

**PROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2007**

Nombre: Ortega Gutiérrez, Silvia

Referencia: RYC-2007-00181

Area: Química

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

Título:

Química biológica para el desarrollo de nuevas dianas terapéuticas

Resumen de la Memoria:

La línea que pretendo desarrollar dentro del presente Programa Ramón y Cajal se enmarca dentro del área de Química Biológica y lleva por título Química Biológica para el desarrollo de nuevas dianas terapéuticas. Dos de los problemas más acuciantes en el desarrollo actual de fármacos son la falta de i) nuevas dianas terapéuticas y ii) nuevas entidades moleculares. Para avanzar en la solución de ambos puntos es imprescindible aumentar nuestro conocimiento del sistema biológico (identificación de nuevas proteínas, interacciones y mecanismos de reconocimiento de ligandos). Recientemente la Química Biológica ha surgido como una nueva disciplina que integra la química y la bioquímica desde las etapas más tempranas del proyecto. Esta poderosa combinación de ambas disciplinas ha demostrado ya su capacidad para abordar problemas y obtener una información no accesible mediante otras técnicas tradicionales. Sin embargo es importante mencionar que en estos momentos, tanto en España como en Europa, existen pocos grupos desarrollando este tipo de investigación. Paradójicamente a esta situación, en Estados Unidos existe ya un considerable número de grupos trabajando en química biológica y en el desarrollo de sondas para obtener información acerca de la actividad de diversas enzimas, así como aplicando química modular y ortogonal e integrando metodologías de proteómica y metabolómica para obtener información de novo acerca de los sistemas biológicos. Durante mi estancia postdoctoral dentro de uno de los grupos pioneros en el desarrollo de estas metodologías y sus aplicaciones dirigido por el Prof. B. F. Cravatt en The Scripps Research Institute, he adquirido una amplia experiencia en el diseño y síntesis de sondas para la captura selectiva de determinadas fracciones del proteoma y su identificación mediante espectrometría de masas así como en un amplio espectro de técnicas de química biológica tales como estudios de perfiles de actividad enzimática en paralelo (activity based protein profiling, ABPP), aplicación de click chemistry para el estudio de sistemas biológicos y tecnología de identificación multidimensional del proteoma (MudPIT). En este contexto, en la línea de trabajo propuesta, pretendo realizar los siguientes proyectos: i) desarrollo de sondas fluorescentes para la visualización de la dinámica e interacción receptorial; ii) diseño de sondas covalentes para la identificación de sitios de unión y iii) desarrollo de una plataforma basada en espectrometría de masas para el establecimiento de perfiles de selectividad de novo en ligandos de receptores acoplados a proteínas G.

Resumen del Curriculum Vitae:

Durante mi Tesis Doctoral, titulada Estudio del proceso de recaptación de anandamida mediante la síntesis de inhibidores y evaluación de su aplicabilidad terapéutica y desarrollada entre 2000-2004 en el Laboratorio de Química Médica de la UCM bajo la dirección de la Prof. María Luz López Rodríguez y con la financiación de una beca predoctoral de Formación de Profesorado Universitario del MEC, desarrollé un proyecto dentro de área del sistema cannabinoide endógeno con el objetivo concreto de diseñar, sintetizar y desarrollar inhibidores de la recaptación de anandamida. La realización de esta Tesis Doctoral me permitió integrarme en un proyecto altamente multidisciplinar y adquirir experiencia en una amplia variedad de técnicas de interés en diferentes áreas incluyendo química médica, síntesis orgánica y bioquímica. Durante mi Tesis Doctoral llevé a cabo estancias en dos centros de investigación, The Scripps Research Institute (5 meses) e Instituto Cajal (12 meses). Posteriormente conseguí una beca postdoctoral dentro del programa conjunto MEC-Fulbright para realizar una estancia de dos años de duración (2005-2007) en el grupo dirigido por el Prof. Benjamin F. Cravatt en The Scripps Research Institute (California, EEUU), en el cual me incorporé como Postdoctoral Research Associate. Durante este período de tiempo desarrollé dos proyectos que me permitieron ampliar mi experiencia previa en síntesis química, bioquímica y biología molecular así como aprender las más recientes metodologías en el novedoso campo de la Química Biológica, tales como el diseño de sondas para el marcaje de proteínas, espectrometría de masas de proteínas (tecnología multidimensional de identificación de proteínas o MudPIT) o estudio de perfiles de actividad enzimática mediante marcaje con sondas basadas en actividad (ABPP). Tras la finalización de mi estancia postdoctoral me he incorporado a la Universidad Complutense de Madrid con una plaza de Profesor Ayudante, donde, además de la docencia correspondiente, estoy aportando al grupo al cual me he unido la iniciación de nuevas líneas de investigación. En particular estoy aplicando la experiencia adquirida en química biológica a la química médica, en concreto al descubrimiento de nuevas dianas terapéuticas y de nuevas entidades moleculares. En este sentido, en la actualidad he iniciado la codirección de dos Tesis Doctorales en estas áreas. En resumen, durante la totalidad de mi trayectoria investigadora hasta la fecha he realizado estancias pre- y postdoctorales en centros de investigación de prestigio internacionales (Instituto Cajal, The Scripps Research Institute), he formado parte del equipo investigador de 6 proyectos financiados por entidades públicas (MCYT, CAM) y soy autora de 2 patentes, un capítulo de libro, 15 artículos de investigación en las revistas de mayor prestigio del área (incluyendo Science, J. Med. Chem., J. Biol. Chem., FASEB J. y Biochemistry, entre otras), y 7 revisiones, de las cuales soy autora responsable de dos de ellas.

PROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2007

Nombre: Quintana Álvarez, José Benito

Referencia: RYC-2007-00250

Area: Química

Número de orden: 2 **Correo electrónico:** jbkuintana@udc.es

Título:

Contaminantes emergentes orgánicos polares: desarrollo de metodología analítica y estudio de su comportamiento en el medio acuático

Resumen de la Memoria:

El objetivo de la línea de investigación propuesta es el desarrollo de métodos analíticos para la determinación de contaminantes emergentes orgánicos polares en muestras de agua y su aplicación al estudio de los procesos de transformación medioambiental de los mismos en el medio acuático. Entre estos contaminantes se incluyen diversos fármacos, piroretardantes organofosforados, algunos herbicidas, filtros UV, agentes complejantes, etc. Para ello se hará uso de técnicas de microextracción, como microextracción en fase sólida (SPME), extracción por absorción en barra agitadora (SBSE), microextracción en fase líquida (LPME), extracción líquida asistida de membranas (MASE), etc. que se compararán con la extracción en fase sólida (SPE), por ser considerada hoy en día como la técnica de extracción de referencia. Las técnicas de microextracción ofrecen la ventaja de un consumo de disolvente virtualmente nulo, lo que las convierte en medioambientalmente más responsables. Además, no son técnicas exhaustivas, con lo que ofrecen una selectividad diferente a SPE. También se considerarán sistemas ζ lab-on-valve ζ (LOV) que permiten la miniaturización y automatización de la SPE on-line con cromatografía. La determinación se llevará a cabo por cromatografía de gases-espectrometría de masas (GC-MS), empleando derivatización cuando sea necesaria, y mediante cromatografía líquida-espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS). Esta metodología tiene la ventaja de que permite llevar a cabo además la identificación de metabolitos medioambientales de los contaminantes y se combinará con estudios en el laboratorio de biodegradación y/o degradación química con agentes oxidantes empleados en la desinfección de aguas (p. ej. cloro).

Resumen del Curriculum Vitae:

El solicitante, José Benito Quintana, se licenció en Química en la Universidad de Santiago de Compostela en 1999, obteniendo el Premio Extraordinario de Licenciatura (2002). A continuación se integró en el grupo de investigación de "Cromatografía y Quimiometría" que coordina el Prof. Rafael Cela. Durante la etapa predoctoral financiada con una beca F.P.U. del M.E.C., realizó dos estancias en centros internacionales de prestigio (3,5 meses en la EAWAG, Suiza bajo la supervisión del Dr. S. Müller y 3 meses en la Universidad Técnica de Berlín bajo la supervisión del Dr. T. Reemtsma). Esta etapa concluyó con la presentación de la tesis doctoral titulada "Desarrollo de nuevas metodologías analíticas para la determinación de contaminantes bioactivos en muestras de agua mediante técnicas cromatográficas acopladas a espectrometría de masas" que obtuvo la calificación de "sobresaliente cum laude" y la mención de Doctorado Europeo. Permaneció otros 4 meses en la Universidad de Santiago aprovechando la beca F.P.U. tras doctorarme y además, realizó estancias postdoctorales en el Departamento de Control de Calidad del Agua de la Universidad Técnica de Berlín durante un período total de 18 meses, empleando el tiempo restante de la beca FPU (6 meses) y una beca postdoctoral del M.E.C (12 meses). Durante este tiempo también colaboró con el Dr. M. Miró a través de una estancia breve en la Universidad de las Islas Baleares, gracias a la posibilidad que ofrece para ello la beca postdoctoral del M.E.C. En Enero de 2006 se incorporó al Instituto Universitario de Medio Ambiente de la Universidad de A Coruña con un contrato "Isidro Parga Pondal" financiado por el gobierno autonómico, en el cual trabaja actualmente, teniendo previsto realizar otra estancia de 4 meses en la Universidad Técnica de Berlín (Mayo-Agosto de 2007). Durante estos años, el investigador ha participado directamente en 5 proyectos de investigación (2 autonómicos, 2 nacionales y 1 europeo) publicando un total de 20 artículos en revistas de prestigio en las áreas de química analítica y medio ambiente, entre los cuales cabe destacar 4 artículos en la revista más importante del área (Analytical Chemistry). Además ha publicado un capítulo de libro (editado por Wiley) y un segundo se encuentra en prensa en la prestigiosa colección "Comprehensive Analytical Chemistry" de la editorial Elsevier. También ha presentado más de 25 comunicaciones a congresos (6 de ellas orales) y participa asiduamente como revisor para un total de 7 revistas internacionales del área de química analítica.

PROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2007

Nombre: Frutos Gaite, Luis Manuel

Referencia: RYC-2007-00095

Area: Química

Número de orden: 3 **Correo electrónico:** luisma.frutos@uah.es

Título:

Estudio Químico-Cuántico de Procesos Fotoquímicos y de Transferencia de Energía, Carga y Transferencia Protónica en Sistemas Químicos y Biológicos

Resumen de la Memoria:

La línea principal de mi investigación se centra en el estudio teórico con métodos ab initio (especialmente métodos multiconfiguracionales) de procesos fotoquímicos y de transferencia de energía, de carga y transferencia protónica fotoinducidos en sistemas químicos y biológicos. Estos procesos involucran en muchos casos cruces entre estados electrónicos (intersecciones cónicas o cruces evitados generalmente) que juegan un papel fundamental en el proceso de decaimiento al estado fundamental y por lo tanto en el mecanismo molecular del fenómeno fotoinducido (por ejemplo, en reacciones fotoquímicas estos cruces determinan la naturaleza de los fotoproductos de reacción). Los procesos anteriormente mencionados se encuentran entre los más importantes en la química de los sistemas vivos, y son fundamentales en numerosos procesos biológicos; desde la fotoestabilidad de las proteínas y del ADN gracias a los procesos acoplados de transferencia electrónica y protónica, pasando por el proceso de conversión de la energía solar en energía química en la fotosíntesis, la función biológica de algunas proteínas como las Rodopsinas en las que el grupo cromóforo, el retinal, sufre una isomerización cis-trans que desencadena una serie de procesos que conforman la visión en vertebrados superiores, o la terapia fotodinámica en el tratamiento de algunos tipos de cáncer. Asimismo estos procesos conforman la esencia de la fotoquímica tanto del estado singlete como del triplete y abarcan una gran parte de las estrategias de síntesis en química orgánica. Dentro de los métodos que se usan para el estudio químico-cuántico de estos procesos caben destacar los métodos multiconfiguracionales (CASSCF, CASPT2) en la descripción de la estructura electrónica de los sistemas, el uso de numerosos algoritmos y herramientas teóricas para la exploración de propiedades topológicas de las superficies de energía potencial, o la realización de dinámicas semiclásicas y cuánticas (de paquetes de onda) para el estudio de las propiedades dinámicas de los sistemas.

Resumen del Curriculum Vitae:

Mi Tesis Doctoral (Julio de 2004) fue distinguida con el Premio Extraordinario de Doctorado. Durante el doctorado mi actividad investigadora se centro inicialmente en el estudio de la reactividad química en el estado fundamental, así como el estudio de la teoría de bifurcaciones en reacciones químicas para después ampliarse al estudio de procesos fotoquímicos y de transferencia de energía en hidrocarburos insaturados y compuestos orgánicos. Estas investigaciones se apoyaron además en la experiencia adquirida en tres estancias en tres prestigiosos grupos europeos especialistas en fotoquímica y fotofísica teórica: Los grupos del Prof. Máximo Olivucci de la Universidad de Siena, Italia (6 meses) la Prof. Manuela Merchán de la Universidad de Valencia, España (3 meses) y el grupo del Prof. Peter Karadakov, Universidad de York, UK (3 meses). Tras un breve período postdoctoral en la Universidad de Alcalá (6 meses) donde trabajé en el estudio teórico de la transferencia de energía triplete-triplete, pasé más de un año como investigador postdoctoral en la Universidad de Siena (Italia) trabajando principalmente en el desarrollo de una metodología QM/MM (AMBER/CASSCF/CASPT2) para la realización de dinámicas semiclásicas así como en su aplicación al estudio del proceso ultrarápido de isomerización cis-trans del retinal en dichas proteínas. Tras este período, y hasta la fecha (en Abril de 2007 hará un año) estoy trabajando como investigador postdoctoral en la Universidad Técnica de Munich (Alemania) en el grupo del Prof. Wolfgang Domcke en el desarrollo de dinámicas cuánticas para el estudio de la fotoestabilidad del ADN y de proteínas a través de transferencia protónica fotoinducida. Soy coautor de 20 trabajos de investigación publicados en revistas internacionales de alto índice de impacto en química y en ciencia general (Proc. Nat. Ac. Sci. ; Ang. Chem. Int. Ed.; J. Am. Chem. Soc.; J. Phys. Chem. A; J. Chem. Phys.; Org. Lett.; J. Org. Chem.; Organometallics; Eur. J. Inor. Chem...) y tengo varios trabajos enviados o en preparación actualmente (ver CV). Más de una treintena de comunicaciones a congresos entre pósters, comunicaciones orales, conferencias cortas y conferencias invitadas. He recibido el premio "QSCP Promising Scientist Prize of CMOA" que otorga anualmente el "Centre de Mécanique Ondulatoire Appliquée" en Agosto del 2006 en San Petersburgo, así como el Premio Extraordinario de Doctorado en Química. Asimismo he obtenido en carácter concurrente la beca de formación de personal investigador (FPU) del Ministerio de Educación y Ciencia en el año 2000 para la realización de la Tesis Doctoral, la beca de "Ayuda para finalización de Tesis Doctoral" de la Universidad de Alcalá en el año 2004, la beca postdoctoral del Ministerio de Educación y Ciencia (2005) y la beca postdoctoral de la Asociación Alexander von Humboldt (2007). Tengo la habilitación como Profesor Ayudante Doctor, por la ACAP en el año 2006 y soy "reviewer" de las siguientes revistas: J. Am. Chem. Soc., J. Phys. Chem., Org. Lett. y J. Org. Chem. He impartido docencia en la Universidad de Alcalá durante mi etapa doctoral colaborando en un total de 8 asignaturas y por 325 horas de clase y como Colaborador Docente en el Proyecto de créditos ECTS (European Credit Transfer System). He participado en un total de 5 proyectos de investigación financiados por diversos organismos públicos españoles (ver CV) con una financiación total de 235.000 Euros aproximadamente.

PROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2007

Nombre: Domine , Marcelo Eduardo

Referencia: RYC-2007-01840

Area: Química

Número de orden: 4 **Correo electrónico:** marcelo.domine@catalyse.cnrs.fr

Título:

SÍNTESIS EN UNA SOLA ETAPA DE AMINO ÁCIDOS Y HETEROCICLOS NITROGENADOS A PARTIR DE DERIVADOS DE LA BIOMASA EMPLEANDO MATERIALES NANO-ESTRUCTURADOS

Resumen de la Memoria:

El aprovechamiento de la biomasa como fuente renovable de energía y productos químicos es una de las alternativas hacia el anhelado desarrollo sostenible en el futuro. En este contexto, después de un primer tratamiento de la biomasa se pueden obtener fácilmente poli-alcoholes, tales como glicerol y azúcares, y éstos pueden utilizarse como sustratos de partida alternativos en una amplia gama de reacciones orgánicas para producir moléculas de alto valor agregado (especialidades o intermediarios para síntesis de medicamentos). Por otro lado, la síntesis de compuestos orgánicos tales como amino ácidos (a-AA, principales componentes de las proteínas) y heterociclos nitrogenados (intermediarios muy utilizados en farmacología) continúa siendo un desafío. Así, mientras algunos a-AA son sintetizados en varias etapas de reacción utilizando catalizadores homogéneos y enzimas, algunas piperidinas y piperazinas pueden prepararse mediante varias reacciones de condensación (cetonas o aldehídos + NH₃) sobre catalizadores sólidos en fase gaseosa. En todos los casos, procesos y catalizadores son altamente específicos y caros, y los rendimientos obtenidos moderados. El objetivo del presente trabajo es la síntesis en una etapa de estos compuestos nitrogenados a partir de poli-alcoholes derivados de la biomasa (i.e. glicerol) utilizando un único catalizador multi-funcional y nano-estructurado capaz de realizar varios pasos de reacción en cascada. Las reacciones se realizarán en fase líquida utilizando agua como disolvente (o sin disolvente) y otros reactivos económicos y disponibles tales como O₂, H₂ y NH₃. De entre las distintas posibilidades, la obtención de a-AA incluirá la deshidratación / oxidación selectiva del glicerol hacia el ácido pirúvico seguidas por un paso final concertado de aminación-alquilación en presencia de NH₃ y un compuesto aromático. En el caso de los heterociclos nitrogenados, la síntesis en una sola etapa incluye la aminación selectiva de alcoholes y posterior condensación hacia piperazinas, seguidas por un paso de deshidrogenación hacia las correspondientes pirazinas. Nuevos nano-materiales multi-funcionales serán desarrollados basados en sólidos ya conocidos (zeolitas de poro grande, zeolitas deslaminadas, y materiales mesoporosos ordenados / amorfos, entre otros) con acidez de Brønsted/Lewis, y en nuevos sólidos zeolíticos con propiedades redox/ácidas, así como materiales conceptualmente novedosos (¿composites¿). Propiedades de oxidación/reducción adicionales se pueden alcanzar mediante la inclusión de metales de transición y/o la deposición de nano-partículas de metales nobles. Modificaciones en las propiedades de adsorción (hidrofobia/hidrofilia) de los catalizadores mediante funcionalización de la superficie ayudaría a manejar las diferencias de polaridad entre reactivos y productos y a aumentar la resistencia al agua del catalizador.

Resumen del Curriculum Vitae:

