio(II) con ligandos fosfolano. Los estudios catalíticos llevados a cabo al principio de su doctorado en la Universidad de Valencia en el grupo de C. Dr. Pascual Lahuerta y C. Dr. Julia Pérez Prieto presentaron una excelente enantioselectividad en la transferencia de carbenos a estireno y en la inserción en enlaces C-H. (Organometallics 2004, 23, 1369) En Junio de 2006, defendió su Tesis Doctoral (Programa de Doctorado Europeo) con el título "Síntesis, Aplicaciones Catalíticas y Estudios Teóricos de Compuestos Quirales de Rh(II) con Ligandos Aril o Heteroarilfosfina", obteniendo la máxima calificación. Durante sus estudios de doctorado estableció colaboraciones con otros grupos de investigación. Trabajo con el grupo teórico de C. Dr. Agustí Lledós (Universidad Autónoma de Barcelona), base de la experiencia del candidato en química computacional (Organometallics 2008, 27, 2873). También, visitó la Universidad de Joensuu (Finlandia) supervisado por la Prof. Dr. Pipsa Hirva donde adquirió destreza en el modelado molecular mediante cálculos DFT. Esta colaboración, queda reflejada en las siguientes publicaciones. (Organometallics 2006, 25, 5113; 2007, 26, 4145 y Inorg. Chem. 2007, 46, 2619) Visitó, el grupo del prof. Dr. Lutz H. Gade en la Universidad de Heidelberg desarrollando nuevas fosfinas bi-dentadas quirales y su anclaje a dendrímeros. Después de la defensa de su tesis doctoral estudió dos modos de soporte de catalizadores de di-rodio y el uso de H₂O como disolvente inocuo en reacciones de ciclopropanación asimétrica (M^a Ángeles Úbeda) (Organometallics 2006, 25, 4984; 2007, 26, 4151 y 2008, 27, 856). Estuvo invitado en la Universidad de Tarragona y estableciendo la colaboración con Dr. Jordi J. Carbo y C. Dr. Carles Bó. (Organometallics 2008, 27, 2873) Actualmente trabaja en la Universidad de Heidelberg en el desarrollo de nuevas fosfinas quirales (C2 y C3), su inmovilización en dendrímeros y su aplicación en catálisis asimétrica, además del estudio de mecanismos de reacción fundamentales de química organometálica (V.I.P. Angew. Chem. Int. Ed. 2007, 46, 8426; Angew. Chem. Int. Ed. 2009 febrero Early View; Chem. Eur. J. 2008, 14, 8131; Chem. Eur. J. 2008, 14, 10267. Organometallics 2008, 27, 172, Organometallics 2008, 27, 2518) En resumen, es co-autor de 22 publicaciones en revistas de nivel internacional: 10 Organometallics, 3 Angew. Chem. Int. Ed., 3 Chem. Eur. J., 1 Chem. Comm., 2 Inorg. Chem., 1 Dalton Trans, 1 New J. Chem. y 1 J. Org. Chem. y autor principal en un Inorg. Chem.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2009

Nombre: SANZ MIGUEL, PABLO JOSE

Referencia: RYC-2009-04387

Area: Química

Correo electrónico: pablo.sanz@uni-dortmund.de

Título:

Análogos de oligonucleótidos artificiales ensamblados en columnas de iones metálicos (M-ADN)

Resumen de la Memoria:

Los oligonucleótidos están compuestos básicamente por una columna de azúcar fosfodiéster, a la que las nucleobases se unen sistemáticamente. Es evidente, por la presencia de los grupos fosfato, que las hebras de los nucleótidos tienen carga negativa. La repulsión inherente entre las hebras es compensada en el medio celular por neutralización de carga, con iones metálicos y otras moléculas positivamente cargadas como grupos aminoácidos laterales. El emparejamiento Watson-Crick y el apilamiento entre bases contribuyen a esta estabilización. La relevancia biológica del ADN y su versatilidad estructural son facetas bien conocidas. Esto es por lo que la creación de ADN artificial, con sus nuevas propiedades y aplicaciones ha estado en auge durante los últimos años. La construcción de ADN artificial se ha desarrollado basándose en las dos posibles modificaciones del ADN natural: en la columna azúcar-fosfodiéster y en los pares de bases Watson-Crick. Ejemplos representativos para la modificación en la columna son: ácidos nucleicos peptídicos (PNA), ácidos nucleicos bloqueados (LNA), ácidos nucleicos tero-furanosil (TNA) y ácidos nucleicos 2',5'-enlazados. La modificación en los pares de bases requiere la sustitución de bases naturales por bases no naturales o por moléculas con esquemas nuevos de apareamiento entre bases o metales insertados. En los PNA, la columna fosfodiéster se reemplaza por poliamida, y por ello están privados de su carga negativa. Así, no se observa repulsión cuando el PNA (neutro) se une a su secuencia de ácido nucleico complementaria (negativo), convirtiéndose en un compuesto más estable que su análogo natural. Un mayor incremento en la afinidad puede ser conseguido modificando la columna de tal manera que esté positivamente cargada. Con este fin, propongo crear M-ADN a partir de una aproximación Bioinorgánica en la que la columna natural aniónica azúcar-fosfodiéster del DNA es sustituida formalmente por bloques de construcción catiónicos metal-ligando. Esta forma de crear M-ADN artificial no ha sido nunca llevada a cabo. Es un esfuerzo dirigido al (i) diseño de metalodrogas, (ii) un mejor entendimiento del rol de los metales (de transición) en la vida, y (iii) nuevas y funcionales aplicaciones de los iones de metales de transición en biotecnología. Además, con ligeras modificaciones en su arquitectura, los precursores propuestos de M-ADN pueden ser utilizados como bloques de construcción para polímeros de coordinación monodimensionales con el potencial de ser conductores eléctricos.

Resumen del Curriculum Vitae:

