

CURRÍCULUM VITAE NORMALIZADO ABREVIADO

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre y apellidos	Dolores Santa María Gutiérrez		
DNI/NIE/pasaporte			
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	K-8273-2014	
	Código Orcid	0000-0001-5125-2206	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED)		
Dpto./Centro	Facultad de Ciencias. Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica		
Dirección	Avenida de Esparta s/n. Carretera de Las Rozas al Escorial km 5 28232 Las Rozas-Madrid		
Teléfono	913987336	Correo electrónico	dsanta@ccia.uned.es
Categoría profesional	Catedrática de Universidad	Fecha inicio	02/04/2018
Espec. cód. UNESCO	230600; 230610; 230618; 230109		
Palabras clave	Química Orgánica Heterocíclica: síntesis y evaluación de Propiedades. Estructura y Dinámica de Biomoléculas en Estado Sólido. Química Supramolecular. Reconocimiento Molecular. Interacciones no covalentes y Enlace de Hidrógeno. Resonancia Magnética Nuclear en Disolución y Estado Sólido. Complejos de Ligandos Heterocíclicos con Metales. Diseño, Síntesis y Estudio de Nuevos Fármacos. Química Computacional.		

A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciada en Ciencias Químicas. Sección Química Fundamental. Opción Química Orgánica	Universidad Complutense de Madrid	1987
Grado de Licenciada (Tesina)	Universidad Complutense de Madrid	1988
Doctora en Ciencias. Sección Químicas	Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED)	1992

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica

- N° de Sexenios de Investigación: 4
- Publicaciones totales: 70
- Citas totales en artículos: 1538
- Citas totales en patentes: 41
- Índice h: 19

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

En el período 1988-1991 disfruté de una beca predoctoral adscrita a la UNED con la que obtuve el título de Doctora en 1992 con la Tesis Doctoral "Nuevos Fotoestabilizantes UV derivados de Pirazol", bajo la dirección de la Dra. Rosa M^a Claramunt Vallespí. La tesis contribuyó al estudio del mecanismo general que explicaba la fotoestabilidad de los absorbentes UV y su aplicación en la fotoprotección de polímeros. Aportaciones: 6 artículos entre las que se encuentran dos *J. Am. Chem. Soc.* (Q1) y dos *J. Org. Chem.* (Q1).

Desde abril de 1993 a febrero de 1994 estuve contratada en el Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros del CSIC para investigar sobre "Síntesis y valoración fotoquímica de nuevos fotoiniciadores de polimerización". Aportación: un *J. Appl. Phys.*

En el período 1994-1995 fui becaria postdoctoral en la UNED, pasando a ser Profesora Asociada en octubre de 1995. En 1999 fui contratada como Profesora Titular Interina de EU y, desde el 1 de diciembre de 2000 como Profesora Titular de EU. En junio de 2008 obtuve la

plaza de Profesora Titular de Universidad de la UNED y desde el 02/04/2018 soy Catedrática de Universidad.

Actividad Investigadora

Después de la Tesis Doctoral, mi trayectoria investigadora ha abarcado varias líneas de investigación:

- Síntesis y estudio conformacional por RMN, cálculos teóricos y difracción de RX de poliazolilbencenos, poliazolilpiridinas y polipirazolilnaftalenos. Estos derivados fueron muy interesantes por sus propiedades en química supramolecular y de coordinación. Aportaciones: 8 artículos entre los que se encuentran un *Tetrahedron* (Q1) y un review "*Targets in Heterocyclic System. Chemistry and Properties*".
- Estudios estructurales y conformacionales mediante RMN en disolución y estado sólido de complejos organometálicos con ligandos conteniendo anillos de pirazol (ej. escorpionatos). Aportaciones: 9 artículos en revistas como *Eur. J. Inorg. Chem.* o *J. Organometal. Chem.* o *Dalton Transactions* (Q1).
- Aplicación de las técnicas de 1D y 2D de RMN multinuclear en disolución y en estado sólido a la resolución de problemas estructurales de compuestos heterocíclicos (isomería, tautomería, dinámica o enlaces de hidrógeno). Aportaciones: 29 artículos entre los que se encuentran dos *J. Am. Chem. Soc.* (Q1), dos *New J. Chem.* (Q1), un *Tetrahedron* y un *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* (Q1) y un *J. Fluor. Chem.*
- Sistemas Bioorgánicos: diseño y síntesis de nuevos *hosts* y *guests* análogos de biotina y síntesis de heterociclos y medida de su actividad biológica. Los resultados conseguidos han permitido generar un modelo para evaluar nuevos *hosts* y realizar un diseño racional de compuestos que supongan una mejora en la interacción con los *guests*. Aportaciones: 11 artículos entre los que se encuentran dos *J. Org. Chem.* (Q1), un *Biosensors & Bioelectronics* (Q1) y un *Molecules*; y una Tesis Doctoral con Mención de Doctorado Europeo titulada "Receptores sintéticos: estudio teórico y experimental de su interacción con ureas".

He participado en 17 proyectos financiados y colaborado con grupos de investigación nacionales e internacionales. He participado en convenios de colaboración tecnológica en RMN con la empresa Bruker. Los resultados de mi investigación han sido presentados en 46 congresos, nacionales e internacionales y he dirigido trabajos de investigación de estudiantes pre- y post-doctorales.

Fruto de mi trayectoria investigadora ha sido el reconocimiento **de cuatro sexenios de investigación**

Actividad Docente

Durante el período de realización de la Tesis Doctoral colaboré como profesora ayudante de prácticas de asignaturas de 4º y 5º curso de la Licenciatura en Ciencias Químicas de la UNED.

Durante 10 años (cursos 1993/1994 hasta 2002/2003) fui Profesora Tutora de la UNED en el Centro Asociado de Madrid impartiendo las prácticas de laboratorio correspondientes a la asignatura de tercer curso "Prácticas: Síntesis Orgánica" de la Licenciatura en Ciencias Químicas.

Mi labor docente como Profesora Asociada se inició con la asignatura "Química General" de primer curso de la Licenciatura en Ciencias Químicas y de la Licenciatura en Ciencias Físicas (curso 1997/1998). Posteriormente, desde el curso 1998/1999, mi docencia se ha centrado en el área de Química Orgánica, impartiendo la asignatura de tercer curso "Química Orgánica I", tanto de la Licenciatura en Ciencias Químicas como del curso de Adaptación para diplomados en EGB. A partir del curso 2006/2007 participé en el equipo docente de la asignatura de quinto curso "Química Orgánica Heterocíclica" y en el curso, 2012/2013, en la asignatura también de quinto curso "Análisis Orgánico Funcional".

Desde mis inicios docentes he estado vinculada en el tercer ciclo, concretamente impartiendo la asignatura de "Elucidación estructural de compuestos orgánicos por aplicación de la Resonancia Magnética Nuclear", perteneciente al Programa de Doctorado de Química Orgánica, y tutelando a estudiantes en sus períodos docentes y de investigación.

Desde el curso 2008/2009, en el que se empieza a impartir en la Facultad de Ciencias de la UNED el Máster en Ciencia y Tecnología Química, he participado dando docencia en las

asignaturas de “Resonancia Magnética Nuclear de alta resolución” y “Química Terapéutica”, así como tutorizado a estudiantes en los Trabajos de Fin de Máster.

Desde el curso 2011/2012 en el que se inicia en la UNED el segundo curso del Grado en Química, imparto docencia de las asignaturas “Química Orgánica I” (primer semestre) y “Química Orgánica II” (segundo semestre) y desde el curso académico 2012/2013, la de la asignatura “Introducción a la Experimentación en Química Inorgánica y Química Orgánica”. Desde el curso 2017/2018 formo parte del equipo docente de la asignatura de tercer curso del Grado en Química “Síntesis Orgánica y Determinación Estructural” y desde el curso 2022/2023 de la asignatura optativa “Química Heterocíclica y Aplicaciones a la Química Farmacéutica”. Asimismo, he tutorizado a estudiantes en Trabajos de Fin de Grado desde que se imparte dicha asignatura.

Mi docencia con la metodología de educación a distancia y la preocupación por los estudiantes, me ha llevado a publicar varios libros sobre las distintas asignaturas que se imparten desde el Departamento, algunos de los cuales han sido premiados por el Consejo Social de la UNED. A partir del año 2004 se puso en marcha en la UNED la virtualización de todas las asignaturas proceso en el que estuve totalmente involucrada. Asimismo, he participado en programas de radio.

También cabe destacar mi participación, desde el curso 2002/2003 hasta el curso 2018/2019, en el curso de Postgrado de Formación Permanente “Fármacos y Medicamentos”, perteneciente al Programa de Formación del Profesorado, título propio de la UNED.

Fruto de mi trayectoria docente ha sido el reconocimiento de **seis quinquenios de actividad docente.**

Gestión Universitaria

He desempeñado la labor de secretaria del Departamento de Química Orgánica y Biología durante el curso académico 2001/2002 y del Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica desde octubre del 2012 durante 2 años.

Así mismo, he llevado a cabo labores de gestión formando parte de la Comisión de Doctorado de antiguos Programas de Doctorados ya extinguidos: Doctorado de Química Orgánica y Doctorado en Ciencias Químicas (EEES).

He sido miembro de la Comisión de Coordinación del Máster Universitario en Ciencia y Tecnología Química y desde noviembre de 2014 al 2018 fui la Coordinadora de dicho Máster.

Actualmente, desde el 24 de noviembre del 2021 soy directora del departamento de Química orgánica y Bio-Orgánica de la UNED.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (últimos diez años)

C.1. Algunas Publicaciones

1. Rosa M. Claramunt, Concepción López, Dolores Santa María, José Elguero. **Aceptada 2023**. The Juliá-Colonna Reaction: A Phase-Transfer Catalyzed Enantioselective Olefin Epoxidation. *Afinidad*.
2. Marta Marín-Luna, Pilar Sánchez-Andrada, Ibon Alkorta, José Elguero, M. Carmen Torralba, Patricia Delgado-Martínez, Dolores Santa María, Rosa M. Claramunt. **2021**. A Structural Analysis of 2,5-diaryl-4H-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-ones: NMR in the Solid State, X-ray Crystallography, and GIPAW Calculations. *Magn. Reson. Chem.* **59**, 423-438.
3. Pilar Sánchez-Andrada, Marta Marín-Luna, Ibon Alkorta, José Elguero, Gema Percho, Dolores Santa María, Rosa M. Claramunt. **2021**. Conformational Analysis of 2,5-diaryl-4-methyl-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-ones: Multinuclear NMR and DFT Calculations. *J. Heterocyclic Chem.* **58**, 1130-1140.
4. Amy L. Webber, Jonathan R. Yates, Miri Zilka, Simone Sturniolo, Anne-Christine Uldry, Emily K. Corlett, Chris J. Pickard, Marta Pérez-Torralba, M. Angeles Garcia, Dolores Santa María, Rosa M. Claramunt and Steven P. Brown. **2020**. Weak Intermolecular CH...N Hydrogen Bonding: Determination of ¹³CH-¹⁵N Hydrogen-Bond Mediated J couplings by Solid-State NMR Spectroscopy and First-Principles Calculations. *J. Phys. Chem. A*, **124**, 560-572.

5. Dolores Santa María, Rosa M. Claramunt, M. Carmen Torralba, M. Rosario Torres, José Elguero. **2019**. Synthesis of a new 24-membered tetramide macrocycle and X-ray crystal structure determination. *Tetrahedron Lett.* **60**, 1206-1209.
6. Ibon Alkorta, José Elguero, Christophe Dardonville, Felipe Reviriego, Dolores Santa María, Rosa M. Claramunt, Marta Marín-Luna. **2019**. A theoretical and spectroscopic (NMR and IR) study of indirubin in solution and in the solid-state. *J. Phys. Org. Chem.* **33**:e4043, 1-11.
7. Dolores Santa María, Rosa M. Claramunt, José Elguero, Miguel Carda, Eva Falomir, Celia Martín-Beltrán. **2019**. New N,C-Diaryl-1,2,4-triazol-3-ones. Synthesis and evaluation as anticancer agents. *Med. Chem.* **15**, 360-372.
8. María Mar Quesada-Moreno, Juan Ramón Avilés-Moreno, Juan Jesús López-González, Fco. Javier Zúñiga, Dolores Santa María, Rosa M. Claramunt, Felipe Reviriego, Ibon Alkorta, José Elguero. **2019**. The synergy of different solid-state techniques to elucidate the supramolecular assembly of two ¹H-benzotriazole polymorphs. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 19879-19889.
9. Rosa M. Claramunt, Dolores Santa María, Ibon Alkorta, José Elguero. **2018**. The structure of N-Phenyl-Pyrazoles and Indazoles: Mononitro, Dinitro and Trinitro Derivatives. *J. Heterocyclic Chem.* **55**, 44-64.
10. Dolores Santa María; Rosa M^a Claramunt; Ibon Alkorta; José Elguero; Fco. Javier Zúñiga. **2016**. The structure of 4,5,6,7-tetrafluoro-1H-benzotriazole in solid state and in solution. *J. Fluor. Chem.* **192**, 98 – 104.
11. M. Ángeles García; M. Ángeles Farrán; Dolores Santa María; Rosa M. Claramunt; M. Carmen Torralba; M. Rosario Torres; Carlos Jaime; José Elguero. **2015**. Pyrrole-Pyridine and Pyrrole-Naphthyridine Hosts for Anion Recognition. *Molecules* **20**, 9862 – 9878. Factor de Impacto: 2.465.
12. Juan Z. Dávalos; Javier González; Andrés Guerrero; Ana C. Valderrama-Negrón; Larry D. Aguirre Méndez; Rosa M. Claramunt; Dolores Santa María; Ibon Alkorta; José Elguero. **2013**. Silver complex of chloroquine: synthesis, characterization and structural properties. *New. J. Chem.* **37**, 1391 – 1401.
13. Dolores Santa María; Rosa M. Claramunt; Vladimir Bobosik; M. Carmen Torralba; M. Rosario Torres; Ibon Alkorta; José Elguero. **2013**. Synthesis and structural study of 2-arylbenzotriazoles related to Tinuvins. *Tetrahedron.* **69**, 3027- 3038.

C.2. Proyectos

1. Título del proyecto: New PhotoActive hydrazone biobased Materials to promote Sustainable Industrial Applications.
Entidad financiadora: UNED
Entidades participantes: Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica (UNED), CNR NANOTEC Lecce (Italy) y University of Warwick (U.K.)
Duración, desde: 01/07/2022 hasta: 30/06/2024 Cuantía de la subvención: 4000 €
Investigador responsable: M^a de los Ángeles Farrán Morales.
Tipo de participación: Investigador
2. Título del proyecto: Identificación de nuevos quimiotipos con propiedades antioxidantes: síntesis y aplicaciones en diferentes patologías
Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad N° CTQ2014-568833-R
Entidades participantes: Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica (UNED) y Ciencias Médicas Básicas (CEU San Pablo)
Duración, desde: 01/01/2015 hasta: 30/09/2018 Cuantía de la subvención: 98.010 €
Investigadores responsables: Rosa M^a Claramunt Vallespí (IP1) y Dionisia Sanz del Castillo (IP2)
Tipo de participación: Investigador
3. Título del proyecto: El enlace de hidrógeno y su influencia en la estructura de los cristales y los complejos anfitrión-huésped
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación N° CTQ2010-16122 (subprograma BQU)
Entidades participantes: Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica (UNED)
Duración, desde: 01/01/2011 hasta: 31/12/2014 Cuantía de la subvención: 142.780 €

Investigador responsable: Rosa M^a Claramunt Vallespí

Tipo de participación: Investigador

4. Título del proyecto: Measurement of intermolecular spin-spin coupling constants across hydrogen bonds in crystals

Entidad financiadora: Proyecto del EU-NMR Infrastructure Action (026145)-Sixth Framework Programme (FP6)

Entidades participantes: Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica (UNED) y Centre de RMN à Très Hauts Champs de Lyon, Université de Lyon

Duración, desde: 01/01/2008 hasta: 31/12/2011 Cuantía de la subvención: 4.000 €

Investigador responsable: Rosa M^a Claramunt Vallespí

Tipo de participación: Investigador

5. Título del proyecto: Reconocimiento Molecular. Aplicaciones a sistemas bioorgánicos y al desarrollo de inhibidores NOS

Entidad financiadora: MEC-CTQ2007-62113/BQU

Entidades participantes: Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica (UNED)

Duración, desde: 01/10/2007 hasta: 30/09/2010 Cuantía de la subvención: 193.600 €

Investigador responsable: Rosa M^a Claramunt Vallespí

Tipo de participación: Investigador

C.3. Contratos, méritos tecnológicos o de transferencia

1. Título del contrato/proyecto: Contrato de colaboración tecnológica en RMN.

Entidades participantes: Bruker Española S.A. y Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica de la UNED

Duración, desde: 01/03/2018 hasta: 02/02/2020

Investigador responsable: Rosa M^a Claramunt Vallespí

Se inició en 2003 y desde entonces se ha ido renovando cada 2 años realizando trabajos de asesoramiento, análisis de muestras, resolución de problemas estructurales, desarrollo y puesta a punto de experimentos. Conferencias. Demostraciones.

2. Título del contrato/proyecto: Acuerdo de transferencia de material químico

Entidades participantes: GlaxoSmithKline Investigación y Desarrollo, S.L. y Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica de la UNED

Duración, desde: 17/10/2012, Vigente

Investigador responsable: Rosa M^a Claramunt Vallespí

3. Título del contrato/proyecto: Estudios por Resonancia Magnética Nuclear (RMN) de polimorfismo y quiralidad en moléculas orgánicas y bio-orgánicas.

Entidades participantes: Bruker Española S.A. y Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica de la UNED

Duración, desde: 25/07/2007 hasta: 31/01/2008

Investigador responsable: Rosa M^a Claramunt Vallespí

Cuantía: 20.970,00 €

C.4 Dirección de trabajos, participación en tareas de formación

1. Codirectora de un proyecto de una estancia postdoctoral "Estudios de reconocimiento molecular de derivados de naftiridina". Postdoctorando: Dr. José Carlos Iglesias Sánchez. UNED. 09/01/2009 a 31/07/2009. Proyecto que dio lugar a la publicación "Molecular Recognition Studies on Naphthyridine Derivatives". 2009. *Molecules* 15, 1213 – 1222.

2. Codirectora de la Tesis Doctoral "Receptores sintéticos: estudio teórico y experimental de su interacción con ureas". Doctorando: Fernando Herranz Rabanal, UNED, 2006. Calificación: Sobresaliente *Cum Laude*. Tesis que dio lugar a 6 publicaciones. Fernando Herranz actualmente es investigador en el Centro Nacional de Investigaciones Cardiovasculares Carlos III.

3. Dirección de Trabajos Fin de Grado y Trabajos Fin de Máster de estudiantes de la UNED.

Part A. PERSONAL INFORMATION		CV date	24/10/24
First and Family name	Dionisia Sanz del Castillo		
Social Security, Passport, ID number		Age	
Researcher numbers	Researcher ID	K-2359-2014	
	Orcid code	0000-0001-9672-4684	

A.1. Current position

Name of University/Institution	Universidad Nacional de Educación a distancia (UNED)		
Department	Química Orgánica y Bio-Orgánica, Fac. Ciencias		
Address and Country	Avenida Esparta s/n , 28232 Las Rozas-Madrid		
Phone number	913987331	E-mail	dsanz@ccia.uned.es
Current position	Full Professor	From	14/06/2010
Espec. cód. UNESCO	2306, 230109, 2390		
Palabras clave	Multinuclear NMR in solution and solid state. Non-covalent interactions and hydrogen bonding, proton transfer. Heterocyclic organic synthesis. Supramolecular chemistry. Biomolecules in solid state. Complexes of heterocyclic ligands with metals; decontamination agents. Crystal engineering		

A.2. Education

PhD	University	Year
Doctorado en C. Químicas	Universidad Complutense de Madrid	1987

A.3. JCR articles, h Index, thesis supervised...