TITULACIONES: Licenciado en Química, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina. 1992. Master en Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina. 1996. Doctor en Química, por la Universidad Politécnica de Valencia (ITQ - CSIC), Valencia, España. Dirección: Prof. Dr. A. Corma. 2003. POSICIÓN ACTUAL: Contrato Posdoctoral, Institut de Recherches sur la Catalyse et l'Environnement de Lyon, IRCELYON (CNRS), Villeurbanne, Francia. Supervisión: Prof. C. Mirodatos (05/2005-06/2007). PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN: A- En Cordoba, Argentina. Investigador Principal: A. R. Suarez ¿ Area: Química Organometálica. Financiación: 1. CONICET - 1993-1995. 2. CONICOR - 1994.3. SECyT - 1994.4. SECyT - 1995.5. CONICOR - 1995-1997. B- En Valencia, España (ITQ, CSIC - UPV). Investigador Principal: A. Corma. 6. "Zeolitas Deslaminadas" (CICYT - 1999-2002). 7. "Procesos Catalíticos de Petroquímica y Refino" (CICYT - 2002-2005). Con Empresas: 8. ACEDESA, (TAKASAGO Division), Murcia, ESPAÑA (1998-2003). 9. SUMITOMO, INT. CO., Osaka, JAPÓN (1998-2001). 10. UOP LLC, Research Center, Des Plaines, Illinois, U.S.A. (1998-2002). 11. RHODIA Chimie, S. A., Lyon, FRANCIA (2000-2002). 12. ENI RESEARCH, Milán, ITALIA (2001-2002). 13. HUNTSMAN POLYMER CO., USA ¿ HOLANDA (2003-2004). 14. Repsol Química, REPSOL-YPF, Madrid, SPAIN (2004-2005). 15. LURGI, Frankfurt, GERMANY (2004-2005). 16. SUMITOMO, INT. CO., Osaka, JAPAN (2004-2005). C- En Lyon, Francia (IRCELYON - CNRS). Investigador Principal: C. Mirodatos. 17. "BIOELECTRICITY" (FP-5 Projects, EC - 2002-2005). 18. "BIOCOP" (FP-6 Projects, EC - 2006-2010). PUBLICACIONES: 1. Tetrahedron, 54, 7375-7386, 1998. 2. Chemical Communications, 2211-2212, 1998. 3. Chemical Communications, 779-780, 1999. 4. Chemical Communications, 137-138, (2), 2000. 5. Journal of American Chemical Society, 122(12), 2804-2809, 2000. 6. Angewandte Chemie, International Edition, 39(8), 1499-1501, 2000. 7. Chemical Communications, 1725-1726, (18), 2000. 8. Studies in Surface Science and Catalysis, 135, 1812-1819, 2001. 9. Journal of American Chemical Society, 124(13), 3194-3195, 2002. 10. Journal of Catalysis, 210, 192-197, 2002. 11. Journal of Catalysis, 215(2), 294-304, 2003. 12. Chemical Communications, 4042-4044, 2005. 13. Journal of Catalysis, 242, 299-308, 2006. 14. Applied Catalysis A: Gral., doi:10.1016/j.apcata.2007.02.018, 2007. EN PRENSA. 15. Hydrogen Production ... M. E. Domine et al. Catalysis Today, 2007. ACEPTADO. 16. Towards the Co-processing ... M. E. Domine et al. Journal of Catalysis. Marzo 2007. ENVIADO. PATENTES: 1. PCT Int. Appl., WO 2000034181 (ES 1998-2567), 2000. 2. PCT Int. Appl., WO 2000044670 (ES 1999-214), 2000. 3. PCT Int. Appl., WO 2000054880 (ES 1999-565), 2000. 4. US Patent 6191323, 2001. 5. PCT Int. Appl., WO 2001037629 (ES 2000-2520), 2001. 6. PCT Int. Appl., WO 2002031086 A1 (ES 2000-2520), 2002. 7. PCT Int. Appl., WO 2002083819 (ES 2001-960), 2002. 8. PCT Int. Appl. WO 2003044129 (ES 2001-2754), 2003. 9. FR Demande, FR 2835251, 2003. 10. PCT. Int. Appl. WO 2004015030 (ES 2002-1943), 2004. 11. Eur. Pat. Appl. EP 1403358, 2004. 12. PCT Int. Appl. WO 2005123654 (ES 2004-1508), 2005. 13. Eur Pat. Appl. EP 1707553 (JP 2005-101690), 2006. 14. PCT. Int. Appl. WO 2006-11160 (ES 2005-00994), 2006. PRESENTACIONES A CONGRESOS: 19 (11 Poster y 8 Comunicaciones Orales). CONFERENCIAS INVITADAS: 2 (SECAT 2005 y UNC Argentina 2006).

**PROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2007**

Nombre: rodriguez iglesias, maria amor

Referencia: RYC-2007-00781

Area: Química

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

Título:

Activación de CO₂ mediante compuestos de elementos de transición.

Resumen de la Memoria:

La utilización del CO₂ como material de partida en síntesis química (unidad C1) ha sido un objetivo importante para los químicos organometálicos durante las últimas décadas que resurge con vigor en los años presentes, debido en buena medida a la influencia perjudicial del aumento de la concentración del CO₂ atmosférico (el denominado efecto invernadero: calentamiento global y posible cambio climático). Se pretende investigar en este trabajo la utilización del dióxido de carbono en síntesis, en particular su posible conversión en sustancias orgánicas oxigenadas tales como ácidos carboxílicos, ésteres, alcoholes y otras, mediante reacciones diversas, entre ellas las que impliquen la adición formal de un enlace C-H sobre una de las agrupaciones =C=O del dióxido de carbono. Sirven como referencia la formación de ácido acrílico a partir de CO₂ y C₂H₄ inducida por complejos de molibdeno y wolframio (E. Carmona y col.) cuyo carácter duro como ácidos de Lewis se modificaría mediante la coordinación con bases de Lewis blandas como fosfitos bidentados, arilfosfinas y otros ligandos similares; y también el acoplamiento oxidante del CO₂ con alquenos, alquinos, dienos conjugados y otras moléculas orgánicas insaturadas (H. Hober y col.; D. Walter y col.; y otros autores) inducido por complejos de hierro, níquel y paladio fundamentalmente. La reducción de CO₂ a CH₃OH es también un proceso de importancia capital (G. Olah, ¿The Methanol Economy?) que se considerará en este trabajo. Como compuestos precursores se emplearán inicialmente complejos de molibdeno y wolframio con ligandos que poseen átomos de fósforo como dadores, fundamentalmente fosfitos bidentados y trifosfinas de tipo [RB(CH₂PAR₂)₃]. Paralelamente se iniciaría el estudio de la reactividad frente al CO₂ de diversos complejos de rodio(I) estabilizados mediante los ligandos trifosfina anteriores (con sustituyentes alquilo y también arilo), reactividad que se compararía con los análogos de tris(pirazolil)borato con los mismos sustituyentes (por ejemplo, RB(CH₂PMes₂)₃— y HB(pzMes)₃—).