Obtuve el título de Licenciado en Ciencias (Química Inorgánica) en la Universidad de Zaragoza. En 1999 fui seleccionado para continuar mi formación en la Universidad de Dortmund (Alemania), allí llevé a cabo el trabajo experimental de mi Grado de Licenciatura (Tesina o "Diplomarbeit") en el grupo del Prof. Bernhard Lippert, donde me inicié en el campo de la Química Bioinorgánica. Trabajé en la influencia del platino y otros metales de transición en modelos de distintos sistemas biológicos. De mi tesina fueron codirectores el Prof. Luis A. Oro y el Prof. Bernhard Lippert. En 2001 me contrató la Universidad de Dortmund para la realización de mi tesis doctoral, y para llevar a cabo las labores docentes propias del puesto. Durante este periodo profundicé en el estudio del comportamiento y propiedades de los metales de transición en los sistemas biológicos y su reproducción en modelos artificiales para su mejor entendimiento. Especialmente abordé la conversión de citosina en uracilo, y el estudio de modelos estructurales dominados por enlaces de hidrógeno. Defendí mi tesis en junio de 2005, obteniendo la máxima puntuación. He disfrutado de poder trabajar durante casi una década con uno de los mejores científicos en Bioinorgánica a nivel mundial, lo que me ha supuesto y supone un aprendizaje superior en el conocimiento de métodos, técnicas, estrategias y líneas de investigación, así como numerosos contactos internacionales de gran relevancia. Tras un primer periodo postdoctoral en Dortmund, pertencí al departamento de Química Inorgánica de la Universidad Autónoma de Madrid durante 3 años (UAM). Allí formé parte del grupo de nanoestructuras del Dr. Félix Zamora, gracias al programa "Juan de la Cierva" del Ministerio de Ciencia e Innovación. Durante este periodo trabajé principalmente en el estudio de sistemas y polímeros de coordinación monodimensionales con propiedades conductoras, y dirigiendo una tesis doctoral sobre el mismo tema. En este periodo recibí la acreditación de la ANECA hasta Profesor Contratado Doctor. Tras mi finalización contractual con la UAM, he vuelto como investigador contratado a la Universidad de Dortmund para continuar investigando el rol de los metales de transición en sistemas biológicos. Los resultados de mi trabajo se pueden sintetizar en 24 publicaciones científicas internacionales de alto nivel: Angew. Chem. Int. Ed. (2), Chem. Eur. J. (1), Chem. Commun. (1), Inorg. Chem. (5), J. Inorg. Biochem. (2), Appl. Phys. Lett. (1), Cryst. Eng. Commun. (1), J. Biol. Inorg. Chem. (2), Dalton Trans. (1), Eur. J. Inorg. Chem. (1)... y tres capítulos en libros.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: RICHTER , RALF PETER

Referencia: RYC-2009-04275

Area: Química

Correo electrónico: rrichter@cicbiomagune.es

Título:

Sistemas modelo de recubrimientos pericelulares ricos en carbohidratos

Resumen de la Memoria:

Un gran número de células presentan un recubrimiento pericelular rico en carbohidratos, que juega un papel crucial en la protección de la célula y al mismo tiempo resulta vital en la estructuración y comunicación de la célula con su entorno. Ejemplos importantes de tales estructuras supramoleculares autoorganizadas son las matrices pericelulares ricas en ácido hialurónico - como las que se encuentran alrededor de condrocitos (en el cartílago), oocitos (durante la ovulación) o células endoteliales - y la capa mucosa de las sistemas respiratorio y digestivo. ¿De qué están hechos estos recubrimientos y cómo ejercen su función? Una de las características excepcionales de estos recubrimientos es su autoensamblado dinámico en grandes matrices hidratadas. Mi hipótesis de trabajo es que el nivel de organización supramolecular que resulta del ensamblaje de glicanos y proteínas en redes blandas, hidratadas y de tipo gel, da lugar a nuevas propiedades y funciones que difieren de aquellas que caracterizan a los constituyentes individuales. No obstante, la complejidad de la estructura y la dinámica de la célula viva, y la elevada hidratación de su recubrimiento, dificultan el estudio de los recubrimientos pericelulares en su medio nativo y la determinación de sus estructuras con métodos de alta resolución. Para poder elucidar la interrelación entre la estructura, las propiedades físico-químicas y la función de los recubrimientos pericelulares, me he propuesto desarrollar sistemas modelo in vitro. Estos sistemas están bien definidos, en el sentido de que se puede predecir su composición y su estructura supramolecular. Se construyen sobre soportes sólidos, que reproducen el confinamiento impuesto por la superficie celular. Métodos modernos de nanoestructuración y de biofuncionalización son empleados para crear plataformas por las que se pueden construir sistemas modelo de manera controlada y modulable. Un amplio espectro de técnicas de caracterización in situ (p.e. QCM-D, AFM, RICM, elipsometría, FRAP, espectroscopía IR) se utilizan para caracterizar estos sistemas modelo. Los sistemas modelo que aquí se proponen, permiten realizar experimentos altamente controlados, necesarios para el análisis cuantitativo de las propiedades físico-químicas y de la inter-relación entre estructura y función. En consecuencia, se podrán formular hipótesis que se examinarán a posteriori con ensayos celulares complementarios. Las superficies, que presentan glicanos en un entorno bien definido y de relevancia biológica, servirán como plataforma de detección para la investigación a nivel molecular y celular de interacciones complejas como ocurre comúnmente con las glicanos. En su conjunto, el trabajo comprendido en esta propuesta crea una nueva conexión entre la físico-química, la ciencia de superficies y de materiales, la biofísica y la glicobiología.

Resumen del Curriculum Vitae:

Ralf Richter obtuvo su licenciatura en física en Chalmers / la Universidad de Göteborg (Suecia) en 1999. Después de haber trabajado para una empresa spin-off, completó sus estudios predoctorales en el IECB / la Universidad de Bordeaux I (Francia) en 2004. Allí, trabajó en el grupo de investigación del Prof. A. Brisson en la caracterización físico-química de autoensamblajes biomoleculares: la formación de bicapas lipídicas en superficie y la cristalización en dos dimensiones de las proteínas capaces de unirse a la membrana. Con este trabajo, Ralf se convirtió en un experto reconocido en el campo de las bicapas lipídicas en superficie. Entre 2005 y 2007 Ralf ocupó dos puestos de trabajo, primera con una beca postdoctoral y más tarde como Habilitand (Assist. Prof.) en la Universidad de Heidelberg (Alemania), en el grupo de investigación del Prof. J. Spatz (Departamento de Química Biofísica). Allí dirigió su atención hacia el fenómeno de autoorganización que ocurre en los recubrimientos pericelulares (matrices ricas en polisacáridos que rodean muchas de las células vivas) y otros ensamblajes poliméricos de tipo hidrogel. Recientemente, se ha incorporado como investigador principal en CIC biomaGUNE en Donostia-San Sebastian donde continuará con su trabajo en esta línea de investigación interdisciplinar, que abarca aspectos de la físico-química, la ciencia de superficies y materiales, la biofísica y la biología. Muchos de los procesos del autoorganización supramolecular comentados anteriormente ocurren o hacen uso de sistemas modelo en la interfase sólido-líquido. Durante la última década, Ralf ha adaptado, combinado y aplicado continuamente algunas de las técnicas más modernas de caracterización sensibles a procesos superficiales in situ, tales como microscopía de fuerza atómica (AFM), microbalanza de cristal de cuarzo con medida de disipación (QCM-D), elipsometría, microinterferometría (RICM), así como la técnica de recuperación de la fluorescencia tras el fotoblanqueo (FRAP). En paralelo, ha desarrollado una amplia habilidad en el nanopaternado y la biofuncionalización de superficies. Ralf Richter es el co-autor de 18 publicaciones en revistas con referato, muchas de ellas en revistas con prestigio en su campo (incluyendo JACS, Science, PNAS, Biophysical Journal, Analytical Chemistry y Langmuir), a la vez que un capítulo de libro. Para 9 de las publicaciones, él es el primer o correspondiente autor. Muchas de ellas han sido citadas muchas veces. Desde 2004, Ralf ha supervisado los proyectos de fin de carrera y de corto plazo de numerosos estudiantes. Ha impartido cursos, seminarios y clases prácticas de manera regular, incluyendo cursos de verano internacionales. Ha participado en más de 15 congresos y workshops internacionales con el fin de presentar su trabajo. También es regularmente consultado como referee por diferentes revistas, tales como Analytical Chemistry, Nanoletters, Advanced Materials, Biophysical Journal y Langmuir.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: QUIÑONERO SANTIAGO, DAVID