Total JCR articles: **127**

Total number of citations: **2587**

Average number of citations during the last five years: **106**

Total number of publications in the first quartile: **27**

h-index: **26**

Thesis supervised: **3** (European Doctorate and which have obtained the highest qualification)

Number of six year periods of research positively assessed: **5** (last in 2013)

Part B. CV SUMMARY (max. 3500 characters, including spaces)

I graduated with a Bachelor of Science (Chemistry) from UCM (Universidad Complutense de Madrid) in 1982. My final year project was carried out in the laboratory of Professor B. Alcaide with the research work entitled "Reaction of phenylglyoxal with aliphatic and aromatic amines. Synthesis of monoimines and some of its derivatives". This allowed me to obtain a B.Sc.(Honors) in Chemistry in 1983.

Then, I joined the group of Prof. R. M. Claramunt as a doctoral student with a Ph.D. fellowship (Project CAICYT No. 1395-82, "Synthesis of biologically active adamantlyheterocycles") at the Instituto de Química Médica (CSIC) graduating in 1987 with a Doctoral Thesis entitled: "Synthesis and biological activity of adamantyl heterocycles", at UCM obtaining highest honors: Apto Cum Laude. This Thesis won an award of the Fundación Universidad-Empresa "for the best Doctoral Thesis defended at the Universities of Madrid with business interest in the scientific-technical field" in 1991.

In 1987-88 I was awarded a postdoctoral fellowship from the Spanish Ministry of Education/ French Ministry of Scientific Research (MEC/MRS) to join the groups of Prof. R. Faure and Prof. C. Roussel, at the University of Aix-Marseille III (France), working on structural determination by multinuclear NMR and resolution of racemates by chromatography.

In June of 1988, I joined the faculty of the Department of Organic and Bio-Organic Chemistry (Faculty of Sciences, UNED), as an assistant Professor, being promoted in May 1990 to Associate Professor and in June 2010 to Full Professor. I was responsible for the Department's research laboratories set up and was in charge of the NMR laboratories between 1988-1994 and 2009-2013.

I have co-supervised, with Prof. R. M. Claramunt, three doctoral theses entitled: “Substituents Influence on the physico-chemical properties and reactivity of azoles”; “Intra- and intermolecular proton transfer in conjugated systems”; “Schiff Bases derived from 3-hydroxy-4-pyridinecarboxaldehyde: Synthesis and structural studies” (European Ph.D. with Honors).

I have collaborated with different research groups in Spain (CSIC, UAM, University of Alcalá de Henares, University of Córdoba, University of Murcia, UCM, UAB, University of Zaragoza) as well as abroad (Universities of Toulouse, Montpellier, Pau, Aix-Marseille III, Paris IV, École Supérieure de Lyon, Mons, Copenhagen, Parma, Rostov, Freie Universität Berlin, National University of Córdoba, University of Buenos Aires, University of Rosario and University of Kurukshetra-India).

I have actively participated in technical collaboration projects and agreements with Bruker S.A. NMR (Technical consulting, sample analysis, experiment set up, seminars and demonstrations signed by the Department since 2002).

I have also been involved in projects in collaboration with pharmaceutical companies. In 1991, I was a postdoctoral researcher at RHONE POULENC (Centre de Recherches des Carrières in Saint Fons (Lyon)) where I conducted a study on Chiral Recognition by NMR.

As a result of my research activity I have attended and presented my work in 82 national and international conferences and published 128 articles in high impact journals in the fields of organic, pharmaceutical and spectroscopy.

Part C. RELEVANT MERITS

C.1. Publications (including books)

1.- R. Aggarwal, S. Sharma, M. Hooda, D. Sanz, R. M. Claramunt, B. Twamley, I. Rozas. (7/4) “Visible-light mediated regioselective approach towards synthesis of 7-aryl-6-methyl-[1,2,4]triazolo[3,4-*b*][1,3,4]thiadiazines”. *Tetrahedron*, **2019**, *75*, 130728 (10p). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tet.2019.130728>. The first visible-light mediated, simple, efficient and ecofriendly protocol for the regioselective synthesis of novel [1,2,4]triazolo[3,4-*b*][1,3,4]thiadiazines has been developed by the reaction of α -bromodiketones, generated *in situ* by the bromination of a diverse array of β -diketones with *N*-bromosuccinimide, with 4-amino-[1,2,4]triazole-3-thiols. The methodology does not require the presence of any additives and this reaction proceeded in the presence of EDG (OMe), EWG (Cl) and heteroarenes (thiophenyl) giving the expected products in good to excellent yields. A solvent free protocol was also established to accomplish the synthesis of target compounds but it required PTSA as a catalyst and yields are comparatively poor. The structure of the regioisomer has been confirmed unambiguously by heteronuclear 2D-NMR [(¹H-¹³C) HMBC, (¹H-¹⁵N) HMBC, (¹H-¹³C) HMQC] spectroscopic and X-ray crystallographic studies.

2.- V. L. M. Silva, A. M. S. Silva, R. M. Claramunt, D. Sanz, L. Infantes, A. Martínez López, F. Reviriego, I. Alkorta, J. Elguero. (9/4) “An example of polynomial expansion: the reaction of 3(5)-methyl-1*H*-pyrazole with chloroform and characterization of the four isomers” *Molecules*, **2019**, *24*, 566 (16p). DOI: 10.3390/molecules24030568. The reaction in phase-transfer catalyzed conditions of 3(5)-methyl-1*H*-pyrazole with chloroform affords four isomers **333**, **335**, **355** and **555** in proportions corresponding to the polynomial expansion $(a + b)^3$, with $a = 0.6$ and $b = 0.4$, a and b being 3-methyl and 5-methyl proportions. The up (*u*) and down (*d*) conformation of the pyrazolyl rings with regard to the Csp³-H atom was established by X-ray crystallography and by ¹H-, ¹³C- and ¹⁵N-NMR in solution combined with gauge-including atomic orbitals (GIAO)/B3LYP/6-311++G(d,p) calculations. A comparison with other X-ray structures of tris-pyrazolylmethanes was carried out.

3.- C. I. Nieto, M. P. Cornago, M. P. Cabildo, D. Sanz, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, J. Elguero. (7/4) “Synthesis, structure and NMR study of fluorinated isoxazoles derived from hemi-curcuminoids”. *J. Fluorine Chem.* **2019**, *219*, 39-49, <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2018.12.012>. The purpose of this work is to prepare a series of isoxazoles bearing phenyl and 4'-hydroxy-styryl substituents at position 3 and 5; besides the phenyl group of the styryl residue bears one or two fluorine substituents. They were prepared to study their structure in the solid state and in solution by X-ray crystallography and solid-state NMR (SSNMR) for the solid state and NMR for the solution. The reaction of hydroxylamine with hemi-curcuminoid β -diketones affords two isomeric isoxazoles we have named series **a** (3-phenyl) and **b** (5-phenyl) that have been identified

and characterized. Four pairs have been prepared that in three cases bear one or two fluorine atoms. Three X-ray structures have been determined **3a**, **3b** and **5b**; **3a** crystallizes without solvent, **3b** crystallizes with a water molecule hydrogen-bonded to a phenolic OH, finally **5b** crystallizes as a solvate with a methanol molecule hydrogen-bonded to the isoxazole N atom. This hydrogen bond results in larger differences between ^{15}N chemical shifts in DMSO- d_6 solution and in the solid state. The splitting of some signals observed in Cross-Polarization Magic Angle Spinning (CPMAS) ^{13}C NMR was assigned to $^1J_{\text{CF}}$ dipolar couplings. The combined use of crystallography and SSNMR affords a complete characterization of isomeric isoxazoles, in particular the assignment of an isoxazole to **a** or to **b** series is not a trivial matter. In this work, we describe methods for the synthesis of isoxazoles bearing fluorine substituents that are promising structures for drug discovery.

4.- M. Pérez Torralba, D. Sanz, R. M. Claramunt, I. Alkorta, C. Dardonville, J. Elguero. (6/2) “The structure of fosfomycin salts in solution and in the solid state by nuclear magnetic resonance spectroscopy and DFT calculations”. *Tetrahedron*, **2018**, 74, 3937- 3942. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tet.2018.02.041> Two samples of fosfomycin salts, the calcium and the disodium ones, were used to record their NMR spectra both in solution and in the solid state. The existence of fosfomycin in a neutral and two ionized structures (mono and dianion) was considered to interpret the spectra that were solved using the GIAO calculated chemical shifts of the minimum energy conformations. Although the starting materials were dianions, the spectra in solution show the presence of monoanions.

5.- L. Infantes, J. M. Moreno, R. M. Claramunt, D. Sanz, I. Alkorta, J. Elguero. (6/4) “The structure of four thallium tris(1*H*-pyrazol-1-yl)hydroborates in the solid state by X-ray crystallography and in solution by NMR and DFT-GIAO calculations. *Inorg. Chim. Acta*, **2018**, 438, 402.-410 <https://doi.org/10.1016/j.ica.2018.08.009>. The crystal and molecular structures of four thallium tris(1*H*-pyrazol-1-yl)hydroborates have been determined by X-ray analysis and compared with those recorded in the literature. The geometry of the pyrazole ring, steric effects of the substituents at position 3, packing and other characteristics of the crystals are discussed. Density Functional Theory-Gauge Invariant Atomic Orbital (DFT-GIAO) calculations have been carried out to determine the chemical shifts of the four compounds; they have been compared with experimental values finding an agreement excellent.

6.- L. Infantes, R. M. Claramunt, D. Sanz, I. Alkorta, J. Elguero. (5/3) “The structure of two scorpionates: thallium tetrakis(3-phenyl-1*H*-pyrazol-1-yl)borate and potassium tetrakis(3-cyclopropyl-1*H*-pyrazol-1-yl)borate”. *Acta Cryst. Section C*. **2016**, C72, 1-7. DOI: doi.org/10.1107/S2053229616007385. The introduction of poly(1*H*-pyrazolyl)borate anions, better known as scorpionates, as negatively charged ligands for a great diversity of metal cations has had a tremendous influence in coordination chemistry. The structures of two salts of tetrakispyrazolylborate, namely [tetrakis(3-phenyl-1*H*-pyrazol-1-yl)borato]thallium(I), [Tl(C₃₆H₂₈BN₈)], and *catena*-poly[potassium- $[\mu_2$ -tetrakis(3-cyclopropyl-1*H*-pyrazol-1-yl)borato]], [K(C₂₄H₂₈BN₈)]_n, have been determined at 296 K in the monoclinic *P21/c* and *C2/c* space groups, respectively. In their crystal structures, the thallium salt presents discrete molecular motifs, while the potassium salt shows infinite polymeric chains. The ^{13}C and ^{15}N CPMAS (cross polarization magic angle spinning) NMR spectra of these compounds were recorded and the chemical shifts compared with theoretically calculated ones at the GIAO/B3LYP/6-311++G(d,p) level. Both techniques are complementary and mutually consistent.

7.- C. I. Nieto, M. P. Cabildo, M. P. Cornago, D. Sanz, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, J. Elguero, J. A. García, A. Lopez, D. Acuña-Castroviejo. (11/5) “Fluorination Effects on NOS Inhibitory Activity of Pyrazoles Related to Curcumin”. *Molecules*. **2015**, 20, 15643-15665. DOI: 10.3390/molecules200915643. A series of new (*E*)-3(5)-[β -(aryl)-ethenyl]-5(3)-phenyl-1*H*-pyrazoles bearing fluorine atoms at different positions of the aryl group have been synthesized starting from the corresponding β -diketones. All compounds have been characterized by elemental analysis, DSC as well as NMR (^1H , ^{13}C , ^{19}F and ^{15}N) spectroscopy in solution and in solid state. Three structures have been solved by X-ray diffraction analysis, confirming the tautomeric forms detected by solid state NMR. The *in vitro* study of their inhibitory potency and selectivity on the activity of nNOS and eNOS (calcium-calmodulin dependent) as well as iNOS (calcium-calmodulin independent) isoenzymes is presented. A qualitative structure–activity analysis allowed the establishment of a correlation between the presence / absence of different substituents with the inhibition data proving that

fluorine groups enhance the biological activity. (*E*)-3(5)-[β -(3-Fluoro-4-hydroxyphenyl)-ethenyl]-5(3)-phenyl-1*H*pyrazole (**13**), is the best inhibitor of iNOS, being also more selective towards the other two isoforms.

8.- R. M. Claramunt, C. López, D. Sanz, J. Elguero. (4/3) "Mechano Heterocyclic Chemistry: Grinding and Ball Mills". *Adv. Heterocycl. Chem.* **2014**, *112*, 117-143. DOI: 10.1016/B978-0-12-800171-4.00003-2. This review covers till 2013 the main publications dealing with the use of mechanochemistry in heterocyclic chemistry. Physical aspects, like polymorphism and cocrystals, physicochemical problems, like tautomerism and desmotropy, and pure chemical ones, like synthesis and reactivity, are discussed. The review puts special emphasis on active pharmaceutical ingredients and, in general, on biological aspects. It will become clear that the technique has the advantages of time, simplicity, cost, and lower waste. Moreover, some complex structures that are difficult to prepare in solution, can be easily obtained by using simple, solventless grinding. The conclusion of this survey is that mechanochemistry will become another green method as important as microwave ovens in chemistry, although much exciting work remains to be done, both experimental and theoretically.

C.2. Research projects and grants

Reference: CTQ2014-56833-R

Title: Identification of new chemotypes with antioxidant properties: synthesis and applications in different pathologies.

Principal investigator: Rosa M^a Claramunt Vallespí / Dionisia Sanz del Castillo. UNED

Date of start: 01/01/2015 Ending: 30/09/2018

Funding body and call for proposals: MINECO

Amount of subsidy: 98.010 €

Type of participation: Principal investigator.

Reference: CTQ2010-16122

Title: The hydrogen bond and its influence on the structure of crystals and host-guest complexes

Principal investigator: Rosa M^a Claramunt Vallespí. UNED

Date of start: 2011 Ending: 2013 extended until 2014

Funding body and call for proposals: MCINN

Amount of subsidy: 142.780 €

Type of participation: Researcher

C.3. Contracts

Scientific and technological collaboration contract in NMR.

Participants: Depto. Química Orgánica y Bio-Orgánica and Bruker Española S. A.

Responsible: D. Sanz del Castillo. Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica, UNED

Start: 01/03/2017 Ending: 2019

It started in 2003 and since then it has been renewed every 2 years doing advisory work, analysis of samples, solving structural problems, development and commissioning of experiments. Conferences. Demonstrations.

Chemical material transfer agreement

Participants: Depto. Química Orgánica y Bio-Orgánica and GLAXOSMITHKLINE investigación y desarrollo, S.L.

Responsible: Rosa M^a Claramunt Vallespí

Start: 17/10/2012, valid

C.5, C.6, C.7... (e. g., Institutional responsibilities, memberships of scientific societies...)

From 2017- Director of the Department of Química Orgánica y Bio-Orgánica, Faculty of Sciences, UNED.

Member of the Royal Spanish Society of Chemistry (RSEQ) and the Nuclear Magnetic Resonance Group (GERM). Member of Joint Research Institute-National School of Health (IMIENS-UNED).

VICENTE JOSÉ ESTEVE CANO**Publicaciones en revistas**

- [Karrooite green pigments doped with Co and Zn: Synthesis, color properties and stability in ceramic glazes](#)
Mario Ignacio Llusar Vicent, T Bermejo, Jose Eulogio Primo Gil, Carina Gargori García, Vicente José Esteve Cano, Guillermo Monrós Tomás. CERAMICS INTERNATIONAL. Num. 12. Vol. 43. pp. 9133-9144. 2017.
- [Synthesis and coloring performance of Ni-geikielite \(Ni,Mg\)TiO₃ yellow pigments: Effect of temperature, Ni-doping and synthesis method](#)
Mario Ignacio Llusar Vicent, E. García, M.T. García, Vicente José Esteve Cano, Carina Gargori García, Guillermo Monrós Tomás. JOURNAL OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY. Num. 13. Vol. 35 . pp. 3721-3734. 2015.
- [Trends in arsenic levels in PM10 and PM2.5 aerosol fractions](#)
J.R. García Aleix, J.M. Delgado Saborit, G. Verdú Martín, J.M. Amigó Descarrega, Vicente José Esteve Cano. ENVIRONMENTAL SCIENCE AND POLLUTION RESEARCH. Num. 1. Vol. 21 . pp. 695-703. 2014.
- Industria del mueble. Aplicación de la metodología simplificada de evaluación del riesgo químico por exposición a vapores orgánicos
O. Monterde Puig, Vicente José Esteve Cano. PREVENCIÓN. Num. 201. pp. 36-45. 2012.
- [Assessment of tropospheric ozone effects on citrus crops using passive samplers in a western Mediterranean area](#)
Vicente José Esteve Cano, Juana María Delgado Saborit. AGRICULTURE ECOSYSTEMS & ENVIRONMENT. Num. 1-2. Vol. 124 . pp. 147-153. 2008.
- [Field comparison of passive samplers versus UV-photometric analyser to measure surface ozone in a Mediterranean area](#)
Vicente José Esteve Cano, J.M. Delgado Saborit. JOURNAL OF ENVIRONMENTAL MONITORING. Num. 6. Vol. 9 . pp. 610-615. 2007.
- [Microstructural evolution of mullites produced from single-phase gels](#)
M.A. Kojdecki, E. Ruiz De Sola, F.J. Serrano, E. Delgado Pinar, M.M. Reventós, Vicente José Esteve Cano, J.M. Amigó Descarrega, J. Alarcón. JOURNAL OF APPLIED CRYSTALLOGRAPHY. Num. 2. Vol. 40 . pp. 260-276. 2007.
- An X-ray powder diffraction study of the microstructural evolution on heating 3:2 and 2:1 mullite single-phase gels
E. Ruiz De Sola, F.J. Serrano, F.J. Torres, M.M. Reventós, Vicente José Esteve Cano, M.A. Kojdecki, J.M. Amigó Descarrega, J. Alarcón. CRYSTAL RESEARCH AND TECHNOLOGY. Num. 41. Vol. 10 . pp. 1036-1044. 2006.
- Microstructure of crystalline phases in electrotechnical porcelains
J.M. Amigó Descarrega, F.J. Serrano, M.A. Kojdecki, J. Bastida, Vicente José Esteve Cano, M.M. Reventós. ZEITSCHRIFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE. Num. Part 2 Supp. 23. pp. 551-556. 2006. Científic.
- Apport de la diffraction des rayons X à la détermination des traceurs minéralogiques de la pollution atmosphérique particulaire d'une cimenterie
S. Bengamra, M. Oujidi, J. Bastida, Vicente José Esteve Cano. POLLUTION ATMOSPHERIQUE. Num. 192. pp. 455-463. 2006. Científic.