Resumen del Curriculum Vitae:

La solicitante Amor Rodríguez Iglesias se licenció en Ciencias Químicas (especialidad: Inorgánica) por la Universidad de Oviedo (1993-1998). Posteriormente inició sus estudios de Doctorado en el Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, desarrollando su labor investigadora bajo la dirección de los profesores Víctor Riera y Julio A. Pérez, obteniendo el grado de Doctora por la Universidad de Oviedo en Marzo de 2002 con la calificación de Sobresaliente Cum Laude. Su trabajo durante este periodo se centró en el estudio de la síntesis y reactividad de complejos de molibdeno(II) y wolframio(II) con ligandos alilo y difosfina, así como la síntesis de complejos organometálicos de rutenio empleando como ligandos benzodiazepinas. Tras el doctorado, se incorporó al grupo del Profesor Guy Bertrand en el Departamento de Química Inorgánica de la Universidad de California-Riverside (Estados Unidos), inicialmente como investigadora posdoctoral (2002-2003) y posteriormente como becaria posdoctoral (MEC). Durante su estancia posdoctoral ha trabajado en el campo de la síntesis y estabilización de di y polirradicales singlete de fósforo y boro. En Enero de 2005 entra a formar parte del grupo de investigación del Profesor Ernesto Carmona en el Instituto de Investigaciones Químicas-Isla de La Cartuja (CSIC-Universidad de Sevilla), donde se encuentra disfrutando de un Contrato posdoctoral para jóvenes investigadores dentro del Programa I3P (CSIC). Desde entonces ha estado trabajando en la química de dímeros de cinc(I) con enlace cinc-cinc estabilizados con ligandos ciclopentadienilo sustituidos. Parte de los resultados obtenidos, tanto en su tesis doctoral como en sus estancias posdoctorales han sido publicados en revistas de reconocido prestigio internacional. Inorg. Chem., 2007, aceptado para su publicación; Angew. Chem. Int. Ed., 2007, 46, 1296-1299. J. Am. Chem. Soc., 2007, 129, 693-703; Angew. Chem. Int. Ed., 2004, 43, 4876-4880; Angew. Chem. Int. Ed., 2004, 43, 4880-4883. (Hot paper); ACS Symposium Series Book, Modern Aspects of Main Group Chemistry, ACS Symposium Series No. 917, American Chemical Society, Washington, DC, 2005, pp 81-93; Organometallics, 2003, 22, 1540-1545; J. Chem. Soc., Dalton Trans., 2003, 1641-1644; Angew. Chem. Int. Ed., 2002, 41, 1427-1429 (Hot paper); Organometallics, 2002, 21, 5437-5438.

PROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2007

Nombre: Filippone, Salvatore

Referencia: RYC-2007-00888

Area: Química

Número de orden: 6 **Correo electrónico:** salvatore.filippone@quim.ucm.es

Título:

Nueva Química en los Fullerenos: Desde el estudio de nuevas reacciones hasta la obtención de derivados opto y electro activo.

Resumen de la Memoria:

La línea principal de investigación de este proyecto, se encuentra enmarcada en la búsqueda de nueva reactividad y de nuevos derivados fullerénicos para posibles aplicaciones en dispositivos opto-electrónicos. Por otro lado, se pretende extender el alcance de estos estudios hacia nuevas estrategias sintéticas en la química orgánica. Fullerenos: nuevo y versátil bloque de construcción molecular en la química del fullereno. Los fuller-1,n-eninos (eninos en que la componente olefínica pertenece a la superficie curvada del fullereno) han demostrado su utilidad como bloque de construcción molecular en la químicas de los fullerenos (Angew. Chem. Int. Ed., 2006, 45, 1439-1442). Estos sistemas ofrecen nuevas oportunidades para el estudio de nuevas reacciones y de mecanismos bajo tensiones geométricas que involucran átomos con una inusual hibridación $sp^{2,3}$. Este uso de los fullerenos como banco de prueba para el estudio de nuevas reacciones, se ha revelado de particular utilidad, demostrando que son posibles nuevas variantes de la reacción ζ énica, donde un grupo propargilo actúa como un grupo ζ ene, conduciendo, de manera eficiente, a la obtención de alenos (Org. Lett., 2006, 8(26), 5959-5962). Uno de los objetivos de este proyecto es extender el alcance de esta reacción para desarrollar un método general y eficiente para la preparación de alenos. Tal y como se ha visto en los fullerenos, los dos requerimientos básicos para el diseño de los eninos de partida son: i) el ζ enofilo tiene que ser una olefina pobre en electrones o un grupo carbonilo y ii) que a lo largo de la cadena estén presentes carbonos cuaternarios o heteroátomos para satisfacer las condiciones de Thorpe-Ingold. El objetivo final es extender el alcance de dicha metodología para obtener alenos de manera estereocontrolada, a través el uso de la catálisis asimétrica, con o sin metales de transición. Dispositivos fotovoltaicos Los procesos de transferencia electrónica son fundamental para la comprensión y el desarrollo de la Electrónica Molecular. Aprovechando de la experiencia de nuestro grupo (Adv. Funct. Mater., 2005, 15, 1979-1987), se estudiará el diseño y la síntesis de nuevos materiales para captar la luz y para el almacenamiento de energía. Con esa finalidad, serán preparados nuevos derivados fullerénicos (C60 y C70) capaces de transformar la luz solar en electricidad. Más específicamente, se pretende llevar a cabo la preparación de fullerenos modificados con cromóforos que absorban la luz solar de forma eficaz en la región del visible (bisimidias, escuarenos etc.). Por otro lado, se obtendrán nuevos derivados de fullerenos adecuadamente funcionalizados para formar estructuras organizadas en el estado sólido, mediante interacciones supramoleculares, con objeto de mejorar la morfología y el transporte de carga y por consiguiente, la eficiencia del dispositivo fotovoltaico.