Referencia: RYC-2009-04853

Area: Química

Correo electrónico: david.quinonero@uib.es

Título:

Diseño y síntesis de receptores de aniones tóxicos frecuentemente presentes en el medio ambiente

Resumen de la Memoria:

En la actualidad, uno de los problemas más importantes que afronta la sociedad es la detección y eliminación o tratamiento de contaminantes presentes en el medio ambiente. Hoy en día la ciencia se encuentra comprometida con el desarrollo e investigación de sistemas de detección y separación de contaminantes, bien sean iones o especies neutras. Es por ello que resulta esencial la química de captación de aniones en el problema de restauración medioambiental. A este respecto, la eliminación de estos aniones del medio representa un gran reto para los químicos. El principal objetivo del trabajo a realizar es la continuación natural de un proyecto anterior (cuyo investigador principal fui yo), financiado por el Govern Balear (referencia PROGECIB-33A), en el que se pretenden diseñar unidades moleculares que interactúen favorablemente con aniones de elevado riesgo para la salud de la población y que provocan un efecto negativo en el medioambiente como, por ejemplo, nitratos, fosfatos, sulfatos, arseniatos, sulfuros, cianuros, etc. Las unidades a considerar serán, por ejemplo, derivados del dianhídrido piromelítico y trianhídrido melítico. Los contactos intermoleculares que se tendrán en cuenta para diseñar la unidad de reconocimiento serán principalmente los enlaces de hidrógeno y las novedosas interacciones anión- π , en cuyo estudio y descubrimiento nuestro grupo de investigación es pionero. Inicialmente, la metodología de la investigación estará basada en cálculos ab initio, principalmente a nivel RI-MP2, SCS-RI-MP2 y CCSD(T), de las unidades moleculares de interacción con aniones. Seguidamente se efectuarán cálculos a nivel DFT y RI-DFT de los receptores moleculares que se hayan diseñado a partir de las unidades moleculares. Estas metodologías han demostrado su gran utilidad en el análisis tanto de las interacciones anión- π como de los enlaces de hidrógeno. Finalmente el proyecto se completará y complementará con un estudio experimental de aquellos receptores previamente diseñados que teóricamente mejor interactúen con los aniones, campo en el que nuestro grupo demuestra una experiencia creciente.

Resumen del Curriculum Vitae:

Licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de las Islas Baleares (UIB) en 1997. Obtuve el grado de licenciatura en diciembre del mismo año y me doctoré en 2001, en la UIB gracias a la dirección de los doctores Pere M. Deyà y Antonio Frontera. Gracias al MECD, realicé mi estancia posdoctoral en Emory University, Atlanta, GA (EE.UU.) desde julio de 2002 hasta junio de 2004 bajo la supervisión del Prof. Keiji Morokuma. De diciembre de 2004 a diciembre de 2007 disfruté de un contrato de investigador doctor al amparo del programa "Juan de la Cierva" en la UIB. Asimismo he sido seleccionado dos veces como uno de los Emerson Center Visiting Fellows en los periodos 2006-2007 y 2008-2009, realizando sendas estancias de 1 mes (agosto de 2006 y mayo de 2008) en el Cherry L. Emerson Center for Scientific Computation de Emory University, colaborando con los Prof. Keiji Morokuma y Jamal Musaev. En 2006 y 2008 se me otorgaron las acreditaciones de la actividad docente e investigadora para la contratación de profesorado universitario en las figuras de "profesor ayudante doctor" y "profesor contratado doctor" por parte de la AQUIB y la ANECA, respectivamente. En la actualidad disfruto de un contrato de investigador doctor en la UIB, con finalización prevista para el 14 de abril de 2009. En total he participado en 9 proyectos de investigación (en 1 como investigador principal) y dispongo de un índice h=18 y de 73 publicaciones (72 artículos en revistas internacionales y 1 capítulo de libro) desde el año 2000 que abarcan diversos campos de la Química (multidisciplinar [Angew., JACS, JCTC, Chemistry, J. Comput. Chem., NJC], orgánica [JOC, OL, T.Lett., EJOC], inorgánica [Inorg. Chem.] y física [ChemPhysChem, JPCB, JPCA, CPL, TCA]) 26 de las cuales de primer autor y 6 como corresponding author.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: PÉREZ LUSTRES, JOSÉ LUIS

Referencia: RYC-2009-04834

Area: Química

Correo electrónico: lustres@chemie.hu-berlin.de

Título:

Espectroscopia óptica y vibracional de banda ancha con resolución temporal de femtosegundos. Aplicación a procesos primarios en fotorreceptores biológicos y sistemas moleculares modelo.

Resumen de la Memoria:

Los fotorreceptores biológicos son proteínas de pequeño tamaño que incorporan un cromóforo. La absorción de luz induce un cambio estructural ultrarrápido en la macromolécula y da lugar al llamado estado señal. Este proceso se conoce como activación y ocurre generalmente en las escalas de tiempos de femto- a picosegundos. La interacción entre el estado señal y un efector inicia la transducción de señal, como paso previo a la respuesta biológica del ser vivo al estímulo luminoso inicial. De lo contrario, el fotorreceptor retorna a su conformación de partida, el estado oscuro, y la activación se repite. Los fotorreceptores controlan una gran variedad de respuestas biológicas fotoinducidas como el ritmo del reloj biológico de insectos y mamíferos o de sensores magnéticos involucrados en la orientación geográfica de aves migratorias (criptocromos); reacciones de plantas y microorganismos a estímulos luminosos (fototropinas y proteínas BLUF: Blue-Light Using FAD); mecanismos de visión y fotosíntesis bacteriana (rodopsinas) y fotomorfogénesis vegetal (fitocromos). El objetivo es la construcción de un equipo de espectroscopia óptica de banda ancha con resolución temporal de femtosegundos para el estudio de procesos de activación de fotorreceptores y sistemas moleculares modelo. El equipo incorpora fuentes de excitación óptica ultrarrápida basadas en amplificadores ópticos paramétricos no-colineales (NOPAs) que brindan acceso a la totalidad del espectro electromagnético visible y UV cercano. La fuente de análisis se obtiene a partir de un super-continuo de luz blanca. Resoluciones espectro-temporales de 2 nm/20 fs, cobertura espectral superior a 20000 cm⁻¹ en la región óptica y precisión fotométrica media de 10-4 (OD), han sido demostradas en numerosas publicaciones. Posteriormente, el equipo será ampliado para la medida transitoria y estacionaria de espectros de resonancia Raman estimulada. Experimentos piloto propios en la Universidad Humboldt de Berlín alcanzan cobertura espectral de 3500 cm⁻¹ con resolución delta nu 20 cm⁻¹ y precisión de 2 cm⁻¹.