- Field study of diffusion collection rate coefficients of a no₂ passive sampler in a mediterranean coastal area
Juana María Delgado Saborit, Vicente José Esteve Cano. ENVIRONMENTAL MONITORING AND ASSESSMENT. Num. 120. pp. 327-345. 2006. Científic.
- Elemental and ionic analysis of pm-10 airborne particulate at a Mediterranean coastal site
M.A. Querol Balaguer, Juana María Delgado Saborit, J.M. Amigó Descarrega, Vicente José Esteve Cano. GEOPHYSICAL RESEARCH ABSTRACTS. Num. 439. Vol. 7 . 2005.
- Field study of diffusion collection rate coefficient in nitrogen dioxide passive samplers
Juana María Delgado Saborit, M.A. Querol Balaguer, J.M. Amigó Descarrega, Vicente José Esteve Cano. GEOPHYSICAL RESEARCH ABSTRACTS. Num. 438. Vol. 7 . 2005.
- Seasonal trend of nitrogen dioxide levels measured by means of passive samplers in La Plana de Castellón (Spain)
Juana María Delgado Saborit, M.A. Querol Balaguer, J.M. Amigó Descarrega, Vicente José Esteve Cano. GEOPHYSICAL RESEARCH ABSTRACTS. Num. 437. Vol. 7 . 2005.
- X-ray diffraction microstructure analysis of mullite, quartz and corundum in porcelain insulators
J.M. Amigó Descarrega, F.J. Serrano, M.A. Kojdecki, J. Bastida, Vicente José Esteve Cano, M.M. Reventós, F. Martí. JOURNAL OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY . Num. 25. pp. 1479-1486. 2005.
- X-ray powder diffraction phase analysis and thermomechanical properties of silica and alumina porcelains
J.M. Amigó Descarrega, J.V. Clausell, Vicente José Esteve Cano, Juana María Delgado Saborit, M.M. Reventós, L.E. Ochando, T. Debaerdemaeker, F. Martí. JOURNAL OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY . Num. 24. pp. 75-81. 2004.
- Trends (1993-2003) on ambient levels of lead at Castellón (Spain)
Gabriel Peris Pérez, Juana María Delgado Saborit, F. Ramos, M.A. Aparici, Vicente José Esteve Cano. JOURNAL OF AEROSOL SCIENCE . Num. 1. pp. 197-198. 2003.
- Evolution of tropospheric ozone levels measured by means of passive samplers at a mediterranean coastal area
Juana María Delgado Saborit, Vicente José Esteve Cano. GEOPHYSICAL RESEARCH ABSTRACTS. Num. 1971. Vol. 5 . pp. 1-2. 2003. Científic.
- Evolution of nox levels measured by means of passive samplers at a mediterranean coastal area
Juana María Delgado Saborit, Vicente José Esteve Cano. GEOPHYSICAL RESEARCH ABSTRACTS. Num. (5) 1971. 2003. Científic.
- Study of Ozone tropospheric levels at the Castellon area (Spain) by means of passive samplers
Juana María Delgado Saborit, Vicente José Esteve Cano. GEOPHYSICAL RESEARCH ABSTRACTS. Vol. 4 . 2002. Científic.
- Study of nox levels at the Castellon área (Spain) by means of passive samplers

- Juana María Delgado Saborit, Vicente José Esteve Cano. GEOPHYSICAL RESEARCH ABSTRACTS. Vol. 4 . 2002.
- Caracterización mineralógica de materias primas utilizadas en la fabricación de cerámicas avanzadas por métodos cuantitativos de difracción de rayos X"
M.M. Reventós, J.V. Clausell, Vicente José Esteve Cano, Juana María Delgado Saborit, L.E. Ochando, J. Rius, F. Martí, J.M. Amigó Descarrega. BOLETIN DE LA SOCIEDAD ESPANOLA DE CERAMICA Y VIDRIO. Num. Nº6-Vol.41. pp. 509-512. 2002.
 - Comparison between the results of crystal structure determined from X-ray powder and those obtained from single crystal diffraction of apatites from
L.E. Ochando, Vicente José Esteve Cano, R. Moreno, M.M. Reventós, J.M. Amigó Descarrega. ACTA GEOLOGICA HISPANICA. Num. Nº 1-2, Vol. 36. pp. 165-173. 2001.
 - Quantitative X-Ray Powder Diffraction Analysis of some Feldspars used as Raw Material in Ceramics
J.M. Amigó Descarrega, J. Bastida, Juana María Delgado Saborit, Vicente José Esteve Cano, C. Miravittles, L.E. Ochando, M.M. Reventós, J.M. Delgado Saborit, J. Rius. MATERIALS SCIENCE FORUM . Num. 378. pp. 696-701. 2001.
 - Ionic characterization of size fractionated airborne tropospheric particulate at Castellón (Spain)"
Vicente José Esteve Cano, Gabriel Peris Pérez. JOURNAL OF AEROSOL SCIENCE . Num. 31. pp. 346-348. 2000.
 - Crystal structure of aqua-ethanol-O-(6-amino-5-formyl-1,3-dimethyluracilate-benzoylhydrazone-N,N,O) copper (II) nitrate"
F. Hueso Ureña, Vicente José Esteve Cano, M.N. Moreno Carretero, A.L. Peñas Chamorro, T. Debaerdemaeker, J.M. Amigó Descarrega. ZEITSCHRIFT FUR KRISTALLOGRAPHIE . Num. NCS 1267- 243. pp. 155-156. 2000.
 - Study of the chelating capacity of nucleobase analogs with biological interest: Ab initio molecular orbital calculations and single-crystal x-ray structural study on 6-amino-5-formyl-1,3-dimethyluraci
F. Hueso Ureña, Vicente José Esteve Cano, M.N. Moreno Carretero, A.L. Peñas Chamorro, T. Peña, J.M. Amigó Descarrega, T. Debaerdemaeker. JOURNAL OF MOLECULAR MODELING. Num. 6. pp. 630-636. 2000.
 - Quantitative phase analysis of mixtures of three components using Rietveld and Rius standardless methods. Comparative results
L.E. Ochando, Vicente José Esteve Cano, Gabriel Peris Pérez, M.M. Reventós, J.M. Amigó Descarrega. CRYSTAL RESEARCH AND TECHNOLOGY . Num. 35. pp. 1183-1192. 2000.
 - Crystal structure of mer-triaqua-[6-amino-5-formyl-1,3-dimethyluracilate benzoylhydrazone-N,N',O] chromium (II) nitrate, C₁₄H₂₀CrN₇O₁₂
F. Hueso Ureña, M.N. Moreno Carretero, A.L. Peñas Chamorro, T. Debaerdemaeker, Vicente José Esteve Cano, J.M. Amigó Descarrega. ZEITSCHRIFT FUR KRISTALLOGRAPHIE . Num. Z.. Vol. 215 . pp. 519-520. 2000.
 - [Low temperature crystallised Ti-Rich NiTi shape memory alloy films for microactuators](#)

- J.L. Seguin, M. Bendahan, A. Isalgue, Vicente José Esteve Cano, H. Carchano, V. Torra. SENSORS AND ACTUATORS A-PHYSICAL . Num. 1-3. Vol. 74 . pp. 65-69. 1999. Científic.
- Synthesis and spectral studies on metal complexes with the neutral O,N,O-tridentate Schiff base 6-amino-5-formyl-1,3-dimethyluracil-benzoylhydrazone. Crystal structure of a bidimensionally hydrogen-b
Vicente José Esteve Cano. POLYHEDRON . Num. 18. pp. 2205-2210. 1999.
 - Shape memory NiTi thin films deposited at low temperature
A. Isalgue, V. Torra, J.L. Seguin, M. Bendahan, J.M. Amigó Descarrega, Vicente José Esteve Cano. MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING A-STRUCTURAL MATERIALS PROPERTIES MICROS. Num. Special Issue. Vol. 273-275 . pp. 717-721. 1999.
 - Copper(II) complexes with the N,N,O-tridentate ligand 6-amino-5-formyl-1,3-dimethyluracilato-(N6)-benzoylhydrazone: Synthesis, spectral and XRD studies
Vicente José Esteve Cano. POLYHEDRON . Num. 18. pp. 3629-3636. 1999.
 - Rietveld crystal structure refinement of tennantite, Cu(Cu_{0.48}Fe_{5.52})As₄S₁₃
L.E. Ochando, J.M. Casanova, Vicente José Esteve Cano, M.M. Reventós, J.M. Amigó Descarrega. ANALES DE QUÍMICA. Num. 6. Vol. 94 . 1998.

Libros

- El Método de Rietveld
Vicente José Esteve Cano. 2006. 2ª Edició. Científic. ISBN 8480215755. Castelló. Ed. Universitat Jaume I.
- Perspectivas de la cristalografía ante el nuevo milenio
Vicente José Esteve Cano, L.E. Ochando. 2004. ISBN 8480214503. Castellón. Ed. Universitat Jaume I.
- El método de Rietveld
Vicente José Esteve Cano. 2014. 1ª Edició. ISBN 9788480219938. Castelló. Ed. Universitat Jaume I.

Capítulos de libros

- Señalización de seguridad y salud en el trabajo
Vicente José Esteve Cano. Tratado práctico de prevención de riesgos laborales. Barcelona (Espanya). Ed. Atelier. 2023. Col·lecció Atelier Práctica Profesional. ISBN 9788419773043.
- Obligaciones de fabricantes, importadores y suministradores
Vicente José Esteve Cano. Tratado práctico de prevención de riesgos laborales. Barcelona (Espanya). Ed. Atelier. 2023. Col·lecció Atelier Práctica Profesional. ISBN 9788419773043.
- Normas técnicas
Vicente José Esteve Cano. Tratado práctico de prevención de riesgos laborales. Barcelona (Espanya). Ed. Atelier. 2023. Col·lecció Atelier Práctica Profesional. ISBN 9788419773043.
- Principios de la acción preventiva

Vicente José Esteve Cano. Tratado práctico de prevención de riesgos laborales. Barcelona (Espanya). Ed. Atelier. 2023. Col·lecció Atelier Práctica Profesional. ISBN 9788419773043.

- Inorganic pigments from wastes as secondary raw materials

Guillermo Monrós Tomás, Sara Cerro Lloria, Vicente José Esteve Cano, Mario Ignacio Llusar Vicent. Vitrogeowastes: Vitrification and Geopolymerization of Wastes for Immobilization Or Recycling. Elche. Ed. Universidad Miguel Hernández. 2019. ISBN 9788416024780.

- Estudios preliminares y diagnóstico del estado de conservación de una espada de frontón del yacimiento ibérico de "El Gatillo"(Enguera,Valencia)

I. Martínez, J.A. Madrid, Vicente José Esteve Cano. Historia de Enguera. Enguera (Valencia). Ed. Ayuntamiento de Enguera. 2008. ISBN 9788492363780.

- Special problems in the preparation of X-ray diffraction specimens

Vicente José Esteve Cano. A Practical Guide for the Preparation of Specimens for X-Ray Fluorescence and X-Ray Diffraction Analysis. New York. Ed. John Wiley & Sons. 1998. ISBN 9780471194583.

Patentes

- PALETA CMYK DE PIGMENTOS CON ALTO ÍNDICE DE REFLEXIÓN SOLAR CON CAPACIDAD FOTOCATALÍTICA

P201730455. 14-03-2018. Espanya. 2018.

Dirección de tesis

- La organización del trabajo: una aproximación preventiva a la salud laboral de las personas desde la psicología y el derecho
Autoría: Franco González, Joan. Institución: Universitat Jaume I. Fecha de lectura: 07/07/17.
- Estudio del aerosol atmosférico y su origen en la zona del cluster cerámico de Castellón
Autoría: Querol Balaguer, María Ángeles. Institución: Universitat Jaume I. Fecha de lectura: 15/07/13.
- Prevención de riesgos laborales en el transporte de mercancías peligrosas por carretera
Autoría: Trujillo Pons, Francisco. Institución: Universitat Jaume I. Fecha de lectura: 11/03/13.
- Evolución de la calidad del aire en el *cluster* cerámico de Castellón (y su relación con la actividad industrial). Origen y efectos de la contaminación por partículas en suspensión atmosférica.
Autoría: García Aleix, José Ricardo. Institución: Univ. Politécnica Valencia. Dpt. Ing. Mecánica y de Materiales. Fecha de lectura: 21-06-2012.
- Estudio de los niveles de ozono tropoférico y óxidos de nitrógeno (NOx) en el área de la Plana de Castellón.
Autoría: Delgado Saborit, Juana María. Institución: Universitat Jaume I. Fecha de lectura: 21/01/05.



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN



Cofinanciado por
la Unión Europea



AGENCIA
ESTATAL DE
INVESTIGACIÓN

Part A. PERSONAL INFORMATION		CV date	25/10/2023
First name	Aurelio		
Family name	García Csáky		
Gender (*)		Birth date	
ID number			
e-mail	csaky@ucm.es	URL Web	https://www.ucm.es/ip-1/osap-index
Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*)	0000-0002-2888-2231		

A.1. Current position

Position	Professor of Organic Chemistry (CU)		
Initial date	14/06/2011		
Institution	Universidad Complutense de Madrid (UCM)		
Department/Center	Departamento de Química Orgánica / Instituto Pluridisciplinar UCM		
Country	Spain (Madrid)	Tel. number	913943238
Key words	Organic Chemistry, Stereochemistry, Drug Design, Radiosynthesis		

A.2. Previous positions (research activity interruptions, art. 14.2.b)

Period	Position/Institution/Country
23/02/02 – 13/06/11	Profesor Titular de Universidad, UCM, Spain
30/10/96 – 22/02/02	Profesor Asociado, UCM, Spain
30/10/91 – 29/10/96	Profesor Ayudante de Facultad, UCM, Spain
28/04/90 – 29/10/91	Ayudante de Escuela Universitaria, UCM, Spain
01/09/92 – 31/08/93	Becario Postdoctoral MEC/MRT, ECPM, Francia (Estrasburgo, Prof. A. Solladié)
01/06/88 – 27/04/90	Becario Predoctoral CAM, UCM, Spain
01/12/87 – 31/05/88	Becario Predoctoral, Lab. Dr. Esteve, UCM, Spain

A.3. Education

PhD, Licensed, Graduate	University/Country	Year
Ph. D. (Organic Chemistry)	UCM, Spain (Prof. J. Plumet)	1991
Licensed in Chemistry	UCM, Spain	1987

Part B. CV SUMMARY (4965 characters, including spaces)

Contributions: 104 papers. 2214 citations. **Most relevant:** 4 *Chem. Soc. Rev.*; 1 *Angew. Chem.*; 2 *Chem. Commun.*; 10 *Org. Lett.*; 1 *Adv. Synth. Catal.*; 20 *J. Org.Chem.*; 6 *Eur. J. Org. Chem.*

Background: Doctoral studies at UCM. Stages at ECPM (Strasbourg, France, Prof. A. Solladié), and EPFL (Lausanne, Switzerland, Prof. P. Vogel), developing new aspects of stereoselective organic reactions

Independent career: His independent career as a PR began with the development of the synthesis of new metallocenes in collaboration with Repsol-Ypf (2 PETRI projects -66.999,96 and 65.652,00 €- and 6 Artículo-83 LOU projects, 2000-2009). Since 2005 (PR of 7 UCM projects and 4 MICINN National projects), his group has been interested in developing new C-C and C-N bond-forming reactions using boronic acids with and (mainly) without transition metals (underdeveloped in comparison to metal-catalyzed reactions). This research has been gathered in 3 reviews in *Chem. Soc. Rev.* and 1 in *Synthesis* (by invitation of the Editor). The compounds synthesized have led to new radiotracers for the in vivo 18F-PET detection of AD and other tauopathies (unpublished results to be patented). This research activity has been granted by ANECA (5+1 six-year research terms).



Other scientific responsibilities:

[1] Responsible, UCM group 910815 since 2007 (validated in 2017 by MINECO).

[2] UCM Responsible, Organic Synthesis and Bioevaluation Group R&D Associated Unit of CSIC (IQM, ICTP, since 2021).

National collaborations:

[1] Prof. Miguel Ángel Pozo, Preclinical Imaging Laboratory, UCM, development of new radiotracers.

[2] Prof. J. M. Pingarrón, GEBE, UCM, studies by IES and/or QCM.

[3] Prof. J. Jiménez Barbero, CIC bioGUNE, trNOESY studies.

[4] Prof. Sonsoles Martín Santamaría, CIB, calculations using LDH.

[5] Prof. Antonio Marcilla (UV), Prof. Carlos del Pozo Losada (UV), and Drs. Borja Ibáñez / Eduardo Oliver (CNIO): Synthesis of imidazo[1.2-*a*]pyridine derivatives with antiinflammatory activity.

International collaborations:

[1] Prof. Patricia Melnyk, Univ. Lille, France, co-director of the Ph. D. Thesis of Dr. A. Rincón.

[2] Prof. Dr. K. Lalatsa, School of Pharmacy and Biomedical Sciences, University of Portsmouth, UK, co-director of the Ph. D. Thesis of Dr. M. G. Baquero.

[3] Prof. J. Pietzch, HZDR Dresden, Germany, collaboration in radiosynthesis of COX tracers.

Contributions to society:

Six-year Transfer of Knowledge and Innovation Terms: 1 (2000-05).

Previous collaborations as PR:

[1] **Article 83 LOU:** Repsol-Ypf, 1999-2008 (6 projects).

[2] **PETRI Projects:** Repsol-YPF, PTR1995-0678-OP (2003-2006), 66.999,96 € and PET2006_0618 (2007-2009), 65.652,00 €.

Current collaborations as PR : Artículo 83 LOU, A4Cell (2021-22).

Contributions to the training of young researchers.

Five-year Teaching Terms: 6

Ph.D. Thesis supervised: 14 (5 in the last 10 years -4 female-).

EOG supervised: 20 (11 in the last 10 years -4 female-).

EOM supervised: 13 (10 in the last 10 years -5 female-).

Lectures on organic chemistry at Saint Louis University (Madrid, 2003–05), and on radiosynthesis in the Interuniversity Master in Drug Discovery (CEU, UCM, UAH), at the Uniwersytet Im Adam Mickiewicza (Poznan, Poland), and at the Universidad de Chile (Santiago de Chile, Chile).

co-Autor of *Técnicas Experimentales en Síntesis Orgánica*, ISBN: 9788477386056 (2012, 2nd-Ed).

Responsible (2) and participant (6) in innovation projects related to the EHEA.

Awarded Excellence in Teaching diploma (UCM, DOCENTIA program), 2015/16 and 2018-21.

Recent Ph.D. Theses (2022 – 2012):

[1] **González, A. M.** MICINN FPU grant. In progress (deposited December 2021, UCM, Ph.D. program with quality mention of the Department of Organic Chemistry).

[2] **Baquero, M. G.** La Caixa Grant. UCM, 30/10/20. *Sobresaliente cum laude por unanimidad*. European Mention. Dr. Baquero is currently researcher at Concept Life Sciences, UK.

[3] **Ortega, V.** Alfonso Casanova grant, IT-PET. UCM, 08/11/19. *Sobresaliente cum laude por unanimidad*. European Mention. Dr. Ortega is currently a researcher at Curium Molecular Spain, specialized in radiosynthesis.

[4] **Rincón, A.** UCM Grant. UCM, 15/01/16. *Sobresaliente cum laude por unanimidad*. European Mention. Dr. Rincón is currently a researcher at HC-Clover.