Resumen del Curriculum Vitae:

Cursé mis estudios de Ciencias Químicas en la Universidad de Pavia (ITALIA), finalizando con la presentación de un proyecto de investigación sobre reacciones fotoquímicas de cetonas aromáticas con silanos y derivados dibencílicos. La calificación global que obtuve fue: 110/110 cum laude. Desarrollé la Tesis Doctoral en la misma universidad, bajo la dirección de los profesores Giovanni Desimoni y Giuseppe Faita, con un proyecto sobre síntesis asimétrica catalizada por metales de transición. A lo largo de dichos estudios analicé el funcionamiento de diferentes ligandos de tipo bisoxazolínico con simetría C_{2v} sobre algunas reacciones modelo como por ejemplo: la cicloadición Diels-Alder, la cicloadición 1,3 dipolar o la reacción de Mukaiyama-Michael. Posteriormente, me trasladé a Paris, al Departamento de Química de la École Normale Supérieure donde realicé una estancia posdoctoral de dos años con los profesores André Rassat y René Bensasson, trabajando en un proyecto financiado por la Unión Europea dedicado a la evaluación de la actividad biológica de derivados fullerénicos. Este proyecto se centró en la síntesis de metanofullerenos unidos covalentemente a beta y gamma ciclodextrinas, solubles en agua, y en el estudio de sus propiedades fotofísicas. Desde mayo 2002 hasta hoy, trabajo en la Universidad Complutense de Madrid en el grupo de Materiales Moleculares Orgánicos bajo la dirección del Prof. Nazario Martín. La principal línea de investigación en la que estoy involucrado es el desarrollo de nuevas reacciones en fullerenos y sus derivados. Esta línea de investigación dentro del grupo del Profesor Martín se está desarrollando desde hace tan solo cuatro años y, en ella, he participado de forma activa. Los logros alcanzados han permitido que el fullereno con su geometría curvada sea utilizado como un auténtico banco de pruebas para nuevas reacciones con alquenos altamente tensionados. Además del desarrollo de esta química básica en fullerenos, también trabajo en la síntesis de derivados fullerénicos que puedan ser utilizados como componentes activos en células solares orgánicas y en el desarrollo de oligómeros π -conjugados para ser utilizados como cables moleculares en dispositivos opto-electrónicos. Publicaciones mas relevantes: "Retro-Cycloaddition Reaction of Pyrrolidinofullerenes". Angew. Chem. Int. Ed., 2006, 45, 110-114 (publicado como Very Important Paper). "Selective Electrochemical Retro-Cycloaddition Reaction of Pyrrolidinofullerenes". Angew. Chem. Int. Ed., 2006, 45, 7430-7433. "Intramolecular Ene Reaction of 1,6-Fullerenynes: A New Synthesis of Allenes". Org. Lett., 2006, 8(26), 5959-5962. "Thermal [2+2] Intramolecular Cycloaddition of Fuller-1,6-enynes". Angew. Chem. Int. Ed., 2006, 45, 1439-1442. "The regioselective Intramolecular Pauson-Khand Reaction on C60: Electrochemical Study and Theoretical Underpinning". Chem. Eur. J., 2005, 11, 2716-2729. "Highly efficient Pauson-Khand reaction with C60: regioselective synthesis of unprecedented cis-1 bicycloadducts". Chem. Commun., 2004, 1338-1339. "A highly water-soluble 2:1 π -cyclodextrin:fullerene conjugate". Chem. Commun., 2002, 1508-1509.

**PROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2007**

Nombre: Gierschner , Johannes

Referencia: RYC-2007-01559

Area: Química

Número de orden: 7 **Correo electrónico:** johannes@averell.umh.ac.be

Título:

Novel conjugated materials and nanostructured supramolecular systems at the crossroad of spectroscopy, theory and materials

Resumen de la Memoria:

In the last 30 years, conjugated organic materials have made their way from basic research to real applications in optoelectronic devices. However, there is still a huge demand for a thorough understanding of the interplay of the inherent molecular properties with the structural and morphological factors which control the performance of the final device. While film morphology is basically a technological issue, the interplay of inherent and structural factors, which in turn are controlled by the intrinsic properties, can be well treated by an appropriate combination of spectroscopic and theoretical techniques. My research line brings together a strong background in materials, in common & advanced techniques of optical spectroscopy and in quantum-chemical and (semi-)classical theoretical methods. This crossroad approach allows for a systematic understanding of the electronic, optical and photophysical properties of novel conjugated oligomeric and polymeric materials from isolated molecules, via nanostructured supramolecular host-guest compounds, to liquid crystals and nanoparticles. The oligomer approach offers - chemically and structurally - well-defined, easy processible entities with homogeneous conjugation lengths and high purity. Systematic variation of the repetition unit, substitution pattern, and oligomer length, enables reliable predictions of the electronic and optical properties of novel polymeric materials. Defined environments allow for the investigation of solvent, temperature and rigidity effects. Dimeric model compounds permit a reduction of dimensionality in the investigation of intermolecular interactions. Supramolecular channel forming host-guest systems enable quantitative modeling of energy migration processes in highly concentrated dye systems and explore new materials for nano-engineering. The nanoparticle approach offers an easy, fast and reproducible preparation of self-assembled conjugated materials. Hereby nanoparticles are not only ideal model systems to systematically study specific inter-chromophore interactions by controlling size and structure. They are also promising candidates for device applications by facile and cheap colour tuning and by controlling film morphology at the nanoscale.