Resumen del Curriculum Vitae:

Inicié mi trayectoria científica en el grupo de investigación de los Profs. Manuel Mosquera González y M. Flor Rodríguez Prieto, bajo cuya dirección realicé la Tesis Doctoral sobre procesos de transferencia protónica al disolvente e isomería rotacional (Universidad de Santiago de Compostela, España). Durante este período adquirí experiencia en los campos de espectroscopia de fluorescencia y absorción UV-vis. Hice uso de métodos mecanocuánticos para el estudio de la estructura molecular en los estados fundamental y excitado, así como modelos de solvatación aplicados a equilibrios conformacionales y tautoméricos. Este trabajo fue realizado en el grupo de P. D. Dr. Timothy Clark (Universidad de Erlangen-Nürnberg, Alemania). En 2001 me uní al grupo del Prof. Dr. Nikolaus P. Ernsting (Universidad Humboldt de Berlín, Alemania), donde me especialicé en espectroscopia de femtosegundos de banda ancha, con la cual procedí al estudio de procesos moleculares elementales ultrarrápidos en fase condensada. Allí participé también en el desarrollo de la espectroscopia pump-probe, fundamentalmente en la incorporación de amplificadores ópticos paramétricos como fuentes de excitación y análisis y en la implementación de un sistema rápido de adquisición de datos (1 kHz). Equipos similares fueron instalados en los grupos de investigación de Sanford Ruhman (Universidad Hebrea de Jerusalem, Israel), Thomas Lenzer (Instituto Max-Planck de Química Biofísica de Göttingen, Alemania) y Heinrich Gräner (Universidad Martin-Luther de Halle, Alemania). Formé parte del equipo que construyó del primer sistema de detección de fluorescencia up-conversion de banda ancha, que permite la adquisición de espectros completos de fluorescencia con una resolución temporal de 50 fs y en la actualidad soy responsable de la construcción de un equipo para espectroscopia transitoria Raman estimulada de banda ancha. El potencial de estas técnicas espectroscópicas se detalla posteriormente en la descripción de proyectos y publicaciones más importantes. En estos momentos dirijo mi interés hacia los fotorreceptores de luz azul en el grupo del Prof. Nikolaus P. Ernsting y en cooperación con el Prof. Peter Hegemann (Instituto de Biología de la Universidad Humboldt de Berlín). La DFG (Sociedad Alemana para la investigación) financia este proyecto a través de la iniciativa de excelencia 314 ¿UniCat: Unifying Concepts in Catalysis¿. El objetivo es entender el mecanismo de formación del estado señal en las proteínas BLUF y obtener información sobre su estructura molecular mediante espectroscopia estimulada Raman transitoria. Dos artículos se encuentran en preparación en estos momentos, mientras que el estudio fotofísico previo del cromóforo ha sido publicado recientemente.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: LÓPEZ SERRANO, JOAQUÍN

Referencia: RYC-2009-03876

Area: Química

Correo electrónico: joaquin.lopez@iiq.csic.es

Título:

Estudio del mecanismo de reacciones organometálicas

Resumen de la Memoria:

La línea de investigación principal de este proyecto tiene como finalidad fundamental estudiar el mecanismo de reacciones organometálicas. Para esto nos proponemos implementar dos métodos que, hasta el presente son inexistentes dentro del grupo de Química Organometálica y Catálisis del Instituto de Investigaciones Químicas (centro mixto del CSIC y de la Universidad de Sevilla). De una parte, el estudio del mecanismo (entre otras) de diversas reacciones de hidrogenación empleando para-hidrógeno (p-H₂) y el estudio de reacciones activadas por luz a baja temperatura. La técnica principal para la detección y caracterización de intermedios será la resonancia magnética nuclear (RMN). De otra parte, los estudios experimentales se llevarían a cabo conjuntamente con cálculos teóricos de modelado molecular, basados principalmente en la teoría del funcional de la densidad electrónica (DFT), para contribuir a racionalizar las observaciones experimentales. Aunque el grupo de investigación al que se ha reincorporado el candidato recientemente tiene una amplia experiencia en el estudio de reacciones de hidrogenación, el uso de p-H₂ sería completamente nuevo. Asimismo el candidato se beneficiará de la experiencia adquirida en su etapa posdoctoral para el estudio de las reacciones activadas por luz, incorporándola a su grupo actual. Y en lo que respecta a los cálculos teóricos, hasta el presente el trabajo del grupo de Sevilla es exclusivamente de naturaleza experimental y satisface sus necesidades de cálculos teóricos mediante colaboraciones externas. Los sistemas sobre los que se realizarán los primeros estudios con p-H₂ son complejos de rodio con dos ligandos olefina o un dieno que contengan también ligandos ciclopentadienilo voluminosos (Cp) o ligandos derivados del tris-pirazolilborato (Tp). Estos mismos sistemas, así como complejos análogos de iridio son capaces de promover reacciones de activación C-H. En muchos casos, la etapa previa a la activación de enlaces C-H implica la disociación de un ligando (en este caso una olefina) que puede ser promovida por irradiación con luz ultravioleta o visible. Cuando estos procesos se llevan a cabo a baja temperatura, se pueden detectar intermedios de la reacción de activación C-H (que es un proceso térmico) mediante RMN. Otra línea de investigación que se pretende desarrollar a más largo plazo está relacionada con el estudio de reacciones de formación de hidrógeno catalizadas por metales de transición. En los últimos treinta años se han producido avances en este campo. Así, complejos de rodio similares al catalizador de wilkinson o complejos de iridio análogos al catalizador de Crabtree han sido empleados con éxito en la dehidrogenación catalítica de alquenos. Estas reacciones pueden ser activadas térmicamente o mediante radiación (fotólisis). Por otra parte, complejos similares son capaces de promover la formación de hidrógeno a partir de alcoholes.