[5] **Ortega, A.** Universidad de Antofagasta Grant, Chile. UCM, 08/07/2015. *Sobresaliente cum laude por unanimidad*. Dr. Ortega is currently professor at the Universidad de Antofagasta (Chile).

[6] **Roscales, S.** MICINN PFU grant. UCM, 26/01/15. *Sobresaliente cum laude por unanimidad*. European Mention. Extraordinary Doctorate Award. Dr. Roscales is currently Associate Professor at Universidad Europea de Madrid.



Other relevant contributions.

Institutional responsibilities: Director of Instituto Pluridisciplinar UCM from 01/10/12-20/12/220.

Other activities: Member of the RSEQ; Guest Editor of the *Metal-Free Organocatalysis*, special issue of *Catalysts* (2016, ISSN 2073-4344); Referee of JCR journals (ACS, Elsevier, RCS, Wiley).

Part C. RELEVANT MERITS (sorted by typology)

C.1. Publications (2022-2012).

C1a. Papers:

[1] *Searching for Highly Active Cobalt Catalysts Bearing Schiff Base Ligands for Markovnikov-Selective Hydrosilylation of Alkynes with Tertiary Silanes.* Skrodzki, M.; Ortega Garrido, V.; Csáky, A. G.; Pawluć, P. *Journal of Catalysis*, **2022**, 411, 116-121.

[2] *Synthesis of Ketones by C-H Functionalization of Aldehydes with Boronic Acids under Transition-Metal-Free Conditions.* Roscales, S.; Csáky, A. G. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 8728-32.

[3] *Transition-Metal-Free Three-Component Synthesis of Tertiary Aryl Amines from Nitro Compounds, Boronic Acids, and Trialkyl Phosphites.* Roscales, S.; Csáky, A. G. *Adv. Synth. Catal.* **2020**, 362, 111-117.

[4] *Synthesis of di(hetero)arylamines from nitrosoarenes and boronic acids: a general, mild, and transition-metal-free coupling.* Roscales, S.; Csáky, A. G. *Org. Lett.* **2018**, 20, 1667-71.

[5] *Transition-metal-free stereocomplementary cross-coupling of diols with boronic acids as nucleophiles.* Ortega, V.; del Castillo, E.; Csáky, A. G. *Org. Lett.* **2017**, 19, 6236-39. Cited in *Synfacts* **2018**, 14, 0192.

[6] *Transition-metal free reactions of boronic acids: cascade addition – ring-opening of furans towards functionalized γ -ketoaldehydes.* Roscales, S.; Csáky, A. G. *Chem. Commun.* **2016**, 52, 3018-21. Cited in *Synfacts* **2016**, 12, 0402.

[7] *Transition-metal-free direct anti-carboboration of alkynes with boronic acids to produce alkenylheteroarenes.* Roscales, S.; Csáky, A. G. *Org. Lett.* **2015**, 17, 1605-08.

[8] *Metal-free ring-opening of epoxides with potassium trifluoroborates.* Roscales, S.; Csáky, A. G. *Chem. Commun.* **2014**, 50, 454-456.

[9] *Trifluoroacetic anhydride promoted tandem conjugate addition of boronic acids/acetal ring opening.* Roscales, S.; Csáky, A. G. *Org. Lett.* **2012**, 14, 1187-89.

C1b. Reviews:

[1] *How to make C–N bonds using boronic acids and their derivatives without transition metals.* Roscales, Silvia; Csáky, Aurelio G. *Chem. Soc. Rev.* **2020**, 49, 5159-77.

[2] *Transition-metal-free C-C bond forming reactions of aryl, alkenyl and alkynylboronic acids and their derivatives.* Roscales, S.; Csáky, A. G. *Chem. Soc. Rev.* **2014**, 43, 8215-25.

C.2. Congresses (2022-2012).

[1] *Transition-metal-free reductive coupling of an ^{18}F -labeled nitro-arene with boronic acids as a potential access to ^{18}F -labeled fenamates.* Laube, M.; Roscales, S.; Pietzsch, J.; Csáky, A. G., eSRS 2021 Virtual Meeting, Society of Radiopharmaceutical Sciences. Póster + short explainer video (3 min), 17-19/05/21.

[2] *Development of New Transition-Metal-Free C-N Bond-Forming Reactions of Boronic Acids: Synthesis of Amines.* Roscales, S.; Csáky, A. G. XXXVII Biennial Meeting of the RSEQ. Oral Communication. San Sebastián (España), 26-30/05/19.

[3] *Development of new ^{18}F -PET radiotracers for in vivo diagnosis of tauopathies. Synthesis of new candidates and SPR affinity studies.* Baquero Gálvez, M. G.; González Fuente, A. M.; Sánchez-Sancho, F.; Csáky, A. G. XXVII Biennial Meeting in Organic Chemistry. Poster P-124. Santiago de Compostela (España), 20-22/06/18.



[4] *Development of New Transition-Metal-Free C-N and C-C Bond-Forming Reactions of Boronic Acids.* Roscales, S.; Ortega, V., Sánchez-Sancho, F.; Csáky, A. G. XXVII Biennial Meeting in Organic Chemistry. Poster FP-4. Santiago de Compostela (España), Fecha: 20-22/06/18.

C.3. Research projects (2022-2012).

[1] **MICINN CTQ2010-16170**, 01/01/11-31/12/13, *New catalytic stereoselective synthesis methods based on the use of boronic acids. Evaluation of the neuroprotective activity of the resulting products.* Type of Participation: Responsible. Financing: 62.000,00 €.

[2] **MINECO, CTQ2014-52213-R**, 01/01/15-31/12/18, *Synthesis and development of PET-selective radiotracers for tau protein: in vivo diagnosis of Alzheimer's disease and other tauopathies.* Type of Participation: Responsible. Financing: 96.000,00 €.

[3] **MICIEU, 2018-RTI2018-096520-B-I00**, 01/01/19–30/09/22, *Oxindole derivatives as selective tau ligands. New reactions of boronic acids in the absence of transition metals.* Type of Participation: Responsible. Financing: 113.861,00 €.

[4] **MICINN, PID2021-125024NB-I00**, *Desarrollo de nuevos inhibidores de TFG β para el tratamiento de la fibrosis y la inflamación. Aplicación al diseño de sondas fluorescentes para ROS.* Type of Participation: Responsible. Financing: 133.100,00 €.

C.4. Contracts, technological or transfer merits.

Number of six-year Transfer of Knowledge and Innovation Terms: 01 (2000-05).

Current Article 83 LOU contracts:

[1] *Consultancy on R+D+i activity in positron emission tomography.* Contract 331-2006, 01/01/19-31/12/22. Type of Participation: Consultor. **Entity: Curium Pharma Spain.** PR: Prof. Miguel Ángel Pozo García.

[2] *Functionalization of fluorescent probes on silicon surfaces.* Contract 518-2021, 01/01/22-31/12/22. Type of Participation: Principal Researcher. **Entity: Arrays for Cell (A4Cell).** Financing: 20.000,00 €.

[3] *Development of modified fluorescent probes.* CSIC technological support (service provision) contract, 01/01/22-31/12/22, 14.280 €. Type of participation: Researcher. **Entity: Arrays for Cell (A4Cell).** PR: Dr. F. Sánchez-Sancho. Financing: 20.000,00 €.

Current Patent Applications:

Synthesis of imidazo[1.2-a]pyridine derivatives with antiinflammatory activity. Sánchez-Sancho, F.; Csáky, A. G.; del Pozo, C; del Pozo, J.; Marcilla, A.; Ibáñez Cabeza, B.; Oliver, E. Cumella, J. M.; Roscales, S. In process for patent application (OTRI, UV).

Fecha del CVA	24/10/2023
---------------	------------

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre *	Marta		
Apellidos *	Pérez Torralba		
Sexo *		Fecha de Nacimiento *	
DNI/NIE/Pasaporte *		Teléfono *	913987332
URL Web			
Dirección Email	mtaperez@ccia.uned.es		
Identificador científico	Open Researcher and Contributor ID (ORCID) *	0000-0003-0563-8153	
	Researcher ID	A-5789-2012	
	Scopus Author ID		

* Obligatorio

A.1. Situación profesional actual

Puesto	Profesor Titular Universidad		
Fecha inicio	2018		
Organismo / Institución	Universidad Nacional de Educación a Distancia		
Departamento / Centro	Química Orgánica y Bio-Orgánica / Facultad de Ciencias		
País		Teléfono	
Palabras clave			

A.2. Situación profesional anterior

Periodo	Puesto / Institución / País
2010 - 2018	Profesor Contratado Doctor / Universidad Nacional de Educación a Distancia
2008 -	Profesora Ayudante Doctora / Universidad Nacional de Educación a Distancia / España
2007 -	Personal Docente, Investigador o Técnico / Universidad Nacional de Educación a Distancia / España
2004 -	Profesora Ayudante de Prácticas / Universidad Nacional de Educación a Distancia
2003 -	Personal Docente, Investigador o Técnico / Universidad Nacional de Educación a Distancia / España
2003 -	Investigadora-Titulada Superior / Fundación General de la Universidad de Alcalá de Henares / España
2003 -	Colaboradora / Universidad de Alcalá de Henares / España
2003 -	Investigadora / Universidad Nacional de Educación a Distancia / España
2002 -	Becaria / Universidad Nacional de Educación a Distancia / España
1999 -	Profesora Tutora / Universidad Nacional de Educación a Distancia
1999 -	Becaria / University of Vienna / Austria
1998 -	Profesora Ayudante de Prácticas / Universidad Nacional de Educación a Distancia / España
1998 -	Becaria / Universidad Nacional de Educación a Distancia / España
1997 -	Becaria / CSIC / España

A.3. Formación académica

Grado/Master/Tesis	Universidad / País	Año
Química	Universidad Nacional de Educación a Distancia / España	2002
Licenciado en Ciencias Sección Químicas	Alcalá de Henares / España	1997

A.4. Indicadores generales de calidad de la producción científica

Sexenios de investigación: 3 sexenios de los periodos comprendidos entre los años 1998-2003, 2004-2009 y 2010-2015 (ambos inclusive) Citas totales: 820 Publicaciones totales en primer cuartil (Q1): 15 Índice h: 17

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Los estudios de la Licenciatura en Ciencias Químicas los realicé en la Universidad de Alcalá de Henares.

En el Instituto de Química Orgánica del CSIC, donde comencé mi tesina de licenciatura bajo la dirección de la Dra. Cristina Vicent, adquirí toda la formación necesaria para desenvolverme en el laboratorio. Antes de poder finalizar este trabajo me otorgaron una beca del MEC(FPI) para realizar la Tesis Doctoral en la UNED bajo la dirección de las Dras. Rosa M^a Claramunt y Dionisia Sanz en el Dpto. de Química Orgánica y Biología; en el 2002 defendí la Tesis Doctoral titulada "Transferencias Intra- e Intermoleculares de Protón en Sistemas Conjugados", obteniendo la máxima calificación: Apto Cum Laude y con la mención de Doctora Europea.

Durante el período de realización de la Tesis Doctoral fui becaria del proyecto de investigación N^o PB96-0001-CO3 "Ingeniería de Cristales: Utilización de puentes de hidrógeno y otras interacciones intermoleculares para el diseño de cristales y la predicción del empaquetamiento".

En el período de realización de la Tesis realicé una estancia de tres meses en la Universidad de Farmacia de Viena, con el Prof. Dr. Wolfgang Holzer, dentro de proyecto "Pyrazolones as educts for the construction of condensed heterocyclic systems" que también me supuso un gran aporte científico y personal. También en el período de Tesis trabajé en colaboración con las Universidades de Berlín (Prof. Dr. H.-H. Limbach) y de Lyon (Prof. Dr. Lyndon Emsley).

Al obtener el título de Doctora me trasladé a la Facultad de Farmacia de la Universidad de Alcalá de Henares al Dpto. de Química Orgánica donde estuve trabajando como investigadora para los laboratorios farmacéuticos Almirall-Prodesframa en el proyecto "Chemochine Receptors Antagonists CCR1", bajo la supervisión del Prof. Dr. Julio Álvarez-Builla, experiencia que me sirvió para conocer la metodología empleada en la industria farmacéutica.

Al finalizar este período regresé a la UNED al Dpto. de Química Orgánica y Bio-Orgánica, ya que me concedieron un contrato postdoctoral de cuatro años para trabajar en el proyecto de investigación "Síntesis, estudio y reconocimiento moléculas de benzazoles por la NOS" asociado a los proyectos BQU2000-0252 y BQU2003-00976.

Cuando finalizaron estos cuatro años, la UNED me contrató un año más como PDI dentro del proyecto de investigación "Reconocimiento molecular: aplicaciones a sistemas bioorgánicos". En este periodo comencé la docencia de la asignatura de Reciclado y Tratamiento de Residuos de la Licenciatura en Ciencias Ambientales.

Antes de que finalizase el contrato mencionado anteriormente, la UNED a finales de 2008, me contrató como Profesora Ayudante Doctora (evaluación positiva de la ANECA en febrero de 2004) donde seguí realizando mis tareas como investigadora dentro del proyecto de investigación asignado por el ministerio al Dpto. de Química Orgánica y Bio-Orgánica

En mayo de 2010 cambié a la categoría de Profesora Contratada Doctora (evaluación positiva de la ANECA en septiembre de 2006).

En octubre del 2012 obtuve la Acreditación de Profesores Titulares de Universidad.

Mi labor investigadora durante todos estos años me ha permitido presentar los resultados de investigación en numerosos congresos y la publicación de numerosos artículos en revistas

científicas de alto índice de impacto. Fruto de ello el Rector de la UNED, por asesoramiento del CNEAI, me ha concedido una valoración positiva de tres tramos de seis años de investigación.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES

C.1. Publicaciones

AC: Autor de correspondencia; (nº x / nº y): posición firma solicitante / total autores. Si aplica, indique el número de citaciones

- 1 **Artículo científico.** Ortíz de Zárate, Ana; Pérez-Torrallba, Marta; Bonet Isidro, Iñigo; et al; Lavandera, José Luis. 2021. 1,5-Benzodiazepin-2(3H)-ones: In Vitro Evaluation as Antiparkinsonian Agents. *Antioxidants*. 10-10. ISSN 2076-3921.
- 2 **Artículo científico.** Marín-Luna, Marta; Claramunt, Rosa M.; López, Concepción; Pérez-Torrallba, Marta; Sanz, Dionisia; Reviriego, Felipe; Alkorta, Ibon; Elguero, José. 2020. A GIPAW versus GIAO-ZORA-SO study of ¹³C and ¹⁵N CPMAS NMR chemical shifts of aromatic and heterocyclic bromo derivatives. *Solid State Nuclear Magnetic Resonance*. 108, pp.101676-101676. ISSN 0926-2040.
- 3 **Artículo científico.** Núñez Alonso, David; Pérez-Torrallba, Marta; Claramunt, Rosa M.; Torralba, M. Carmen; Delgado-Martínez, Patricia; Alkorta, Ibon; Elguero, José; Roussel, Christian. 2020. Regiospecific Synthesis and Structural Studies of 3,5-Dihydro-4H-pyrido[2,3-b][1,4]diazepin-4-ones and Comparison with 1,3-Dihydro-2H-benzo[b][1,4]diazepin-2-ones. *ACS Omega*. 5-39, pp.25408-25422.
- 4 **Artículo científico.** Webber, Amy L.; Yates, Jonathan R.; Zilka, Miri; et al; Brown, Steven P. 2020. Weak Intermolecular CH...N Hydrogen Bonding: Determination of ¹³C-¹⁵N Hydrogen-Bond Mediated J Couplings by Solid-State NMR Spectroscopy and First-Principles Calculations. *The Journal of Physical Chemistry A*. 124-3, pp.560-572.
- 5 **Artículo científico.** {Pérez Torralba}, Marta; Sanz, Dionisia; Claramunt, Rosa M.; Alkorta, Ibon; Dardonville, Christophe; Elguero, José. 2018. The structure of fosfomycin salts in solution and in the solid state by nuclear magnetic resonance spectroscopy and DFT calculations. *Tetrahedron*. 74-29, pp.3937-3942. ISSN 0040-4020.
- 6 **Artículo científico.** Olga Martín; Marta Pérez-Torrallba; M. Ángeles García; Rosa M. Claramunt; M. Carmen Torralba; M. Rosario Torres; Ibon Alkorta; José Elguero. 2016. Static and Dynamic Properties of Fluorinated 4-Aryl-1,5-Benzodiazepinones. *CHEMISTRY SELECT*. Wiley Online Library. 4, pp.861-870. ISSN 2365-6549.
- 7 **Artículo científico.** Ibon Alkorta; José Elguero; Marta Pérez-Torrallba; Concepción López; Rosa M. Claramunt. 2015. A theoretical and experimental study of the NMR spectra of 4,5,6,7-tetrafluorobenzazoles with special stress on PCM calculations of chemical shifts. *MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY*. Wiley Online Library. 53, pp.353-362. ISSN 0749-1581.
- 8 **Artículo científico.** Claramunt, Rosa M; P{é}rez-Torrallba, Marta; Garc{\'i}a, M. {Á}ngeles; L{ó}pez, Concepci{ó}n; Torralba, M. Carmen; Torres, M. Rosario; Alkorta, Ibon; Elguero, Jos{é}. 2014. Intermolecular Hydrogen and Halogen Bonds in Fluorinated Benzimidazoles. *Acta Crystallographica Section A*. 70-a1, pp.C643-C643.
- 9 **Artículo científico.** M. Pérez-Torrallba; M. A. García; C. López; M. C. Torralba; M. R. Torres; R. M. Claramunt; J. Elguero. 2014. Structural Investigation of Weak Intermolecular Interactions (Hydrogen and Halogen Bonds) in Fluorine-Substituted Benzimidazoles. *Crystal Growth & Design*. ACS Publications. 14, pp.3499-3509.
- 10 **Artículo científico.** Rosa María Tejedor; Santiago Uriel; Sara Graus; et al; José Elguero. 2013. A Facile Method to Determine the Absolute Structure of Achiral Molecules: Supramolecular-Tilt Structures. *Chemistry A European Journal*. Wiley. 19, pp.6044-6051. ISSN 0947-6539.
- 11 **Artículo científico.** Marta Pérez-Torrallba; Rosa M. Claramunt; M. Ángeles García; Concepción López; M. Carmen Torralba; M. Rosario Torres; Ibon Alkorta; José Elguero. 2013. Structure of 1,5-benzodiazepinones in the solid state and in solution: Effect of the fluorination in the six-membered ring. *Beilstein Journal of Organic Chemistry*. 9, pp.2156-2167. ISSN 1860-5397.

- 12 Artículo científico.** J. Elguero; I. Alkorta; R. M. Claramunt; et al; D. Sanz. 2013. Structure of NH-benzazoles (1H-benzimidazoles, 1H- and 2H-indazoles, 1H and 2H-benzotriazoles). Chemistry of Heterocyclic Compounds. Springer Science. 49, pp.177-202. ISSN 0009-3122.
- 13 Libro o monografía científica.** Rosa M^a Claramunt Vallespí; M^a de los Ángeles Farrán Morales; Concepción López García; Marta Pérez Torralba; Dolores Santa María Gutiérrez. 2013. Química Bioorgánica y Productos Naturales. UNED. pp.1-356. ISBN 978-84-362-6624-5.

C.3. Proyectos y Contratos

- 1 Proyecto.** New PhotoActive hydrazone biobased Materials to promote Sustainable Industrial Applications. M^a de los Ángeles Farrán Morales. (Universidad Nacional de Educación a Distancia). 01/07/2022-30/06/2024. 4.000 €.
- 2 Proyecto.** CTQ2014-56833-R, Identificación de nuevos quimiotipos con propiedades antioxidantes: síntesis y aplicaciones en diferentes patologías. Ministerio de Economía y Competitividad. CLARAMUNT VALLESPI ROSA M. (UNED, CEU). Desde 01/01/2015. 98.010 €. Otros.
- 3 Proyecto.** Acuerdo de transferencia de material químico. GlaxoSmithKline Investigación y Desarrollo, S.L.. CLARAMUNT VALLESPI ROSA M. (Dpto. de Química Orgánica y Bio-Orgánica). Desde 17/10/2012. 0 €. Otros.
- 4 Proyecto.** CTQ2010-16122 (subprograma BQU), El enlace de hidrógeno y su influencia en la estructura de los cristales y los complejos anfitrión-huésped. Ministerio de Ciencia e Innovación. CLARAMUNT VALLESPI ROSA M. (Dpto. de Química Orgánica y Bio-Orgánica (UNED)). Desde 11/11/2010. 142.780 €. Otros.
- 5 Proyecto.** FCT-09-0682, Festival "Ciencia para la juventud en la UNED". Fundación Española Ciencia y Tecnología. FAIREN LE LAY VICTOR ALBERTO. (Universidad Nacional de Educación a Distancia). Desde 01/01/2009. 20.000 €. Otros.
- 6 Proyecto.** 026145, Measurement of intermolecular spin-spin coupling constants across hydrogen bonds in crystals. European Network of Research Infrastructures. CLARAMUNT VALLESPI ROSA M. (Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica (UNED) y Centre de RMN, Université de Lyon). Desde 01/01/2008. 4.000 €. Otros.
- 7 Proyecto.** CTQ2007-62113, Reconocimiento molecular. Aplicaciones de sistemas bioorgánicos y al desarrollo de inhibidores NOS. Ministerio de Ciencia e Innovación. CLARAMUNT VALLESPI ROSA M. (Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica (UNED)). Desde 01/10/2007. 193.600 €. Otros.
- 8 Proyecto.** CTQ2006-02586, Moléculas bioorgánicas: Diseño, síntesis, estructura, dinámica y evaluación. Ministerio de Educación y Ciencia. CLARAMUNT VALLESPI ROSA M. (Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica (UNED)). Desde 01/10/2006. 21.780 €. Otros.
- 9 Proyecto.** FEDER UNED05-33-002, Ingeniería de cristales. Diseño de sólidos orgánicos. Biomoléculas. FEDER. CLARAMUNT VALLESPI ROSA M. (Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica (UNED)). Desde 24/06/2005. 118.668 €. Otros.
- 10 Proyecto.** GR/S47403/01, A New Probe of Fundamental Weak Hydrogen Bonds: Solid-State NMR. Engineering and Physical Sciences Research Council (EPSRC). CLARAMUNT VALLESPI ROSA M. (Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica, UNED y Dept. Physics, University of Warwick). Desde 01/04/2004. 179.700,91 €. Otros.
- 11 Proyecto.** BQU2003-00976, Estructura y dinámica de compuestos bioactivos. Ministerio de Ciencia y Tecnología. CLARAMUNT VALLESPI ROSA M. (Dpto. Química Orgánica y Biología (UNED)). Desde 15/11/2003. 228.700 €. Otros.
- 12 Proyecto.** UNED, Plan promoción investigación, Flavoquinonas en estado sólido: análisis, estructura y función. Universidad Nacional de Educación a Distancia. LOPEZ GARCIA CONCEPCION. (Dpto. Química Orgánica y Biología (UNED)). Desde 01/03/2003. 5.000 €. Otros.
- 13 Proyecto.** BQU2000-0252, Biomoléculas en estado sólido: estructura, interacciones no covalentes y transferencia de hidrógeno. Ministerio de Educación y Ciencia. CLARAMUNT VALLESPI ROSA M. (Dpto. Química Orgánica y Biología (UNED), Instituto de Química Médica (CSIC)). Desde 19/12/2000. 195.208,73 €. Otros.

- 14 Proyecto.** 2001V/PROYT/13-I+D (plan de promoción de la investigación en la UNED 2000), El fosfato de piridoxal, puente entre la química heterocíclica y la química biológica. Universidad Nacional de Educación a Distancia. SANZ DEL CASTILLO DIONISIA. (Dpto. de Química Orgánica y Biología). Desde 01/01/2000. 4.800 €. Otros.
- 15 Proyecto.** DGES. Proyecto N° PB 96-0001-C03-01, Ingeniería de cristales: Utilización de puentes de hidrógeno y otras interacciones intermoleculares para el diseño de cristales y la predicción del empaquetamiento. Ministerio de Educación y Ciencia. CLARAMUNT VALLESPI ROSA M. (Dpto. Química Orgánica y Biología (UNED), Inst. Química-Física (CSIC), Inst. Química Médica (CSIC)). Desde 01/10/1997. 120.202,42 €. Otros.
- 16 Contrato.** Convenio de colaboración entre la UNED y Bruker Española Desde 01/03/2017.
- 17 Contrato.** Convenio de colaboración entre la UNED y Bruker Española 01/12/2015-01/12/2017.
- 18 Contrato.** Convenio de colaboración entre la UNED y Bruker Española 24/10/2013-24/10/2015.
- 19 Contrato.** Convenio de colaboración entre la UNED y GLAXOSMITHKLINE Desde 17/10/2012.
- 20 Contrato.** Convenio de colaboración entre la UNED y Bruker Española 27/09/2011-27/09/2013.
- 21 Contrato.** Síntesis de Librerías de Heterociclos Funcionalizados 28/02/2003-28/11/2003.



Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA 20/07/2022

Nombre y apellidos	Concepción López García		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	K-7966-2014	
	Código Orcid	0000-0002-2343-902X	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad Nacional de Educación a Distancia		
Dpto./Centro	Química Orgánica y Bio-Orgánica / Facultad de Ciencias		
Dirección	Carretera de Las Rozas al Escorial Km 5/ 28232 Las Rozas-Madrid		
Teléfono	91-3987327	Correo electrónico	clopez@ccia.uned.es
Categoría profesional	Catedrática de Universidad	Fecha inicio	04/01/2011
Espec. cód. UNESCO	2306, 230610, 230618, 23109, 239001, 2307		
Palabras clave	Síntesis orgánica heterocíclica, reconocimiento molecular: aplicaciones a sistemas bioorgánicos y al desarrollo de inhibidores NOS, estrés oxidativo, neuroprotección, neuroinflamación. RMN en disolución y en estado sólido, interacciones no covalentes y enlace de hidrógeno.		

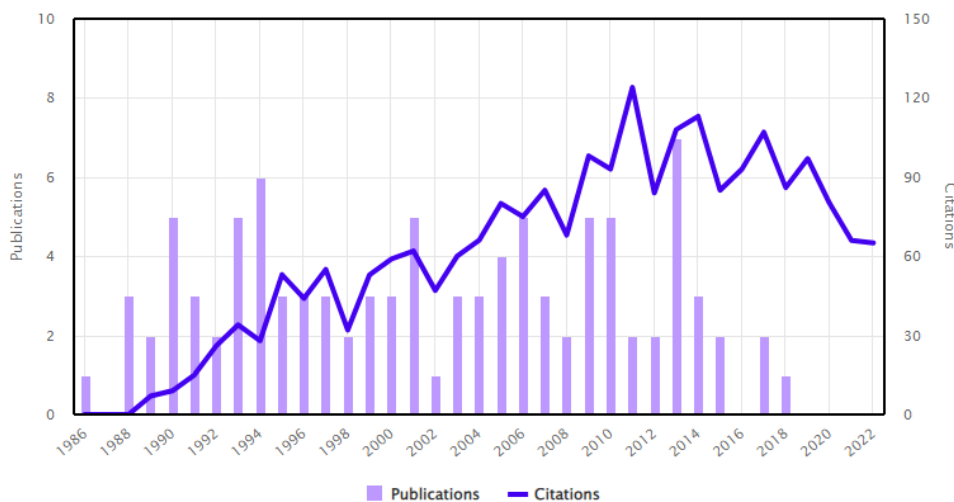
A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciada en Ciencias Químicas	Universidad Autónoma de Madrid	1983
Grado de Licenciada	Universidad Autónoma de Madrid	1983
Doctora en Ciencias (Sección Químicas)	Universidad Nacional de Educación a Distancia	1990

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica

- Sexenios de investigación: 5 sexenios evaluados positivamente.
 - Número de artículos: 99
 - Artículos con citas: 99
 - Índice-h: 27
- ResearchID

Times Cited and Publications Over Time





Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Disfruté de una beca FPI de la CAM para la realización de la Tesis Doctoral: *Síntesis y estudio de las propiedades fisicoquímicas y reactividad de poliazolilmetanos, poliazolilboratos y sus complejos metálicos con Rodio (I) e Iridio (I)* (dirigida por la Dra. Rosa M. Claramunt en los laboratorios del Instituto de Química Médica del CSIC) que fue presentada en la UNED, en junio de 1990, y calificada con Sobresaliente *Cum laude* y Premio Extraordinario de Doctorado. Trabajé durante 5 meses en la empresa Pharmamar en la instalación del equipo de RMN y me incorporé a la UNED a tiempo completo primero como Profesora Ayudante L.R.U, Profesora Titular y desde diciembre de 2010 hasta la actualidad como Catedrática de Química Orgánica. En mayo de 1992, recibí una ayuda de la Comunidad de Madrid para realizar una estancia en Freie Universität de Berlín en el grupo del Profesor H.-H. Limbach, de reconocido prestigio en el campo de la espectroscopia de ^{15}N RMN. Durante estos años he compaginado la labor docente, investigadora y de gestión (Vicedecana de Calidad y C. Químicas 2010-2014) solo interrumpida por dos bajas por maternidad.

Las principales líneas de investigación son: estructura y dinámica de las moléculas orgánicas mediante RMN multinuclear (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{31}P , ^{19}F , ^{11}B) en disolución y en estado sólido. Estudio de interacciones no covalentes, esencialmente el enlace de hidrógeno, responsables de la estructura y estabilidad de los agregados supramoleculares formados por moléculas orgánicas de pequeño o moderado tamaño en procesos de autoensamblado en estado sólido. Hace ya unos años el grupo de la UNED, Sistemas Supramoleculares BioOrgánicos, decidió avanzar en una dirección que se enmarca en las áreas de la química bioorgánica y de la química médica basadas ambas en la química supramolecular; y sin perder la identidad estructural, heterocíclica y orgánica-física que habíamos desarrollado durante 20 años, abordamos la búsqueda de nuevos heterociclos como inhibidores selectivos de la sintasa del óxido nítrico, introduciendo átomos de flúor en estos compuestos con el fin de incrementar y extender sus propiedades biológicas. Durante los tres últimos años estamos dirigiendo el interés y objetivo en el desarrollo de quimiotipos con propiedades antioxidantes robustas y con elevado perfil neuroprotector.

La combinación del conocimiento obtenido por RMN multinuclear en estado sólido con la información extraída en disolución, unida a nuestra experiencia en química heterocíclica, supramolecular y mecanoquímica, nos permite abordar el estudio de problemas estáticos (polimorfismo, desmotropía, cocristales, solvatos) y dinámicos (transferencia protónica, tautomería, isomería conformacional, atropoisomería), todos ellos son aspectos de gran relevancia para las industrias farmacéutica y de nuevos materiales.

He participado en una veintena de proyectos de investigación subvencionados -en dos de ellos como investigadora responsable-, en contratos de I+D con Empresas y colaboro con diferentes grupos de Investigación tanto de centros nacionales como internacionales. He dirigido o co-dirigido, varios trabajos de investigación, trabajos Fin de Máster y dos tesis doctorales. Soy autora de varios capítulos de libros y monografías docentes, varios de ellos premiados por el Consejo Social de la UNED, así como de 99 publicaciones en revistas internacionales del JCR y más de 50 actas de congresos, nacionales e internacionales.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones

- Rosa M. Claramunt, Concepción López, Dionisia Sanz; José Elguero, Ibon Alkorta. Determination of the tautomerism of albendazole desmotropes using solution and solid state NMR together with DFT theoretical calculations, both energies and chemical shifts. *J. Mol. Struct.*, **2022**, 1261,132883, <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.132883>.
- Ana Ortíz de Zárate, Marta Pérez-Torralba, Iñigo Bonet Isidro, Concepción López, Rosa M Claramunt, Diana Martínez-Casanova, Isabel Sánchez-Vera, Jesús Jiménez-González, José Luis Lavandera: 1,5-Benzodiazepin-2(3H)-ones: In Vitro Evaluation as Antiparkinsonian Agents, *Antioxidants*, **2021**, 10, 1584. doi: 10.3390/antiox10101584.



- Marta Marín-Luna, Rosa M. Claramunt, Concepción López, Marta Pérez-Torralba, Dionisia Sanz, Felipe Reviriego, Ibon Alkorta, José Elguero. A GIPAW versus GIAO-ZORA-SO study of ^{13}C and ^{15}N CPMAS NMR chemical shifts of aromatic and heterocyclic bromo derivatives. *Solid State Nucl. Magn. Reson.* **108**, **2020**, 101676, <https://doi.org/10.1016/j.ssnmr.2020.101676>.
- Vera L.M. Silva, Artur M.S. Silva, Rosa M. Claramunt, Concepción López, Dionisia Sanz, Lourdes Infantes, Ángela Martínez López, Felipe Reviriego, Ibon Alkorta, José Elguero. A structural study of new tetrakis(1*H*-pyrazol-1-yl)methanes. *Tetrahedron*. **2019**, *75*, 130690. <https://doi.org/10.1016/j.tet.2019.130690>
- Carlos Romero Muñiz, Denís Paredes-Roibás, Concepción López, Antonio Hernanz, José María Gavira-Vallejo. Assignment of the Raman spectrum of benzylic amide [2]catenane: Raman microscopy experiments and first-principles calculations, *J. Phys. Chem. C*, **2018**, *122*, 18102-18109. IP: 4.484; DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b04904.
- Diana García-Pérez, Concepción López, Rosa M. Claramunt, Ibon Alkorta, José Elguero. ^{19}F -NMR Diastereotopic Signals in Two *N*-CHF₂ Derivatives of (4*S*,7*R*)-7,8,8-Trimethyl 4,5,6,7-tetrahydro-4,7-methano-2*H*-indazole, *Molecules*, **2017**, *22*(11), 1-12. IP: 2.861 ISSN 1420-3049 DOI: 10.3390/molecules22112003
- Ibon Alkorta, Rosa M. Claramunt, Enrique Díez-Barra, José Elguero, Antonio de la Hoz, Concepción López, **2017**, The organic chemistry of poly(1*H*-pyrazol-1-yl)methane. *Coordination Chemistry Reviews*, *339*, 153-182. IP: 12.994 ISSN: 0010-8545 DOI: 10.1016/j.ccr.2017.03.011
- Mariana Sardo, Sérgio M. Santos, Artem Babaryk, Concepción López, Ibon Alkorta, José Elguero, Rosa M. Claramunt, Luís Mafra, **2015**, Diazole-based powdered cocrystal featuring a helical hydrogen-bonded network: Structure determination from PXRD, solid-state NMR and computer modeling. *Solid State Nuclear Magnetic Resonance* *65*, 49-63. IP: 2.864 ISSN: 0926-2040 <http://dx.doi.org/10.1016/j.ssnmr.2014.12.005>
- R. M. Claramunt, M. Pérez-Torralba, M. García, C. López, M. Torralba, I. Alkorta, J. Elguero **2014**. Intermolecular Hydrogen and Halogen Bonds in Fluorinated Benzimidazoles. *Acta Crystallography A*, *70*, C643. IP: 2.069 ISSN: 0108-7673
- Rosa M. Claramunt, Concepción López, Dionisia Sanz and José Elguero **2014**. Mechano Heterocyclic Chemistry: Grinding and Ball Mills *Advanced Heterocyclic Chemistry* *112*, 117-143. IP: 2.800 ISSN: 0065-2725 <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-800171-4.00003-2>
- M. M. Quesada Moreno, J. R. Avilés Moreno, J. J. López González, R. M. Claramunt, C. López, I. Alkorta, J. Elguero, **2014**. Chiral self-assembly of enantiomerically pure (4*S*,7*R*) campho[2,3-*c*]pyrazole in the solid state: a vibrational circular dichroism (VCD) and computational study. *Tetrahedron: Asymmetry*, *25*, 507-515. IP: 2.165 ISSN: 0957-4166 <http://dx.doi.org/10.1016/j.tetasy.2014.02.01>
- Marta Pérez-Torralba, M. Ángeles García, Concepción López, M. Carmen Torralba, M. Rosario Torres, Rosa M. Claramunt, and José Elguero, **2014**. Structural Investigation of Weak Intermolecular Interactions (Hydrogen and Halogen Bonds) in Fluorine-Substituted Benzimidazoles. *Crystal Growth & Design*, *14*: 3499-3509. IP: 4.558 ISSN: 1528-7483 dx.doi.org/10.1021/cg500442k
- Rosa María Tejedor, Santiago Uriel, Sara Graus, Teresa Sierra, José Luis Serrano, Rosa M. Claramunt, Concepción López, Marta Pérez-Torralba, Ibon Alkorta, José Elguero, **2013**. A Facile Method to Determine the Absolute Structure of Achiral Molecules: Supramolecular-Tilt Structures. *Chemistry- A European Journal*, *19*: 6044-6051. IP: 5.696 ISSN: 0947-6539 DOI: 10.1002/chem.201204197



C.2. Participación en proyectos de I+D+i

Participación como investigadora en:

➤ MINECO- CTQ2014-568833-R

Identificación de nuevos quimiotipos con propiedades antioxidantes: síntesis y aplicaciones en diferentes patologías

Ministerio de Economía y Competitividad

Inicio: 01/01/2015 Finalización: 31/12/2017

98.010,00 Euros

Investigadora principal 1: R. M. Claramunt Vallespí

Investigadora principal 2: Dionisia Sanz del Castillo

Entidades participantes: Dpto. de Química Orgánica y Bio-Orgánica (UNED) /Ciencias Médicas Básicas (CEU San Pablo)

➤ MCINN-CTQ2010-16122

El enlace de hidrógeno y su influencia en la estructura de los cristales y los complejos anfitrión-huésped

Ministerio de Ciencia e Innovación

Inicio: 01/01/2011 Finalización: 31/12/2014

142.780 Euros

Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

➤ MEC-CTQ2007-62113/BQU

Reconocimiento molecular. Aplicaciones a sistemas bioorgánicos y al desarrollo de inhibidores NOS

Ministerio de Educación y Ciencia

Inicio: 01/10/2007 Finalización: 30/09/2010

193.600 Euros

Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

C.3. Participación en contratos, méritos tecnológicos o de transferencia

➤ BRUKER ESPAÑOLA S. A. : Contrato de colaboración científica y tecnológica en RMN
Inicio: 01/12/2015

Se inició en 2003 y desde entonces se ha ido renovando cada 2 años realizando trabajos de asesoramiento, análisis de muestras, resolución de problemas estructurales, desarrollo y puesta a punto de experimentos. Conferencias. Demostraciones.