Resumen del Curriculum Vitae:

The main research line the candidate will develop in the following years as a Ramon y Cajal Fellow deals with the study of the mechanisms of several Organometallic reactions. In order to do so, the candidate will use the NMR and DFT skills mastered during his postdoctoral period in York. The candidate plans to apply these skills (described in the documents attached) to study hydrogenation reactions using NMR and paraHydrogen, as well as other light activated reactions by means of low temperature photolysis and NMR. The experimental studies will be carried out in parallel with DFT calculations, in order to rationalize the experimental observations. The research group hosting the candidate has a large experience in hydrogenation reactions and organometallic reactivity in general, but the methodology proposed by the candidate, as well as the synergic approach (experimental and theoretical) will be new, partly since the hosting research group requires, at present, external collaborations in order to deal with theoretical studies. The first systems to be studied include bis-alkene RhCp and RhTp (Tp=tris pirazolyborate) complexes. Analogous RhCp systems to those the candidate plan to study in this project, have been studied by means of the paraHydrogen effect. Also, these systems, and Iridium analogues, have been described to activate C-H bonds in reactions that sometimes require previous ligand dissociation. In these studies the candidate plan to carry out low temperature UV-visible irradiation, which will be used as a mean to activate the precursors allowing at the same time the detection of intermediates by NMR. Both the NMR measurements and the DFT calculations will be carried out by the candidate independently or in collaboration with others (Prof. A. Lledós, Barcelona and Prof. Duckett in York, for in situ photochemistry NMR studies and paraHydrogen studies). A longer term project that the candidate will try to develop deals with the study of the mechanism of metal-catalyzed alkane and alcohol dehydrogenation reactions, with the ultimate aim to focus on the metal-catalyzed hydrogen generation. Over the last 30 years, major improvements have been reported on this topic. For example wilkinson-type rhodium complexes and iridium-phosphine species related to the Crabtree's catalyst, have been successfully used in these tasks. These reactions can be activated thermally as well as photochemically. The latter would be the preferred method, as the goal of these researches is the use of sun light to promote catalysis.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2009

Nombre: ANDRADE , FRANCISCO JAVIER

Referencia: RYC-2009-04651

Area: Química

Correo electrónico: francisco.j.andrade@gmail.com

Título:

Descargas eléctricas de corriente continua en gases a presión atmosférica: desarrollo y aplicaciones en síntesis de materiales y biociencias

Resumen de la Memoria:

Si bien los fenómenos en gases parcialmente ionizados ¿plasmas- han jugado un papel fundamental en los avances en ciencia y tecnología, algunas de las formas mas versátiles de estos plasmas (como las descargas luminosas ¿glow discharges, GD- de corriente continua) requieren trabajar a bajas presiones (~1 Torr) o en condiciones que limitan seriamente su aplicación práctica en diversas áreas científicas. Sin embargo, durante mi trabajo en el Laboratory for Spectroscopy en la Universidad de Indiana, he logrado un avance muy importante en esta area mediante el desarrollo de GD a presión atmosférica que presentan propiedades muy atractivas. Cuando la GD es operada en helio, por ejemplo, es posible generar un haz de especies altamente energéticas (iones, átomos metaestables, etc.) a temperatura ambiente. Esto ha permitido, el desarrollo de una nueva fuente de ionización para espectrometría de masas de compuestos orgánicos que logra ionizar directamente sustancias en fase sólida y líquida ¿incluso muestras reales sin ningún tipo de pretratamiento-, abriendo así camino a una potencial revolución en áreas como el análisis forense, de alimentos, farmacéutico, biológico, etc. Publicaciones recientes, una patente y el temprano reconocimiento de la comunidad científica dan cuenta de la importancia de este avance. Mi trabajo pretende explorar esta nueva tecnología de flujos de especies excitadas y altamente ionizantes en un amplio intervalo de temperaturas (antes solo accesibles a bajas presiones) en muchas otras áreas científicas y tecnológicas en las que el uso de los plasmas ha estado limitado, hasta la fecha, por las condiciones de trabajo requeridas. Por ejemplo, en la síntesis de materiales, se han utilizado plasmas de radiofrecuencia -como las descargas de barrera dieléctrica- que son inhomogéneos y fluctuantes. La GD a presión atmosférica, altamente estable y homogénea, puede actuar como un reactor con perfiles estacionarios de temperatura y concentración de especies. En una primera etapa me propongo trabajar en colaboración con el grupo de Nanosensores de la Universidad de Rovira i Virgili en Tarragona, para explorar el uso de la GD en helio para la síntesis de nanotubos de carbono (CNT). Este grupo cuenta con la metodología tradicional para la síntesis y caracterización de CNT, que se utilizará como punto de comparación de los avances obtenidos con la nueva metodología. Dada la importancia creciente de los CNT y las dificultades que presentan los métodos de producción corriente, un resultado favorable de este trabajo tendrá sin duda un impacto científico y tecnológico significativo. Posteriormente, pretendo extender el estudio a otras areas ¿particularmente la biología y biomedicina- en donde los incipientes usos de plasmas ha comenzado a mostrar resultados asombrosos, como la esterilización e incluso la eliminación de bacterias directamente sobre la piel, o la abrasión no traumática de células en un tejido. La GD a presión atmosférica requiere instrumentación extremadamente sencilla, es simple de operar y extremadamente versatil, pudiendo operarse con gases o incluso soluciones acuosas. Por lo tanto, es de esperar que a través de una fructífera colaboración se pueda explorar el potencial de esta herramienta en un amplio espectro de aplicaciones.

Resumen del Curriculum Vitae:

ESTUDIOS Doctor en química, Universidad de Buenos Aires (2001) Master of Science in Environmental Analysis and Assessment, Imperial College-University of London (1998) Licenciado en Química, Universidad de Buenos Aires (1995) POSICIONES ACADEMICAS Research associate, Indiana University (2005-2007) Post doctoral fellow, Indiana University (2003-2005) Jefe de Trabajos Prácticos, Universidad de Buenos Aires, 2002-2003 Ayudante de Primera (docencia e investigación), Universidad de Buenos Aires, 1995-2002 Ayudante de segunda (docencia), Universidad de Buenos Aires, 1991-1995 Aceptado en 2004 como investigador del consejo nacional de investigaciones científicas y técnicas de Argentina (CONICET). Por motivos de residencia no pude tomar el cargo. ESTANCIAS EN CENTROS INTERNACIONALES Indiana University, Research Associate (2005-2007) Indiana University, Post doctoral fellow (2003-2005) Universidad de Buenos Aires, Investigador (2001-2003) Imperial College, University of London, estudiante de postgrado (1997-1998) PUBLICACIONES Y CONGRESOS 29 publicaciones en revistas internacionales, 21 durante los últimos 5 años 8 trabajos recientes en Analytical Chemistry (una de las revistas más prestigiosas del área) 24 Presentaciones a congresos internacionales durante los últimos 5 años. 3 Conferencias plenarias como orador invitado 3 patentes o aplicaciones a ellas. PREMIOS Y DISTINCIONES Young Outstanding Analytical Scientist, JAAS-RSC, 2006 ¿ Premio conferido como uno de los jóvenes científicos que determinara tendencias futuras de investigación en su area. Chevening Scholarship, British Council de Buenos Aires - Beca para realizar estudios de postgrado en el Reino Unido (1997-1998). Extendida luego dado los altos rendimientos obtenidos. Beca de investigación para estudiantes de grado destacados, Universidad de Buenos Aires. EXPERIENCIA PROFESIONAL Y TRANSFERENCIA TECNOLÓGICA De Junio 2006 a la actualidad: Disruptive innovation team leader, Unilever, Deodorants. Lídero la frontera de innovación de esta categoría, conectando los últimos avances científicos con la aplicación tecnológica a gran escala. He adquirido conocimiento esencial para manipular con éxito las etapas de transformación del conocimiento científico en tecnología y su transferencia a sectores productivos. Intensa actividad multidisciplinaria y de conexión de universidades y empresas. Agosto 1998-Marzo 1999: Brewing Research International ¿ Redhill, Reino Unido. Trabajo de investigación en los aspectos ambientales del uso de agua en el proceso de malteado. AREAS EN LAS QUE POSEO GRAN EXPERIENCIA Análisis químico, análisis por inyección en flujo, espectrometría analítica molecular y atómica, espectrometría de masa elemental y de compuestos orgánicos, instrumentación analítica, espectroscopía laser, plasmas, ionización por electrospray. Innovación y transferencia tecnológica IDIOMAS Español, Inglés, Francés: habla, lee y escribe fluidamente. Portugués: habla y lee EXPERIENCIA DOCENTE- INVESTIGADOR Diez años de experiencia como docente de grado y posgrado. He dirigido tareas de investigación de estudiantes de grado postgrado