➤ GLAXOSMITHKLINE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO, S. L.: Acuerdo de transferencia de material químico

Inicio: 17/10/2012

C.4. Dirección de trabajos, participación en tareas de formación

Codirectora de la Tesis Doctoral “Nuevos indazoles como inhibidores selectivos de la sintasa del óxido nítrico (NOS)”. Carlos Pérez Medina, UNED, Facultad de Ciencias, 2008.

Dirección de Trabajos Fin de Grado y Trabajos Fin de Máster de estudiantes de la UNED.

C.4. Revisor de revistas

Arkivoc, European Journal of Inorganic Chemistry, Magnetic Resonance in Chemistry, Molecules, Bioorganic&Medicinal Chemistry.

C.5. Otros

Miembro de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) y del Grupo de Resonancia Magnética Nuclear (GERM). Adscrita al Instituto Mixto de Investigación-Escuela Nacional de Sanidad (IMIENS-UNED). Miembro del Claustro, del Consejo de Gobierno, vocal del Consejo Social y de la Junta de la Facultad de Ciencias de la UNED.

CURRICULUM VITAE ABREVIADO (CVA)

IMPORTANT – The Curriculum Vitae cannot exceed 4 pages. Instructions to fill this document are available in the website.

Part A. PERSONAL INFORMATION

First name	María José		
Family name	Hernáiz Gómez-Dégano		
Gender (*)		Birth date	
ID number			
e-mail	mjhernai@ucm.es		URL Web
Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*)	0000-0003-3897-1104		

(*) Mandatory

A.1. Current position

Position	Full Professor in Organic Chemistry and Farmaceutical Chemistry		
Initial date	11 December 2018		
Institution	Complutense University of Madrid		
Department/Center	Chemistry in Farmaceutical Sciences	Faculty of Pharmacy	
Country	Spain	Teleph. number	9139417171
Key words	Biocatalysis, Green Chemistry, Carbohydrate Chemistry, Organic Chemistry, Molecular Recognition		

A.2. Previous positions (research activity interruptions, indicate total months)

Period	Position/Institution/Country/Interruption cause
2002-2018	Associate Professor / UCM / Spain
2000-2002	Marie Curie Return I3P contract from the EU / CSIC / Spain
1999-2000	Postdoctoral researcher / Iowa University / EEUU
1997-1999	Postdoctoral researcher / (Marie curie Fellowship) / Warwick University / UK

A.3. Education

PhD, Licensed, Graduate	University/Country	Year
Pharmacy PhD	Complutense University of Madrid (Spain)	1996

Part B. CV SUMMARY

My research career started with my PhD at the Complutense University of Spain (UCM) where my major research work was in the field of biocatalysis and organic chemistry. The employ of free and immobilized lipases has conducted to the preparation of enantiomerically biological active compounds. After my PhD, I performed two postdoctoral stays (University of Warwick in England and University of Iowa, USA) and during this period my research was focused on the field of glycochemistry and glycobiology, specially concentrated on chemoenzymatic synthesis of carbohydrates. My work contributed to the development of new strategies for the enzymatic synthesis of oligosaccharides and to the study of their interactions with different proteins involved in biological processes. Then I joined the group of Profs. Martín-Lomas in the CIQ-CSIC where I continued my work in the field of carbohydrate chemistry, where my main contribution was the development of new strategies for the chemical synthesis of glyconanoparticles and their involvement in molecular recognition processes. Through my achievement and experience gained institutions mentioned above, I was appointed **associated professor at UCM (2002) and full professor in 2018**, and during this period I was have been able to develop my own and independent line of research focused on; **chemoenzymatic synthesis of carbohydrates and carbohydrate derivatives in sustainable conditions and their Implication in molecular recognition processes**. I have made an important contribution on the enzymatic synthesis of oligosaccharides and glycopolymers using free and immobilized enzymes in green solvents, with high conversion rates, excellent regioselectivity, reaction scale-up and green solvent recycling. Since **2012 I am the Director of the Biotransformation Group of UCM**, a multidisciplinary research group formed by 20 members. This has led to the publication of **more than 100 scientific papers in very prestigious journals** (e.g., Agnew. Chem. Int. Ed.; J. Am. Chem. Soc, Chem. Rev.; Green Chem. etc), reviews, book chapters, and **more than 100 communications to National and International Congresses**, including 40 oral communications. I have also participated in **more than 45 National and International Projects and Research Contracts**, including my participation in International Research



Networks, being a Principal Investigator in 12 of them (7 National Plan). I would also like to highlight that all this work has led a **national and international leadership on biocatalysis and glycochemistry**, as well as **several ongoing collaborations with national and international research groups and companies working in the same or related topics.**

I have filed **4 national and international patents** and have been involved in technology transfer activities with industry as **Director of the Molecular Interactions Unit, Madrid Science Park and UCM (2006-2012)** and founding member of the Bio spin-off incubator. That gave me the opportunity to meet, know and **collaborate with different institutions and specialized companies in biotechnology and chemical (NeuronPharma, Leti, GSK, Astrazeneca, Arquimea, NIMGenetics, Loreal, Covisa etc).**

I am also an active member of **the Spanish Society of Biotechnology (SEBIOT)**, the Royal Spanish Society of Chemistry and of the Spanish Network of Sustainable Chemistry. In SEBIOT I **served as Elected Secretary, Board General Secretary, Treasurer and currently as Vicepresident of SEBIOT.** Since 2018, I am a member of **the Executive Board of the European Federation of Biotechnology and General Secretary of EFB Biocatalysis Division.** Spanish Bioindustry Association (ASEBIO) is involved in SEBIOT therefore **I have many collaborations and relationships with chemical, pharmaceutical, biotech and cosmetic industries.** As I result, have participated in the Organizing and Scientific Committees of 40 National and International Conferences, several round tables and panel discussion regarding technology/knowledge transfer activities and exploitation of results.

I have participated actively in numerous Masters and Doctorate related with Biotechnology, Sustainable Chemistry, Biomaterials and Drug Design in Spain, Europe and Latin America. Therefore, **I have managed to obtain several predoctoral and postdoctoral fellowships:** 1 Juan de la Cierva, 3 postdocs, 9 thesis, 4 thesis in development, several DEAs, TFM and TFG. Actually, six of my former students are group leaders in industrial companies and three are success group leaders in academia and research institution.

In addition, on that I have also been appointed in **academic management as responsible of the Internship program of the Faculty of Pharmacy at UCM** for four years (2017-2020), grant proposal reviewer for the Spanish research funding agency from 2006 to present and referee of international JCR-indexed journal. Since 2020 I am also the **Vice-Dean for Research and International Affairs of the Faculty of Pharmacy at UCM**, consequently I am in charge of the coordination of the research going on in my faculty. Currently I am member of the editorial board of the International Journal of Molecular Science and Frontiers in Biocatalysis Journal.

Part C. RELEVANT MERITS

C.1. Publications

1. Hoyos, P.; Perona, A.; Bavaro, T.; Berini, F.; Marinelli, F.; Terreni, M.; **Hernaiz, M.J.*** Biocatalyzed Synthesis of Glycostructures with Anti-infective Activity. *Acc. Chem. Res.* **2022**, 55, 2409-2424. DOI: 10.1021/acs.accounts.2c001362409
2. Garcia-Oliva, C.; Perona, A.; Rumbero, A.; Hoyos, P.; **Hernaiz, M.J.*** Enzymatic Synthesis and Molecular Modelling Studies of Rhamnose Esters Using Lipase from *Pseudomonas stutzeri*. *Int. J. Mol. Sci.* **2022**, 23, 2239. DOI: 10.3390/ijms23042239.
3. Hoyos, P.; Bavaro, T.; Perona, A.; Rumbero, A.; Tengattini, S.; Terreni, M.; **Hernaiz, M. J.*** Highly Efficient and Sustainable Synthesis of Neoglycoproteins Using Galactosidases. *ACS. ACS Sustain. Chem. Eng.* **2020**, 8, 6282-6292. DOI: 10.1021/acssuschemeng.9b07785
4. Garcia-Oliva, C.; Cabanillas, A. H.; Perona, A.; Hoyos, P.; Rumbero, A.; **Hernaiz, M. J.*** Efficient Synthesis of Muramic and Glucuronic Acid Glycodendrimers as Dengue Virus Antagonists. *Chem Eur. J.* **2020**, 26, 1588-1596. DOI: 10.1002/chem.201903788.
5. Levin, G.; Gomez, S.; Glodowsky, A.; Cascone, O.; **Hernaiz, M. J.*** (10/10) Two-step enzymatic strategy for the synthesis of a smart phenolic polymer and further immobilization of a β -galactosidase able to catalyze transglycosylation reaction. *Int. J. Biol. Macromol.* **2018**, 23, 1623-1633. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2018.05.177.
6. Farran, A.; Cai, C.; Sandoval, M.; Xu, Y.M.; Liu, J.; **Hernaiz, M.J.***; Linhardt, R.J.* Green Solvents in Carbohydrate Chemistry: From Raw Materials to Fine Chemicals. *Chem. Rev.* 2015, 15, 6811-6853. DOI: 10.1021/cr500719h
7. Perez-Sanchez, M.; Sandoval, M.; Cortes-Cabrera, A; Garcia-Marin, H; Sinisterra, J. V.; Garcia, J. I.; **Hernaiz, M. J.*** Solvents derived from glycerol modify classical regioselectivity in the enzymatic



synthesis of disaccharides with Biolacta β -galactosidase. *Green Chem.* **2011**, 13, 2810-2817. DOI: 10.1039/c1gc15266a

8. Munoz, F. J.; Andre, S.; Gabius, H. J.; Sinisterra, J. V.; **Hernaiz, M. J. ***; Linhardt, R. J.* Green glycosylation using ionic liquid to prepare alkyl glycosides for studying carbohydrate-protein interactions by SPR. *Green Chem.* **2009**, 11, 373-379. DOI: 10.1039/b814171a

9. **Hernaiz, M. J.**; de la Fuente, J. M.; Barrientos, A. G.; Penades, S. A model system mimicking glycosphingolipid clusters to quantify carbohydrate self-interactions by surface plasmon resonance. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2002**, 41, 1554-1557. DOI: 0.1002/1521-3773(20020503)41.

10. Marks, R. M.; Lu, H.; Sundaresan, R.; Toida, T.; Suzuki, A.; Imanari, T.; **Hernaiz, M. J.**; Linhardt, R. J. Probing the interaction of dengue virus envelope protein with heparin: Assessment of glycosaminoglycan-derived inhibitors. *J. Med. Chem.* **2001**, 44, 2178-2187. DOI: 10.1021/jm000412i.

C.2. Congress

1. García-Oliva, C.; Merchán, A.; Arroyo, M.; de la Mata, I.; Perona, A.; Hoyos, P.; **Hernáiz, M. J.** Towards sustainable biocatalyzed synthesis of Rhamnose esters. **Invited lecture (Hernáiz, M. J.)**. 3rd Aachen Protein Engineering Symposium, Germany, september **2021**.

2. **Hernáiz, M. J.** Efficient and sustainable synthesis of muramic and glucuronic acid glycodendrimers as Dengue virus antagonists. **Invited lecture (Hernáiz, M. J.)**. V Biennial Meeting of the Chemical Biology Group, Royal Spanish Society of Chemistry, Granada, Spain, february **2020**.

3. **Hernáiz, M. J.**; Hoyos, M. P.; Bavaro, T.; Garcia-Oliva, C. M.; González, I.; Terreni, M. Chemoenzymatic synthesis of novel neoglycoprotein in sustainable conditions. 19 European Carbohydrate Symposium, EUROCARB17. **Oral communication (Hernáiz, M. J.)**, Barcelona, july **2017**.

4. Garcia-Oliva, C. M.; Hoyos, M. P.; **Hernáiz, M. J.** Green Solvents in Enzymatic Synthesis of Carbohydrate using lipases and glycosidases. National Biotechnology Congress, BIOTEC 2017. **Invited lecture (Hernáiz, M. J.)**. Murcia, Spain, June **2017**.

5. **Hernáiz, M. J.** Green solvents in carbohydrate chemistry. **Invited lecture (Hernáiz, M. J.)**. 8th Green Solvents Conference, Kiel, Germany, November **2016**.

6. Bayón, C.; Deir-Kaspar, M.; He, N.; Rumbero, A.; Fessner, W-D.; **Hernáiz, M. J.** A Combined chemical/enzymatic synthesis of neoglycodendrimers that contain rivativized sialic scids. XXXIV Biennial Meeting of the Royal Spanish Society of Chemistry. **Oral communication (Hernáiz, M. J.)** Santander, Spain, september **2013**.

7. Sandoval, M.; Cortés, A.; Ferreras, E.; Treviño, J.; Berenguer, J.; Lozano, P.; Sinisterra, J. V.; Hernaiz, M. J. Influence of ionic liquids on enzymatic glycosides synthesis with *Thermus thermophilus* β -galactosidase: a surface plasmon resonance and molecular modeling analysis. 16th European Carbohydrate Symposium. **Oral communication**, Sorrento, Italy, july, **2011**

8. Muñoz, F. J.; Perez, M.; Sinisterra, J. V.; **Hernáiz, M. J.** Enzymatic approaches in the preparation of oligosaccharides and glycoconjugates. International Congress on Biocatalysis (BIOCAT 2008). **Oral communication (Hernáiz, M. J.)**. Hamburgo, Germany, september, **2008**

9. Medina, J.; Muñoz, E.; Sinisterra, J. V.; **Hernáiz M. J.** Immobilization of structurally defined oligosaccharides for surface plasmon resonante análisis of carbohydrate-protein interactions. 14th European Carbohydrate Symposium. **Oral communication (Hernáiz, M. J.)**, Lubeck, Germany, september **2007**.

10. **Hernáiz, M. J.**; Muñoz, F. J.; Fernández, M.; Sinisterra, J. V. Efficient production of glycoconjugates via green biocatalytic glycosidation for monitoring interaction with carbohydrates. 6th Green Chemistry Conference. **Oral communication**, (**Hernáiz, M. J.**). Barcelona, Spain, **2004**.

C.3. Research projects

1. A new approach for the sustainable bioconversion of plastic waste to high value products based on thermophilic microorganisms and enzymatic synthesis. Ministerio de Ciencia e Innovación. TED2021-130430B-C21). 01/12/2022-12/12/2023. **IP: Hernáiz, M.J.** Amount: 224.480 €

2. Production of Biosurfactants with Applications in Cosmetic and Pharmaceutical Industries: A Sustainable Approach. Ministerio de Ciencia e Innovación. PDC2022-133817-I00. RTI2018-096037-B-I00. 2019-2022. **IP: Hernáiz, M. J.** Amount: 115.000 €.

3. New Chemoenzymatic Production of Carbohydrate Derivatives with Applications in Pharmaceutical and Chemical Industries; A Sustainable Approach. Ministerio de Ciencia y Universidades. RTI2018-096037-B-I00. 2019-2022. **IP: María J. Hernáiz.** Amount: 212.960 €.



4. Desarrollo de nuevas glicoestructuras con actividad antiinfecciosa: bacterias Gram-positivas y Virus del Dengue. Ministerio de Economía y Competitividad, CTQ2015-66206-C2-1-R y CTQ2015-66206-C2-2-R. 2016-2018. **IP: Hernáiz, M. J.** Amount: 89.540 € y 104.060, Total amount: 193.600 €
5. Systems Biocatalysis. Horizonte2020 Comisión Europea, COST Action CM1303. **IP: Dr. Wolf-Dieter Fessner** (Technische Universität Darmstadt, Alemania. Amount: 650.000 €
6. Diseño y síntesis quimioenzimática de glicoestructuras y su evaluación en procesos de reconocimiento molecular. Ministerio de Economía y Competitividad, CTQ2012-32042. 2013- 2015. **IP: Hernáiz, M. J.** Amount: 84.141,69 €
7. Síntesis quimioenzimática de glicoconjugados y glicomiméticos: estudio de su implicación en procesos de reconocimiento molecular. Ministerio de Educación y Ciencia, CTQ2009-11801. 2010-2012. **IP: Hernáiz, M. J.** Amount: 113.740 €.
8. Utilización de nuevas tecnologías para la detección, análisis y cuantificación de las interacciones carbohidrato-proteína. Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ 2006-09052. 2006 – 2009. **IP: Hernáiz, M. J.** Amount: 24.850,00 €
9. SOLVSAFE (Advanced safer solvents for innovative industrial eco-processing), Sunproject WP3. European commission, FP-62003-NMP-SME-3, Proposal Nº 011774-2. 01/2005 - 03/2009. **IP: Sinisterra, J. V.** (Subproject WP3). Coordinator: Esteve, C. Institut Universitari de Ciència i Tecnologia (IUCT), Mollet del Valles, Barcelona. Amount: 355.077,00 € (Subproject WP3). Total amount: 5.700.000,00 €
10. Enzteredox, Procesos Red-ox Catalizados por Enzimas de Microorganismos Termofilos: Aplicaciones en Bioindustrias Químicas Sostenibles. Comunidad Autónoma de Madrid, Programa de Actividades de I+D entre Grupos de Investigación de la CAM. Ref. S-0505/PPQ/0344. 2006 -2007. **IP: Sinisterra, J. V.** Amount: 360.431,70 €

C.4. Contracts, technological or transfer merits

- Patent: 1.** Inventors: **Hernáiz, M. J.**; Muñoz, F.; Fernández, M.; Sinisterra, J. V. T: Novel biotin reagent, methods of preparing an labeling same and uses thereof. Patent number: WO 2007/017540 A1. Registration day: 01/08/2006.
- 2.** Inventors: Raya J.; Fabry, B.; Valls, R.; Pérez, M; **Hernáiz, M. J.**; Sinisterra, J. V. Title: Process for the regio-selective preparation of disaccharides or oligosaccharides. Patent number: EP 2 138 586 A1. Registration day: 30/12/2009.
- 3.** Inventors: del Pozo, J.C.; Manzano, C.; Hoyos, P.; **Hernáiz, M.J.**; Pollmann, S. Title: Use of compounds to regulate vegetal growth. Patent number: P201630412. Registration day: 20/10/2016.
- 4.** Inventos: Chonco, L.; Fernández, G.; Kalhapure, R.; Govender, Th.; Parboosing, R.; González, V. M.; Martín M. E.; **Hernáiz, M. J.** Title: Aptamers against CCL21 protein and biomedical applications for targeted nanoparticles application. Patent number: P75826ZP00. Registration day: 24/01/2017.

Contract

1. Gestión del proceso de evaluación de curriculum vitae para la atracción de talento internacional. Artículo 83 con la Fundación para el conocimiento MADRI+D. 2021. **IP: Hernáiz, M. J.** Amount: 3700 €.
2. Biorrefinería de residuos sólidos urbanos. Company: Ecohispanica I más D Medioambiental S. L. 2018-2019. **IP: A. Rumbero.** Amount: 210.000 €.
3. Síntesis combinatoria, aislamiento y determinación estructural de compuestos bioactivos de origen microbiano. Company: Valoralia I+D S.L. 2013-2017- **IP: A. Rumbero.** Amount: 400.000 €.
4. Síntesis quimioenzimática del linezolido. Ministerio de Educación y Ciencia. PROFIT CIT-320100-2005-39, Company: Institut Universitari de Ciència i Tecnologia (IUCT). 2006. **IP: Sinisterra, J. V.** Amount; 106.300 €
5. Obtención de profármacos de antivirales con estructura de análogos de nucleósidos. Síntesis quimio-enzimática y desarrollo galénico. Programa Nacional. Orden de Parques científicos, Convocatoria 2006. PCT-320100-2006-6. 2006-2007. **IP: Sinisterra, J. V.** Amount: 441.740,00 €

As a Vicepresident of SEBIOT, member of **the Executive Board of the European Federation of Biotechnology, General Secretary of EFB Biocatalysis Division**, I have many collaborations and relationships with companies. As a result, have participated in the Organizing and Scientific Committees of 40 National and International Conferences, several round tables, panel discussion, projects and articles about dissemination of technology/knowledge research and technology/knowledge transfer activities and exploitation of results.

Fecha del CVA 26/10/2023

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre y apellidos	ANTONIO J. LÓPEZ PEINADO		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	L-8349-2014	
	Código Orcid	0000-0002-6162-3151	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad Nacional de Educación a Distancia		
Dpto./Centro	Química Inorgánica y Química Técnica/Facultad de Ciencias		
Dirección	C/ Senda del Rey, 9		
Teléfono	913987346	Correo electrónico	alopez@ccia.uned.es
Categoría profesional	Catedrático de Universidad	Fecha inicio	17/01/2011
Espec. cód. UNESCO	230305, 230300, 230699		
Palabras clave	Química Inorgánica, Caracterización, Catálisis Heterogénea		

A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciado CC. Químicas	Granada	1981
Doctor CC. Químicas	Granada	1984

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica

Sexenios de Investigación acreditados por la CNEAI: SEIS, el último fue en 2012-2017. Se han concedido todos los sexenios posibles.

	ResearcherID	Scopus	Google Scholar
Citas Totales	2625	2828	3658
Índice h	23	25	27
Total artículos	65	71	113

Publicaciones totales en primer cuartil (Q1): Cuarenta y cuatro (45)

Tesis doctorales dirigidas: Ocho (8), Cuatro en los últimos 10 años.

Participación en Proyectos de Investigación desde 2011: Nueve (9)

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Formado académica y científicamente en la U. de Granada, ha disfrutado de diversas becas de formación postdoctorales, desarrollando estancias científicas en Holanda, Estados Unidos y Japón.

Después de finalizar mi periodo de formación, me incorporé a la Universidad de Extremadura como Profesor Titular contratado y después interino y posteriormente a la UNED como Profesor Titular, donde continué desarrollando actividades docentes e investigadoras.

En diciembre de 1989 obtuve una plaza de Profesor Titular en la UNED y en enero de 2011 la de Catedrático de Universidad, área de Química Inorgánica.

En la U. de Granada adquirió una sólida formación en los campos de la preparación, caracterización y aplicaciones de carbones. A continuación, ya en el periodo postdoctoral, se inició el estudio de los procesos anteriores catalizados con diferentes metales de transición, continuando con estudios de caracterización de grupos superficiales en materiales carbonosos, para ello se emplean técnicas como RMN, FT-IR, MS, TG, XPS, etc.

La experiencia adquirida, se amplió a materiales aluminio-silíceos, como las zeolitas y otros materiales mesoporosos, empleados como soportes o catalizadores en reacciones catalíticas de síntesis de productos de alto poder añadido como fármacos, herbicidas, insecticidas, perfumes, etc., empleando los principios de la Química Verde.

Para ello se han empleado catalizadores sólidos ácidos y básicos, para la activación de las reacciones químicas, tecnologías limpias como fuentes de energía alternativas tipo radiación microondas y ultrasonidos reemplazando así los métodos convencionales de reacción poco eficientes energéticamente y poco amigables con el medio ambiente.



Ha impartido docencia teórica y práctica en asignaturas de Química Inorgánica de las Licenciaturas y Grados de Ciencias Químicas y de Ciencias Ambientales. Asimismo, ha impartido docencia de doctorado y actualmente del Master de Ciencia Tecnología Química y en el Master Universitario en Formación del Profesorado de Educación Secundaria Obligatoria y Bachillerato, Formación Profesional y Enseñanza de Idiomas de la UNED.

En la UNED, ha dirigido y colaborado en numerosos cursos de Enseñanzas No Regladas, también ha dirigido cuatro Cursos de Verano sobre el tema de Medio Ambiente y Sociedad. En el programa de intercambio Sócrates-Erasmus soy coordinador del programa con la Charles University de Praga desde 2005.

Director de dos Tesis de Licenciatura y de tres Memorias de Diploma de Estudios Avanzados (DEA) y de tres trabajos Fin de Master. Director de ocho Tesis de Doctorado, todas ellas han obtenido la máxima calificación y dos de ellas tiene la mención de Doctorado Europeo y han sido "Premio Extraordinario de Doctorado" en la UNED.

Ha participado en 12 Proyectos de Investigación nacionales e internacionales, siendo investigador principal de dos de ellos. Asimismo, ha dirigido un contrato de Investigación (art. 83 de la LOU) con la empresa Hynergreen, el CENIM (CSIC) y la UNED. Asimismo, ha participado en 3 proyectos de Divulgación de la Ciencia financiados por la FECYT, el último en 2019.

Mantiene cooperaciones con investigadores de diversas universidades de Europa y América. Es coautor de más de 80 artículos científicos y capítulos de libro recogidos en el JCR del Science Citation Index.

Ha presentado más de 160 comunicaciones a Congresos nacionales e internacionales. Ha sido requerido para evaluar artículos científicos para varias las revistas científicas y Proyectos de Investigación.

En la UNED, desde 1993, ha participado activamente en la gestión universitaria destacando su gestión con Secretario General, Vicerrector de Coordinación y Director del Departamento de Química Inorgánica y Química Técnica.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones:

1. Godino-Ojer, M.; Morales Ripoll, V.; López Peinado, Antonio J. Bernardo, M.; Lapa, N.; Ferrara, A.M.; Botelho do Rego, A.M.; Fonseca, I.M.; Matos, I.; Pérez-Mayoral, E.
P-Doped carbon catalyst highly efficient for benzodiazepine synthesis. Tires valorisation Catalysis Today Volume 4191 July 2023 Article number 114160
2. E Pérez-Mayoral, AJ López-Peinado.
Capítulo: Porous catalytic systems in the synthesis of bioactive heterocycles and related compounds.
Libro: Green Synthetic Approaches for Biologically Relevant Heterocycles
ISBN: 978-0-12-820792-5
Página: 97-164, 2021. Elsevier
3. P. Fernández-Rodríguez, J. Hurtado de Mendoza, J. L. López-Colón, A. J. López-Peinado, R. M. Martín-Aranda
Capítulo: Nanotechnology: Concepts of Nanotoxicity.
Libro: Nanocatalysis: applications and technologies
ISBN: 978-0-36-778025-8
Página: 3-21, 2019, CRC Press,
4. Cobalt oxide-carbon nanocatalysts with highly enhanced catalytic performance for the green synthesis of nitrogen heterocycles through the Friedländer condensation
M Godino-Ojer, AJ López-Peinado, FJ Maldonado-Hódar, ...
Dalton Transactions 48 (17), 5637-5648, 2019
5. Godino-Ojer, M., López-Peinado, A.J., Maldonado-Hódar, F.J., Pérez-Mayoral, E. Highly Efficient and Selective Catalytic Synthesis of Quinolines Involving Transition-Metal-Doped Carbon Aerogels
Chem. Cat. Chem, 9(8) 1442-1428, DOI: 10.1002/cctc.201601657, 2017
6. Velasco, J.; Perez-Mayoral, E.; Calvino-Casilda, V.; Lopez-Peinado A.J.; Banares, M.A.; Soriano, E.
Imidazolium Sulfonates as Environmental-Friendly Catalytic Systems for the Synthesis of Biologically Active 2-Amino-4H-chromenes: Mechanistic Insights
J. Phys Chem B, 119(36) 12042-12049, DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b06275, 2015

7. M. Godino-Ojer; A. J. López- Peinado; R. M. Martín-Aranda; J. Przepiórski; E. Pérez-Mayoral; E. Soriano.
Eco-friendly Catalytic Systems Based on MgO-Supporting Carbon Materials for the Friedländer Condensation
Chem. Cat. Chem, 6(12) 3440-3347, DOI: 10.1002/cctc.201402602, 2014
8. E. Perez-Mayoral; V. Calvino-Casilda; M. Godino; A.J. Lopez-Peinado; R.M. Martin-Aranda
Capítulo: Porous Catalytic Systems in the Synthesis of Bioactive Heterocycles and Related Compounds
Libro: Green Synthetic Approaches for Biologically Relevant Heterocycles
ISBN: 978-0-12-800070-0
Página: 378-408, 2014
Editorial: Elsevier
9. D. Blasco-Jiménez; I. Sobczak; M. Ziolek; E. Pérez-Mayoral; A. J. López-Peinado; R. M. Martín-Aranda
Efficient isomerization of safrole by amino-grafted MCM-41 materials as basic catalysts
Catalysis Today, 179, 159-163, 2012
10. V. Calvino-Casilda; C.J. Durán-Valle; A.J. López-Peinado; R.M. Martín-Aranda
Last decade of research on activated carbons as support for catalytic reactions
Catalysis Reviews, 52(3), 325-380, 2010

C.2. Proyectos

1. Título del proyecto: Sistemas catalíticos porosos en la síntesis de heterociclos bioactivos. Estudio mecanístico, CTM2014-56668-R
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación
Duración, desde: 01/01/2015 hasta: 01/01/2018
Cuantía de la subvención: 185,130.00 € más un becario FPI
Investigador responsable: Martin Aranda, Rosa María (UNED)
Tipo de participación: Investigador
2. Título del proyecto: Materiales mesoporosos y química verde. Síntesis de compuestos con propiedades terapéuticas, CTQ-2011-27935
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación
Duración, desde: 01/01/2012 hasta: 01/01/2015
Cuantía de la subvención: 73810.0 €
Investigador responsable: Martin Aranda, Rosa María (UNED)
Tipo de participación: Investigador
3. Título del proyecto: Procesos de bajo impacto ambiental. Aplicación de materiales mesoporosos como catalizadores en la síntesis de compuestos con actividad biológica, CTQ-2010-18652
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación
Duración, desde: 01/01/2011 hasta: 01/01/2012
Cuantía de la subvención: 14520.0 €
Investigador responsable: Martin Aranda, Rosa María (UNED)
Tipo de participación: Investigador
4. Título del proyecto: Tratamientos Catalíticos de Oxidación Avanzada para la eliminación de contaminantes aromáticos en aguas residuales, CTM-2007-605771/TECNO
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades Participantes: UNED ICP-CSIC
Duración, desde: 01/01/2007 hasta: 31/12/2009
Cuantía de la subvención: 88000.0 €
Investigador responsable: Ana Bahamonde Santos ICP-CSIC
Tipo de participación: Investigador
5. Título del proyecto: Desarrollo de un nuevo sistema de eliminación de gases tóxicos y corrosivos generados en depuradoras de aguas residuales, S-0505/AMB-0406 Entidades Participantes: UNED, CIEMAT, ICV-CSIC, ICP-CSIC
Duración, desde: 01/01/2006 hasta: 31/12/2009

Cuantía de la subvención: 576975.0 €
Investigador responsable: Benigno Sánchez Cabrero, CIEMAT
Tipo de participación: Investigador

C.3. Contratos, méritos tecnológicos o de transferencia

1. Título del proyecto: HYNERGREEN
Entidad financiadora: Hynergreen Technologies
Entidades Participantes: UNED, CENIM-CSIC
Duración, desde: 01/05/2006 hasta: 31/12/2010
Cuantía de la subvención: 95352.93
Investigador responsable: López Peinado, A. J.

C.4. Patentes

1. Denominación: Síntesis de quinolinas usando catalizadores basados en aerosoles de carbón
Descripción de cualidades: Patente UNED UGR
Inventores/autores/obtenedores: Elena Pérez Mayoral, Rosa M. Martín Aranda, Antonio J. López Peinado, Marina Godino Ojer, Francisco J. Maldonado Hódar, Agustín Pérez Cadenas y Francisco Carrasco Marín
Cód. de referencia/registro:
Número de solicitud: 201531362
País de prioridad: España Fecha: 24/09/2015 Patente española: Si
2. Denominación: Procedimiento para la preparación de quinolinas usando materiales mesoporosos híbridos como catalizadores del proceso
Descripción de cualidades: Patente UNED
Inventores/autores/obtenedores: Jesús López Sanz, Elena Pérez Mayoral, Rosa María Martín Aranda, Antonio J. López Peinado
Cód. de referencia/registro: 201100788
Número de solicitud: P201100788
País de prioridad: España Fecha: 06/02/2014 Patente española: Si
3. Denominación: Procedimiento de síntesis de cumarinas catalizada por sólidos mesoporosos híbridos inorgánico-orgánico básicos y cumarinas así obtenidas
Descripción de cualidades: Patente solicitada entre UNED-CSIC
Inventores/autores/obtenedores: E. Pérez Mayoral, R. M. Martín Aranda y Antonio. J. López Peinado
Número de solicitud: P201201163
País de prioridad: España Fecha: 22/11/2012 Patente española: Si

C.5. Otros

1. Revisor de revistas de difusión internacional especializadas de Elsevier
2. Evaluador de proyectos para la Junta Andalucía y Argentina.
3. Seis mas uno quinquenios docentes reconocidos, último hasta diciembre de 2018.
4. Seis sexenios de investigación, el último hasta diciembre de 2107
5. Gestión universitaria: Secretario General UNED (1995-1996), Vicerrector de Coordinación UNED (1196-1999), y Director de Departamento (2002-2015)
6. Miembro de la RSEQ: Grupo Español del Carbón, Grupo de Adsorción y de la Royal Society of Chemistry, Reino Unido
7. 5th Czech-Italian-Spanish Conference on Molecular Sieves and Catalysis. 16-19 junio 2013 Segovia (España). Miembro del comité organizador y científico.
8. Participación en numerosas actividades de divulgación científica en la Semana de la Ciencia desde hace mas de 15 años.

CURRICULUM VITAE

TITLE AND NAME : Prof.Dr Guillermo Monrós
ADDRESS : Universitat Jaume I, Dpt. Química Inorgánica, 12071-Castellón (Spain)
TEL NO.: +34 964 728250
E-MAIL: monrós@uji.es
NATIONALITY: SPANISH
LANGUAGES : SPANISH (Native)
French (Fluent)
English (Intermediate)

EMPLOYMENT AND RESEARCH FIELDS:

Professor on Inorganic Chemistry in the University Jaume I of Castellón (Spain).

Research fields: ceramics (ceramic pigments, glazes), environment (hazardous wastes, ceramic waste management), photocatalysis (ceramic photocatalysts).

Accumulated Spanish research sections (periods of 6 years) = 6 (one of transference)

LAST PUBLICATIONS :

Books:

G. Monrós, El color de la ilustrada porcelana de l'Alcora, Ed. Académica Española, 2023, Londres, ISBN 978-620—2-11926-9.

G. Monrós. Scheelite and Zircon: Brightness, Color and NIR Reflectance in Ceramics, 2021. Materials Science and Technologies. ISBN 9781536193329, New York, Ed. Nova Science Publishers.

G. Monrós, M-Llusar, S. Cerro, Pigmentos termosolares ecoeficientes. Nuevos pigmentos para la eficiencia energética urbana, 2017. ISBN 9786202251785. Ed. Editorial Académica Española.

María Dolores Bovea, Marta Braulio, Maria del Mar Carlos, Francisco José Colomer, Antonio Gallardo, Valeria Ibáñez, Guillermo Monrós (eds), Actas del X Simposio Iberoamericano de Ingeniería de Residuos. "Hacia la circularidad y el residuo cero". 2023. Edició. Científic. ISBN 9788409531233. Castelló de la Plana (Espanya). Ed. Universitat Jaume I.

G. Monrós, J. Badenes, A. García, M.A.Tena, El color de la cerámica: Nuevos mecanismos para los nuevos procesados de la industria cerámica, Publicacions de la Universitat Jaume I ISBN: 84-8021-449-X, 2003.

G. Monrós. La cerámica plana vidriada: innovación y sostenibilidad, Publicaciones del Ayuntamiento de Castellón, ISBN: 84-95915-84-7, 2007.

Elvira Gual, Vicent Cantavella, Guillermo Monrós, Anuari de l'Agrupació Borrianea de Cultura, 2008, Núm.: 19 La nostra ceràmica. Art, indústria i recerca en la ceràmica valenciana.

A. Gallardo, M.D. Bovea, F.J. Colomer, G. Monrós, M. Carlos (eds.). Ingeniería de residuos, Publicacions de la Universitat Jaume I, ISBN: 978-84-8021-65-4, 2008.

G. Monrós, M. Llusar, J-A. Badenes, Química Inorgánica del Estado Sólido, 2014. ISBN 9788494228612. Valencia. Ed. Low Cost Books.

Papers (last 5 years).

Guillermo Monrós Tomás, Mario Ignacio Llusar Vicent, José Antonio Badenes March. [High NIR Reflectance and Photocatalytic Ceramic Pigments Based on M-Doped Clinobisvanite BiVO₄ \(M = Ca, Cr\) from Gels](#) MATERIALS. Num. 10. Vol. 16. pp. 1-21. 2023.

Guillermo Monrós Tomás, Mario Ignacio Llusar Vicent, José Antonio Badenes March. [Eco-friendly polyfunctional ceramic pigments: an approach](#) Pigment & Resin Technology . 2023.

Guillermo Monrós Tomás, José Antonio Badenes March, Mario Ignacio Llusar Vicent, [Ecofriendly High NIR Reflectance Ceramic Pigments Based on Rare Earths Compared with Classical Chromophores Prepared by DPC Method](#), CERAMICS. Num. 4. Vol. 5. pp. 614-641. 2022.

Guillermo Monrós Tomás, Mario Ignacio Llusar Vicent, José Antonio Badenes March, Roberto Galindo Llorach [Sol-Gel ceramic glazes with photocatalytic activity](#). JOURNAL OF SOL-GEL SCIENCE AND TECHNOLOGY . Num. 3. Vol. 102. pp. 535-549. 2022.

Guillermo Monrós Tomás, Sara Cerro Lloria, José Antonio Badenes March, Mario Ignacio Llusar Vicent. [Black Cool Pigments for Urban Heat Island \(UHI\) Control: from CrHematite to Mn-Melilite](#), JOURNAL OF SOLAR ENERGY RESEARCH UPDATES. Vol. 8. pp. 27-44. 2021.

Hanae Abdelouahab Reddam, Rachad Elmail, Sara Cerro Lloria, Guillermo Monrós Tomás, Zinab Abdelouahab Reddam, Fernando Coloma-Pascual. [Synthesis of Fe, Mn and Cu modified TiO₂ photocatalysts for photodegradation of Orange II](#) BOLETIN DE LA SOCIEDAD ESPANOLA DE CERAMICA Y VIDRIO. Num. 4. Vol. 59. pp. 138-148. 2020.

Sara Cerro Lloria, Mario Ignacio Llusar Vicent, Carina Gargori García, Guillermo Monrós Tomás, [Cool and photocatalytic yellow ceramic pigments; from lead-tin to Cr doped scheelite pigments](#), CERAMICS INTERNATIONAL. Num. 4. Vol. 45. pp. 4613-4625. 2019.