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: KARAGIANNIS, NIKOLAOS

Referencia: RYC-2009-05413

Area: Química

Correo electrónico: nkarayiannis@etsii.upm.es

Título:

Modelado de sistemas complejos e intercaras de macromoléculas sintéticas y biológicas por medio de métodos de simulación jerárquicos y multiescala

Resumen de la Memoria:

El plan de investigación propuesto se centra en dos objetivos principales en paralelo: (A) El estudio por medio de simulación de las propiedades estáticas, dinámicas, de barrera y reológicas de polímeros sintéticos, con vistas a posibles aplicaciones industriales. La idea básica es usar un método de modelado jerárquico, con base en un nivel atómico de descripción. La obtención de colectividades mecánico-estadísticas equilibradas se realizará por medio de algoritmos de Monte Carlo (MC) basados en los métodos más avanzados de movimientos en los que se modifica la conectividad de las moléculas. Estos métodos han demostrado ser capaces de equilibrar muestras atómicas a todas las escalas con una eficiencia superior en varios órdenes de magnitud a la de métodos tradicionales. De este modo es posible obtener información detallada sobre el efecto de la constitución química y la arquitectura molecular influyen en las propiedades conformacionales y termodinámicas y en los aspectos universales de las leyes de escalado estático. Además, las trayectorias de configuraciones estadísticamente independientes generadas por MC servirán de punto de partida para i) simulaciones de Dinámica Molecular (MD) en superordenadores de arquitectura paralela con el fin de obtener propiedades dinámicas y reológicas y compararlas con teorías actuales; ii) cálculos de Teoría de Estado de Transición (TST) para obtener propiedades de barrera de materiales poliméricos frente a gases de bajo peso molecular; iii) análisis topológico por medio de nuevos algoritmos geométrico para extraer la red de restricciones topológicas al movimiento de las cadenas poliméricas, bien como entrelazamientos físicos, bien como nudos. Se contempla también el uso de métodos de MC recientemente desarrollados para el estudio de macromoléculas de constitución química compleja, tanto en masa como en intercaras nanoestructuradas. (B) El diseño asistido por ordenador de biosensores de bajo coste basados en interacciones entre proteínas y cristales líquidos (LC). Simulaciones por medio de MD de moléculas individuales de toxinas en medio acuoso permitirán la determinación de descriptores estructurales (forma, tamaño) y dinámicos (difusividades traslacionales y rotacionales) para este tipo de biomoléculas. Pese a contener un número más reducido de grados de libertad, la representación simplificada de la biomolécula por medio de estos descriptores es suficientemente precisa y al mismo tiempo suficientemente eficiente como para alcanzar escalas temporales y espaciales en la simulación de las intercaras proteína/LC que son inaccesibles por otros métodos a nivel atómico. Como aplicación inmediata se planea investigar el anclaje selectivo de moléculas de cristal líquido en presencia de proteínas específicas, y la propagación de la orientación inducida a nivel molecular hasta niveles observables macroscópicamente. A continuación se llevarán a cabo simulaciones a meso-escala e investigaciones teóricas basadas en los resultados obtenidos a este nivel para diseñar sistemas de proteína/LC que sirvan de base en sensores con capacidad específica de detección.

Resumen del Curriculum Vitae:

Durante la tesis doctoral participé en el proyecto de colaboración científica con BP-Amoco (2000-2002, coordinado por el Prof. Doros Theodorou) con una estancia de tres meses en el centro de investigación de BP-Amoco Research Center (Napperville, IL, USA). El objetivo de esta estancia era la transferencia de métodos desarrollados en la Universidad de Patras para la simulación de las propiedades barrera de materiales basados en poliésteres. Después de la tesis fui investigador post-doctoral en el instituto ICEHT-FORTH (2002-2006, Patras, Grecia), y en el ISOM/ETSII (2006-2009, Universidad Politécnica de Madrid). Durante estas dos estancias postdoctorales he participado en dos proyectos de investigación de colaboración internacional financiados por la CE (PMILS (2003-2006) y MNIBS (2006-2009) ambos coordinados por el Prof. Manuel Laso), y en tres proyectos financiados por la empresa Dow Chemicals (2002-2004, 2005, 2006). También he sido investigador visitante en el CSIRO (2004, Clayton, Australia), donde colaboré con el Dr. A. Uhlherr en la paralelización de códigos de Monte Carlo para la simulación de sistemas poliméricos de cadena ultralarga con aplicaciones industriales. Mis líneas de investigación incluyen la simulación de las propiedades estáticas, dinámicas y de barrera, y la termodinámica y el equilibrio de fases de macromoléculas sintéticas de diversa naturaleza química y arquitectura molecular. Un área prioritaria es la descripción a nivel atómico de estas macromoléculas por medio de algoritmos de Monte Carlo especiales capaces de equilibrar estos sistemas multicadena con una eficiencia muy superior a la de métodos convencionales. El tipo de polímeros simulados va desde modelos simplificados, tales como cadenas articuladas de esferas duras, hasta modelos químicamente realistas de poliésteres y poliolefinas. En paralelo he investigado también el diseño de biosensores basados en intercaras entre proteínas y cristales líquidos usando métodos combinados multiescala, y la simulación de interacciones entre toxinas específicas y receptores neuronales, con aplicaciones en farmacología y bioquímica. He sido co-autor de 19 publicaciones (3 Phys. Rev. Lett., 1 Soft Matter, 3 J. Phys. Chem. B, 5 Macromolecules, 6 J. Chem. Phys., 1 Chem. Eng. Sci.) y un artículo invitado (J. Mol. Struct.: THEOCHEM) en revistas científicas internacionales con sistema de revisores, así como tres capítulos de libros. Durante mi carrera investigadora he dado más de 20 seminarios en conferencias y congresos internacionales, y más de 30 presentaciones en reuniones de proyectos de investigación con socios académicos e industriales.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2009

Nombre: **PRIEGO CAPOTE, FELICIANO**

Referencia: RYC-2009-03921

Area: Química

Correo electrónico: q72prcaf@uco.es

Titulo:

DESARROLLO DE PLATAFORMAS ANALÍTICAS BASADAS EN ESPECTROMETRÍA DE MASAS PARA SU APLICACIÓN EN METABOLÓMICA Y PROTEÓMICA: ANÁLISIS CUALITATIVO Y CUANTITATIVO

Resumen de la Memoria:

El objetivo principal de esta investigación que se pretende implementar es la optimización de nuevas plataformas analíticas para su aplicación en metabolómica y proteómica. Ambas disciplinas poseen un gran impacto por su posición en el flujo de información biológica (gen>mRNA>proteína>metabolito). La metabolómica (análisis global de metabolitos) es una herramienta de diagnóstico que proporciona medidas cuantitativas de respuestas multivariantes provenientes de sistemas multicelulares como consecuencia de estímulos patológicos o manipulaciones genéticas. La promoción actual de la metabolómica como complemento de la genómica y la proteómica se debe a que la relación entre la expresión génica de un sistema biológico y sus niveles de proteínas puede ser débil. La proteómica tiene como objetivo el análisis completo de las proteínas en una célula o tejido así como su variación temporal y espacial. Una de los aspectos de mayor interés actual en proteómica es el desarrollo de métodos para el análisis cuantitativo de proteínas. Entre las metodologías más utilizadas están las basadas en marcaje isotópico químico (TMT®, ITRAQ®) para cuantificar todas las proteínas de una muestra. Otra opción es la síntesis de péptidos marcados isotópicamente representativos de un panel de proteínas. Estos péptidos se utilizan como estándares internos para la cuantificación en términos absolutos del panel de proteínas. Esta opción (AQUA) es de gran utilidad cuando se conoce de forma exacta lo que se quiere determinar. La integración de estas plataformas permitirá mejorar los resultados en análisis cualitativo y cuantitativo, por lo que se podrá beneficiar cualquier grupo de investigación con aplicaciones analíticas. La fase de optimización será clave para conseguir plataformas automatizadas, rápidas y con niveles altos de sensibilidad y selectividad. Para ello es necesario un conocimiento detallado de cada una de las etapas del proceso analítico: preparación de muestra, medida de los analitos y tratamiento e interpretación de los resultados. La preparación de muestra continúa siendo el cuello de botella del proceso analítico. Por ello, existe una demanda de nuevas alternativas de preparación de muestras para su implementación en nuevos métodos analíticos. La automatización, miniaturización y una mayor eficiencia son los criterios que se perseguirán en el desarrollo de nuevas alternativas de tratamiento de muestra. Debido al potencial actual de la espectrometría de masas (MS), las plataformas a desarrollar tendrán su base en esta técnica de detección. El objetivo en análisis cualitativo será el desarrollo de metodologías con gran poder de identificación con propósitos de caracterización. Esta etapa ha experimentado un gran avance gracias a la utilización de analizadores de masas de gran poder de resolución (Q-TOF y Orbitrap). Respecto al análisis cuantitativo, el objetivo será el desarrollo de metodologías de alta sensibilidad para la determinación en términos relativos y absolutos de perfiles de compuestos previamente identificados. Para ello, se pretende utilizar analizadores de masas capaces de satisfacer las demandas de selectividad y sensibilidad como el triple cuadrupolo. En ambas disciplinas ómicas está previsto el uso del marcaje con isótopos estables como una herramienta de gran capacidad para potenciar el análisis cualitativo y cuantitativo mediante MS.

Resumen del Curriculum Vitae:

Realicé mi tesis doctoral con carácter europeo con el soporte de una Beca FPU en el grupo FQM-227 de la Universidad de Córdoba (UCO, 2003-2007). Titulada "Nuevas Contribuciones para la Automatización-Aceleración de la Preparación de la Muestra y a la Mejora de la Sensibilidad y la Selectividad Analíticas", fue calificada con Sobresaliente Cum Laude con unanimidad de los miembros del Tribunal. Recibió el Premio Extraordinario de Doctorado de la Universidad de Córdoba en el macroárea de Ciencias Exactas y Naturales y el Premio a Investigadores Noveles por el Grupo Regional Andaluz de la Sociedad Española de Química Analítica. Durante ella, realicé una estancia en el Department of Pure and Applied Biochemistry (University of Lund, Sweden) por 3 meses. Mi etapa Postdoctoral se ha repartido entre la UCO y el Grupo de Investigación en Proteómica Biomédica de la Universidad de Ginebra (liderado por el Dr. Jean-Charles Sanchez) gracias a un Contrato Postdoctoral del Ministerio de Ciencia e Innovación. En España inicié mi formación en el desarrollo de plataformas analíticas en metabolómica, que me permitió empezar la codirección de 2 tesis doctorales que han dado lugar a 8 publicaciones en revistas de alto índice de impacto. En Suiza trabajo (desde Junio 2007) en el desarrollo de métodos analíticos para la caracterización cualitativa y cuantitativa de proteínas glicadas en diferentes tipos de muestras clínicas mediante marcaje isotópico químico, lo que ha dado lugar a una patente internacional de la que soy coinventor al 50% (UK N° 08 155 76.4). Soy autor de 50 publicaciones (46 ya publicadas) de las cuales el 98% lo han sido en el primer cuartil de sus correspondientes áreas (Journal Citation Reports, 80% en Chemistry, Analytical). El índice de impacto acumulado de mis publicaciones es 161,13 con un total de citas de 165. He sido primer autor en 26 artículos y autor para la correspondencia en 23 lo que prueba mi capacidad para participar en diversos proyectos de investigación (9 proyectos más 3 solicitados) y dirigir líneas de investigación de forma eficiente. Estas investigaciones han dado lugar a la optimización de 30 métodos analíticos para la determinación de diferentes tipos de compuestos en diferentes clases de muestras. Puede decirse que soy un experto en el diseño de estrategias de preparación de muestra y en la configuración de plataformas analíticas basadas en espectrometría de masas como técnica de detección. Así, he adquirido una sólida formación en la utilización de diferentes analizadores de masas incluyendo tres de gran potencial como son el de triple cuadrupolo o los sistemas híbridos Q-TOF y Orbitrap. También he sido co-autor de dos capítulos de libro y un libro sobre las aplicaciones analíticas de los ultrasonidos (400 páginas), estas tres últimas publicaciones con coautoría al 50%. El libro publicado por Elsevier es un manual de relevancia para todos aquellos laboratorios analíticos interesados en la implementación de los ultrasonidos como energía auxiliar. Entre mis artículos hay que citar 2 en Analytical Chemistry, 1 en Mass Spectrometry Reviews, 6 en TrAC Trends in Analytical Chemistry y 9 en Journal of Chromatography A. He presentado 19 comunicaciones a congresos (4 de ellas orales presentadas por mí) y actué como revisor en revistas tales como Journal of Chromatography A, Talanta o ABC.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN

**SUBPROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2009**

Nombre: PINO ESTÉVEZ, VERÓNICA

Referencia: RYC-2009-03851

Area: Química

Correo electrónico: veropino@ull.es

Título:

Avances en procesos de microextracción en fase sólida y en fase líquida: derivatización y empleo de líquidos iónicos

Resumen de la Memoria:

Las técnicas de microextracción en fase sólida (SPME) y microextracción en fase líquida (LPME) constituyen contribuciones significativas a la Química Analítica en los últimos años. Con respecto a metodologías de extracción convencionales, estas técnicas microextractivas se caracterizan por reducir los tiempos de análisis y fuentes de error, así como evitar (o minimizar) el consumo de disolventes orgánicos, costosos, tóxicos y agresivos con el medio ambiente. De un modo análogo, los líquidos iónicos (ILs) constituyen un nuevo grupo de reactivos que han llegado a ser calificados como disolventes "amables" con el medio ambiente debido fundamentalmente a poseer una presión de vapor prácticamente despreciable. La línea principal de investigación que se presenta pretende contribuir a superar algunas de las principales limitaciones de la SPME y de la LPME, así como expandir su campo de aplicación con la utilización de ILs y con la derivatización. Así, se persigue por un lado la utilización de fibras de SPME con recubrimientos de líquidos iónicos, los cuales pueden ser sintetizados con grupos funcionales específicos con el objeto de mejorar las características extractivas de la SPME con respecto a las microfibras comerciales. También es posible utilizar la SPME en conjunción con novedosos agregados de ILs que se utilizarán como extractantes, con el objeto de facilitar la inyección en un cromatógrafo de gases de analitos presentes en muestras sólidas tras ser solubilizados en los citados agregados por medio de una extracción asistida por microondas. Asimismo, hay que resaltar el interés y utilidad que puede tener el empleo de líquidos iónicos funcionalizados, o mezclas ILs/surfactantes, como alternativa a los disolventes orgánicos convencionales utilizados en LPME. Con respecto a las mejoras en la derivatización en SPME, es posible llevar a cabo reacciones sobre el recubrimiento de las microfibras de SPME, o reacciones de derivatización on-line en una interfase de SPME-HPLC. Por otra parte, la versatilidad de los ILs, y su capacidad para disolver un amplio número de analitos de diferente naturaleza, los hace ideales para llevar a cabo reacciones de derivatización in situ, incorporando directamente el reactivo derivatizante en el IL, lo cual es ventajoso tanto para aplicaciones de SPME como de LPME. La finalidad última que se persigue es la aplicación de las metodologías desarrolladas en combinación con técnicas cromatográficas como HPLC (-UV, -FD, o -ECD) y GC (-FID, -TCD, -ECD, o -MS), a la resolución de problemas prácticos relacionados con la cuantificación de compuestos que forman parte de familias como hidrocarburos aromáticos policíclicos, aminas heterocíclicas, clorofenoles, alquilfenoles o compuestos carbonílicos, en matrices de interés agroalimentario y medioambiental.

Resumen del Curriculum Vitae:

Licenciada en Química en junio de 1997 por la Universidad de La Laguna (ULL) con Premio Extraordinario de Licenciatura y Mejor Expediente Académico de la promoción en la especialidad de Química Fundamental. Becaria de colaboración del MEC en el último curso de Licenciatura. Becaria FPU del MEC para realizar la Tesis Doctoral en el periodo 1998-2001. Doctora en Química en abril de 2002 por la ULL con la calificación de sobresaliente cum laude y Premio Extraordinario de Doctorado. Mención especial en el año 2003 para Jóvenes Investigadores otorgado por el Gobierno de Canarias. En la trayectoria investigadora, evaluada en su conjunto, destacan 2 capítulos de libro, 1 artículo de revisión y 22 publicaciones en revistas de alto índice de impacto (JCR), 2 de ellas en el Analytical Chemistry, 2 en Chemical Communications y 9 en Journal of Chromatography A, siendo autor de correspondencia en 6 de los artículos más recientes. El índice de impacto promedio de estos artículos es de 3.7, correspondiente al primer decil del área de Química Analítica. Además, estos artículos han generado un total de 352 citaciones. En el momento actual, otras 4 publicaciones se encuentran en fase de evaluación. Asimismo, se resalta la participación en 29 congresos internacionales con 12 comunicaciones orales, 2 de ellas por invitación. Las estancias en centros de investigación de reconocido prestigio han sido constantes a lo largo de la trayectoria investigadora. En el periodo predoctoral, en Wake-Forest University (3 meses) bajo la dirección del profesor Dr. Willie L. Hinze. En el periodo postdoctoral, en el Instituto Canario de Investigaciones Agrarias (7 meses bajo la dirección de la Dra. María Fresno Baquero), en Iowa-State University (12 meses bajo la dirección del profesor Dr. Daniel W. Armstrong), en la Université Claude-Bernard de Lyon (2 meses bajo la dirección del profesor Dr. Alain Berthod), y en The University of Toledo de Ohio (5 meses en colaboración con el profesor Dr. Jared L. Anderson). Cabe señalar también la participación en 7 proyectos de investigación. La reincorporación a la ULL tras el periodo postdoctoral en Iowa-State University tuvo lugar en marzo de 2004 gracias a una convocatoria de incorporación de doctores del Gobierno de Canarias. Posteriormente, desde Marzo de 2005 hasta Febrero de 2008, ha continuado la vinculación con la Universidad de La Laguna como Investigadora del Programa Juan de la Cierva. Desde mayo de 2008, he sido distinguida como Profesora Adjunta en The University of Toledo (Ohio). También cabe señalar la colaboración como Reviewer en revistas científicas tales como Analytical Chemistry, Journal of Chromatography A, Analytical and Bioanalytical Chemistry, Talanta, Journal of Colloid and Interface Science, Journal of Chromatographic Science, Journal of AOAC International y Environment International. Entre las labores docentes desempeñadas, cabe destacar un total de 34 créditos docentes, 346 horas de formación docente, así como la vinculación al Proyecto Piloto de Experimentación del Crédito Europeo que se implanta actualmente en la Facultad de Química de la Universidad de La Laguna. Acreditada a las Figuras de Ayudante Doctor y Profesor Contratado Doctor por la ANECA. Por último, señalar la co-dirección de una Tesis Doctoral que se encuentra en fase de ejecución y cuatro DEAs (dos defendidos y dos en fase de ejecución).