Sara Cerro Lloria, Carina Gargori García, Mario Ignacio Llusar Vicent, Guillermo Monrós Tomás, [Orthorhombic \(Fe₂TiO₅\)-monoclinic \(Cr₂TiO₅\) solid solution series: Synthesis by gel routes, coloring and NIR reflectivity evaluation](#) CERAMICS INTERNATIONAL. Num. 11. Vol. 44. pp. 13349-13359. 2018.

Carina Gargori García, Sara Cerro Lloria, Natalia Fas Argamasilla, Mario Ignacio Llusar Vicent, Guillermo Monrós Tomás. [Cerimization of heavy metals in \(Ba_{1-X}M_x\)Al₂Si₂O₈ celsian solid solutions and recycling as pigments](#), MATERIALS LETTERS. Vol. 221. pp. 187-191. 2018.

Carina Gargori García, S.R. Prim, Mario Ignacio Llusar Vicent, M.V. Folgueras, Guillermo Monrós Tomás. [Recycling of Cr/Ni/Cu plating wastes as black ceramic pigments](#), MATERIALS LETTERS. Vol. 218. pp. 341-345. 2018

HONOURS AND AWARDS

1. IV Concurs d'Innovació Educativa de la Generalitat Valenciana, 1989.

2. Premio FUNDACION ADOPAL a proyectos de investigación en ciencias en el ámbito de bachillerato.

3. Premio Monografía sobre estudios locales “Rafael Martí de Viciana” ciudad de Borriana, por el trabajo “Química de les aigües i sòls de Borriana”, 1990.
4. Premi Ciutat de Castelló de Ciència i Tècnica 1991 por el trabajo “Ciencia e Industria”.
5. Tercer Premio en el V Concurso de Fotografía Científica y Técnica sobre Cerámica y Vidrio de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio.
6. Accesit IV Premio de Investigación del Consejo Social de la Universidad Jaume I por el trabajo “Nuevos Mecanismos del Color en Pigmentos para los Nuevos Procesados de la Industria Cerámica”.
7. Premio Ciudad de Castellón 2006 en Ciencia y Tecnología por el trabajo “La cerámica plana vidriada: innovación y sostenibilidad”.

Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA 7/12/2021

Nombre y apellidos	Consuelo Escolástico León		
DNI/NIE/pasaporte			
Núm. identificación del investigador	Researcher ID		
	Código Orcid	0000-0003-4300-7555	

A.1. Situación profesión actual

Organismo	Universidad Nacional de Educación a Distancia		
Dpto./Centro	Química Orgánica y Bio-Orgánica		
Dirección	Avenida de Esparta s/n Carretera de Las Rozas al Escorial km 5 28232 Las Rozas-Madrid		
Teléfono	+34913988960	correo electrónico	cescolastico@ccia.uned.es
Categoría profesional	Catedrática de Universidad	Fecha inicio:	19/04/2018
Espec. cód. UNESCO	2511.04, 2511.06, 3308.04, 3308.99 Descontaminación suelos		
Palabras clave	Contaminación Ambiental, Fitorremediación, Agroecosistemas, Calidad de suelos		

A.2. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciada en Farmacia	Universidad Complutense de Madrid	1987
Doctora en Ciencias	UNED	1995

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica

- Número de sexenios de investigación: 4 (último: 2014-2019)
- Número de quinquenios de docencia: 4 (último: 2013-2018)

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Consuelo Escolástico León es Catedrática de Universidad en el Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica de la Facultad de Ciencias de la UNED. Pertenece al grupo Innovación Agroambiental Sostenible (UAM10-320), y Coordinadora del Grupo de Innovación Educativa Nuevas estrategias Docentes en Asignaturas del Grado en Ciencias Ambientales (NEDACA). Es Coordinadora del Máster Interuniversitario en Ciencias Agroambientales y Agroalimentarias entre la Universidad Autónoma de Madrid (UAM) y la UNED, y Coordinadora del área disponibilidad de la Cátedra UNESCO "Science and Innovation for Sustainable Development: Global Food Production and Safety" UNED-Fundación Triptolemos. A lo largo de su trayectoria investigadora ha publicado los resultados en 29 artículos en revistas de índice de impacto indexadas en el JCR, 4 capítulos de libro (uno, editorial Springer) y 18 artículos en otras revistas científicas. Ha presentado 42 trabajos en congresos, nacionales e internacionales y ha impartido conferencias y cursos relacionados con su investigación. Así mismo, ha colaborado en 9 proyectos de investigación de convocatoria nacional competitiva y en 2 proyectos de divulgación científica. También ha dirigido varios trabajos de investigación, trabajos fin de máster y tesis doctoral. Las líneas de investigación recientes en las que se ha centrado son aplicación de técnicas de fitorremediación en suelos contaminados utilizando especies vegetales tolerantes a los metales y otros contaminantes; estudio de la fitoextracción asistida de metales mediante agentes quelantes; estudio del comportamiento y destino de contaminantes en el suelo y otros ecosistemas naturales; aplicación de materiales orgánicos para la recuperación de suelos degradados.

En su actividad docente, ha elaborado libros de texto y materiales didácticos. Es coautora de 11 libros y 13 publicaciones docentes, habiendo sido premiada por el Consejo Social de la UNED en cinco convocatorias por el material didáctico. Ha participado en 10 proyectos de innovación docente, siendo la coordinadora de 8. Ha presentado más de 20 comunicaciones en congresos orientados a la formación docente, y ha asistido a congresos, y cursos de innovación docente. También destaca su docencia y dirección de Cursos de Verano de la UNED en distintas ediciones y cursos de extensión universitaria.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones

- Mayans, B., Antón-Herrero, R., García-Delgado, C., Carreras, N., Delgado-Moreno, L., Escolástico, C., Eymar, E. 2023. Enhancement of methane production from livestock manure with pre-treatments based in fungi of genus *Pleurotus*. *Biomass and Bioenergy*, 176, 106901. Impact factor (JCR): 5.774. Position: Q1 (Environmental Sciences).
- Mayans B., Camacho-Arévalo R., Garcia-Delgado C., Antón R., Escolástico C., Segura ML., Eymar E. 2021. An assessment of *Pleurotus ostreatus* to remove sulfonamides, and its role as a biofilter based on its own spent mushroom substrate. *Environmental Science and Pollution Research* 28, 7032. Impact factor (JCR): 3.056. Position: Q2 (Environmental Sciences).
- Mayans, B.; Camacho-Arévalo, R.; García-Delgado, C.; Alcántara, C.; Nägele, N.; Antón-Herrero, R.; Escolástico, C.; Eymar, E. 2021 Mycoremediation of Soils Polluted with Trichloroethylene: First Evidence of *Pleurotus* Genus Effectiveness. *Appl. Sci.*, 11, 1354. Impact factor (JCR): 2.679. Position: Q2 (Environmental Sciences).
- Mayans, B. Pérez-Esteban, J., Escolástico, C., Masaguer, A., Eymar, E. 2019. Evaluation of Commercial Humic Substances and Other Organic Amendments for the Immobilization of Copper Through ¹³C CPDAS NMR, FT-IR, and DSC Analyses. *Agronomy*, 9(11), 762. Impact factor (JCR): 2.603. Position: Q1 (18/91 in Agronomy).
- Pérez-Esteban, J., Escolástico, C., Sanchis, I. Masaguer, A., Moliner, A. 2019. Effects of pH Conditions and Application Rates of Commercial Humic Substances on Cu and Zn Mobility in Anthropogenic Mine Soils. *Sustainability* 11, 4844. Impact factor (JCR): 2.592. Position: Q2 (105/250 in Environmental Sciences).
- Vargas, C., Pérez-Esteban, J., Escolástico, C., Masaguer, A., Moliner, A. 2016. Phytoremediation of Cu and Zn by vetiver grass in mine soils amended with humic acids. *Environmental Science and Pollution Research* 23, 13521-13530. Impact factor (JCR): 2.741. Position: Q2 (79/229 in Environmental Sciences).
- Pérez-Esteban, J., Escolástico, C., Masaguer, A., Vargas, C., Moliner, A. 2014. Soluble organic carbon and pH of organic amendments affect metal mobility and chemical speciation in mine soils. *Chemosphere* 103, 164-171. Impact factor (JCR): 3.137. Position: Q1 (36/209 in Environmental Sciences).
- Pérez-Esteban, J., Escolástico, C., Moliner, A., Masaguer, A., Ruiz-Fernández, J. 2014. Phytostabilization of metals in mine soils using *Brassica juncea* in combination with organic amendments. *Plant and Soil* 377, 97-109. Impact factor (JCR): 2.638. Position: Q1 (4/34 in Soil Science).
- Pérez-Esteban, J., Escolástico, C., Ruiz-Fernández, J., Masaguer, A., Moliner, A. 2013. Bioavailability and extraction of heavy metals from contaminated soil by *Atriplex halimus*. *Environmental and Experimental Botany* 88, 53-59. Impact factor (JCR): 2.578. Position: Q1 (48/195 in Plant Sciences).
- Pérez-Esteban, J., Escolástico, C., Moliner, A., Masaguer, A. 2013. Chemical speciation and mobilization of copper and zinc in naturally contaminated mine soils with citric and tartaric acids. *Chemosphere* 90, 276-283. Impact factor (JCR): 3.137. Position: Q1 (36/209 in Environmental Sciences).
- Pérez-Esteban, J., Escolástico, C., Masaguer, A., Ruiz-Fernández, J., Moliner, A. 2015. Phytoremediation of degraded mine soils using organic amendments and metal-tolerant plants (chapter 22). *Phytoremediation: Management of Environmental Contaminants 1-IV* (Eds.: Ansari, A.A., Gill, S.S., Gill, R., Lanza, G.R., Newman, L.). pp.309-321. Springer International Publishing, Cham (Switzerland). ISBN 978-3-319-10394-5. DOI:10.1007/978-3-319-10395-2

C.2. Proyectos

Título del proyecto: *Remediación verde de suelos afectados por la minería: poniendo los microorganismos a trabajar.* TED2021-129229B-I00.

Proyectos Estratégicos Orientados a la Transición Ecológica y a la Transición Digital. Convocatoria 2021

Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Ciencia e Innovación

Participación: Investigador/a **Entidades:** UPM-UNED **Duración:** 2023-2025

Investigador/es responsable/es Jesús Vicente Carbajosa y Ana Moliner Aramendía

Número de investigadores/as: 12. **Cuantía de la subvención:** 241.500 €

Título del proyecto: Biorremediación de ecosistemas contaminados por metales pesados y contaminantes orgánicos persistentes empleando sustratos y enmiendas eco-eficientes.

Referencia: CTM2013-47874-C2-1-R

Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Economía y competitividad.

Participación: Investigador/a **Entidades:** UPM-UAM-UNED-IMIDRA **Duración:** 2013-2017

Investigador/es responsable/es: Ana Moliner y Alberto Masaguer Rodríguez

Número de investigadores/as: 7 **Cuantía de la subvención:** 117.000 €

Título del proyecto: Recuperación de suelos contaminados con plantas autóctonas producidas en sustratos eco-compatibles y efecto de estos materiales en la biodisponibilidad y biodegradación de los contaminantes.

Referencia: CTM2009-13140-C02-01

Entidad/es financiadora/s: VI Plan Nacional de Investigación Científica, Desarrollo e Innovación Tecnológica 2008-2011. MICINN.

Participación: Investigador/a **Entidades:** UPM-UAM-UNED-IMIDRA **Duración:** 2009-2013

Investigador/es responsable/es: Alberto Masaguer Rodríguez

Número de investigadores/as: 12 **Cuantía de la subvención:** 63.000 €

Título del proyecto: Sustratos ecocompatibles y técnicas de fitorremediación con planta ornamental autóctona. Aplicación a la recuperación de suelos contaminados por metales pesados. **Referencia:** CTM2005-06258-C02-01/Tecno.

Entidad/es financiadora/s: Plan Nacional de I+D (Ministerio de Educación y Ciencia)

Participación: Investigador/a **Entidades:** UPM-UAM-UNED-IMIDRA **Investigador/es responsable/es:** Alberto Masaguer Rodríguez

Número de investigadores/as: 10

Duración: 2005-2008 **Cuantía de la subvención:** 154.000 €

Título del proyecto: Acciones para un Proyecto Integral en Sostenibilidad Alimentaria.

Entidad financiadora: Ayudas Europa-Investigación. UNED-Banco Santander **Participación:** Coordinadora. Investigadora Principal. **Entidades:** UNED-UPM-UAM **Número de investigadores/as:** 10. **Duración:** 2017-2018

Cuantía de la subvención: 4.000 €

Título del proyecto: Recursos didácticos tecnológicos aplicados al aprendizaje interdisciplinar de Ecología y Desarrollo Sostenible en universidades con metodología a distancia, UNED (España)-Universidad Aberta (Portugal), dentro del EEES.

Participación: Coordinadora

Entidad financiadora: Universidad Nacional de Educación a Distancia **Duración:** 2014-2015

Título del proyecto: Desarrollo e integración de materiales interactivos como estrategia metodológica en la mejora del proceso de enseñanza- aprendizaje en asignaturas del Grado en Ciencias Ambientales.

Participación: Coordinadora

Entidad financiadora: Universidad Nacional de Educación a Distancia **Duración:** 2016-2017

Cuantía de la subvención: 6.000 €

C3 Congresos más recientes

Pérez-Esteban J., Mayans B., Navas M., Escolástico C., Moliner A. Microbial communities in metal contaminated mine soils. *3rd International Meeting on New Strategies in Bioremediation/Restoration Processes*. Muttentz, (Switzerland), 2023

Pérez-Esteban J., Navas M., Caballero B., Escolástico C., Moliner A. *Meta-análisis de la comunidad microbiana en ambientes mineros contaminados con metales pesados*. IX Simposio nacional sobre control de la degradación y recuperación de suelos, Elche, 2021

Mayans B., R. Camacho-Arévalo, C. Garcia-Delgado, R. Antón, C. Escolástico, E. Eymar. Tetracyclines degradation by edible ligninolytic fungi. *6th International Conference on Sustainable Solid Waste Management*. Naxos (Greece), 2018.

Mayans B., C. Escolástico, J. Perez-Esteban, A. Masaguer y A. Moliner. "Evaluación de la capacidad de adsorción de Cu en Ácidos Húmicos y otras enmiendas orgánicas". *XXXI Reunión Nacional de suelos*. Madrid, 2017.

Mayans B., C. Escolástico, M.A. García, E. Eymar y A. Masaguer. "Interaction between copper and five selected organic amendments to used them to remediate polluted soils". *22nd International Sustainable Development Research Society Conference*. Lisbon, Portugal. 13-15 July, 2016.

Mayans B., C. Escolástico, M.A. E. Fernández y A. Masaguer Estudio de los procesos de compostaje y vermicompostaje mediante técnicas espectroscópicas (13CPMAS RMN Y FT-IR). V Jornadas Red de

Compostaje, Sevilla, Noviembre 2016

- Pérez Esteban J., L. Sinche, C. Escolástico, A. Masaguer, A. Moliner. "Use of leonardite humic acids for metals extraction in mine soils". *5th International EcoSummit Congress*. Montpellier (Francia), 2016.
- Escolástico C., B. Mayans, M.A. García, E. Eymar y A. Masaguer. "Estudio de enmiendas orgánicas mediante ¹³CPMAS NMR y Análisis Térmico (DSC) para su aplicación en la recuperación de suelos mineros contaminados" *Workshop on "Post-Mined Polluted Landscapes: Risk and Reclamation Techniques"* Cartagena, Spain. 22-24 abril, 2015.
- Escolástico C., B. Mayans, M.A. García, E. Eymar y A. Masaguer. "Study of Organic Amendmens by ¹³CPMAS NMR , Thermal Analysis (DSC) and FT-IR in order to be used to get mining soils recovered". *5th International Symposium on Soil Organic Matter*. Göttingen, Germany. 20-24 september, 2015.
- Escolástico, C., Pérez-Esteban, J., M.A. García, Moliner, A., Masaguer, A. Study of Organic Amendments used in Phytoremediation and its interactions with metals by ¹³C CPMAS NMR Spectroscopy. 11th International Phytotechnologies Conference, Heraklion (Crete, Greece) Sept 30– Oct 3, 2014.
- Escolástico, C., Mayans B., M.A. García, Eymar E. Masaguer, A. Estudio de enmiendas orgánicas mediante ¹³C CPMAS NMR y análisis térmico DSC) para su aplicación en la recuperación de suelos mineros contaminados. Presentación en el Workshop on "Post- Mined Polluted Landscapes: Risks and Reclamation Techniques". Cartagena (Spain). April 22-24, 2015
- Perez-Esteban, J., Escolástico, C., Moliner, A., Masaguer, A. Desorption dynamics of metals in contaminated soils amended with organic materials. Environmental Health 2013– Science and Policy to Protect Future Generations. Boston (EEUU), 3-6 Marzo, 2013.
- Perez-Esteban, J., Escolástico, C., Ruiz-Fernandez, J., Masaguer, A., Moliner, A. Use of organic materials and tolerant plants for phytoremediation of metals in degraded mine soils. 3rd International Conference on Soil Bio- and Eco-Engineering: the Use of Vegetation to Improve Slope Stability. Vancouver (Canadá), 23-27 Julio, 2012.

C.5 Dirección de tesis, proyectos fin de carrera, trabajos fin de master recientes

Dirección de 18 Trabajos Fin de Máster y 20 Trabajos Fin de Grado en Ciencias Ambientales.

Nombre doctorando: Javier Perez Esteban

Título: "Biodisponibilidad de metales pesados en suelos mineros contaminados enmendados con materiales orgánicos"

Fecha defensa tesis: Octubre 2011

Organismo: Universidad Politécnica de Madrid

Nombre doctorando: Begoña Mayans Rivilla

Título: "Aplicación de residuos agroambientales en la descontaminación de suelos"

Fecha defensa tesis: 2023. Organismo: UNED

Nombre doctorando: Lander Vinicio Pérez Aldas (Universidad Técnica de Ambato,

Título: "Caracterización de residuos de biomasa de cultivos agrícolas de la provincia del Tungurahua con potenciales energéticos"

Fecha defensa tesis: 2024. Organismo: UNED

Nombre doctorando: María Aldaya Rodríguez

Título: Evaluación del potencial del biochar procedente del árbol de neem (*Azadirachta indica*) en la recuperación de suelos degradados.

Fecha defensa tesis: 2025. Organismo: UNED

C5 CARGOS

- Subdirectora del departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica (2021-)
- Coordinadora de Centros de zona UNED en Pozuelo de Alarcón y Collado Villalba (2020-)
- Coordinadora del área disponibilidad Catedra UNESCO "Science and Innovation for Sustainable Development: Global Food Production and Safety". (2014-).
- Coordinadora del Máster Interuniversitario en Ciencias Agroambientales y Agroalimentarias entre la Universidad Autónoma de Madrid (UAM) y la Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED). (2016-)
- Coordinadora de especialidades del Master de Formación de Profesorado de Ecuador. (2014-2022).
- Profesora Tutora Erasmus. Convenios de Colaboración con la Universidad Aberta(Portugal). (2014-)
- Coordinadora del Grupo de Innovación Docente NEDACA. (2016-)
- Secretaria del Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica. Desde 01/11/2008 hasta 05/11/2010