Resumen del Curriculum Vitae:

I have studied Chemistry at the University of Tübingen, Germany, with a strong emphasis in organic materials, crystal structure, and spectroscopy, graduating 1995 with a thesis in optical spectroscopy. In 2000 I received my PhD with 'Influence of intermolecular interactions on the photophysics in films and nanoparticles of p-conjugated organic molecules - Optical spectroscopy on oligophenylenevinylenes'. Side projects contained 'Reflectance spectroscopy on dyes absorbed on zeolites' and 'Particle sizing of nanoparticle suspensions and emulsions by static and dynamic light scattering'. A two-week stay with J. Lakowicz, Baltimore (MA), completed my knowledge in short-pulse time-resolved fluorescence. In 2000, I became a teacher, researcher, and head of the institute administration in equal shares at the Institute for Physical Chemistry, University of Tübingen. Within the latter, I had full responsibility for administrative management; as an academic teacher, I was directing experimental courses and giving my own lectures; as an independent scientist, I developed a specific approach to the understanding of novel materials at the crossroad of spectroscopy, theory, and materials. In 2002 I successfully applied for a European RTN NANOCHANNEL [2002-2006, coordinating 8 European research groups, total budget of 1.5 Mio Euros]. The network enriched my profile by thorough knowledge in research management (coordination, reporting, organization of colloquia and schools), in science (supramolecular systems, energy transfer processes, and host-guest interactions), and teaching (supervision of postdoctoral researchers, lectures). After the re-structuring of the institute in 2003, I was employed as a postdoctoral researcher within a research project POLITAG 'Polymer-Electronics Identifications-Tags'. In 2004, a three-week stay at the Rutherford Labs, Chilton (UK) advanced my knowledge in fluorescence microscopy. The lack of a thorough theoretical description of the optical and photophysical properties of conjugated organic materials through the eyes of a spectroscopist - which often turn the attention to different aspects than those of a theoretician - motivated me in 2004 to move to the theory group of David Beljonne and Jérôme Cornil in Mons, Belgium [Descartes prize for the group in 2003], where I hold a position as a research fellow ever since. Here, I was part of several (inter)national research projects (SOLTEX, SOLPLAST, MODECOM), dealing with the quantum-chemical characterization of the geometric, optical and vibrational properties of organic materials for opto-electronic devices. My theoretical studies were complemented by a four-month stay in 2005 at GeorgiaTech, Atlanta, with J.-L. Brédas. Experimental short stays in different labs through well-defined projects, e.g. G. Lanzani (Politecnico di Milano) on pump-probe fs-spectroscopy, advanced my experimental knowledge. Since 2006, I am coordinating a European Marie-Curie Training Network NANOMATCH within the 6th framework of the EC, bringing together 12 European research groups with a total budget of 3.7 Mio Euros. The interdisciplinary approach of my research resulted in numerous collaborations, all well-documented in joint publications and/or on-going joint projects.

PROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2007

Nombre: Gotor Fernández, Vicente

Referencia: RYC-2007-00903

Area: Química

Número de orden: 8 **Correo electrónico:** vicgotfer@fq.uniovi.es

Título:

Desarrollo de metodologías quimioenzimáticas modernas: diseño, y racionalización. Aplicación de compuestos enantioméricamente puros en organocatálisis

Resumen de la Memoria:

Este proyecto combina el uso de la síntesis química con la biocatálisis para la preparación de productos de alto interés biológico e industrial. Así, se plantea el desarrollo de nuevas rutas quimioenzimáticas utilizando enzimas comerciales que han demostrado ser excelentes biocatalizadores en sistemas acuosos u orgánicos como por ejemplo la lipasa de *Candida antarctica* y la de *Pseudomonas cepacia*. Entre los sustratos objeto de estudio en este proyecto destacan el empleo de aminas secundarias, diaminas y derivados de imidazol, cuya resolución enzimática nos permitiría acceder a valiosos compuestos susceptibles de ser aplicados en química médica como precursores de fármacos o catálisis asimétrica en forma de líquidos iónicos enantiopuros. Para ello será necesario aplicar distintas técnicas analíticas en el seguimiento de los procesos enzimáticos por lo que nos hemos planteado el diseño de ensayos colorimétricos de actividad que nos permitan identificar rápidamente los biocatalizadores más activos. En los casos que fuera necesario se abordaría la modificación genética de distintas enzimas hidrolíticas, reductasas y oxigenasas a través de métodos de evolución dirigida, lo cual podría permitir el desarrollo de reacciones enzimáticas no convencionales como la creación de enlaces entre átomos de manera regio- y enantioselectiva catalizada por lipasas. El hecho de utilizar enzimas modificadas genéticamente para estudiar sus posibilidades en reacciones aldólicas y de adición tipo Michael se complementará con estudios de modelización molecular, que permitirían explicar y predecir el comportamiento y la promiscuidad catalítica de estos biocatalizadores. Así, los distintos procesos quimioenzimáticos que se pretenden abordar en este proyecto se detallan a continuación: Resolución cinética de aminas secundarias cíclicas, ya que hasta la fecha existen lipasas activas para la preparación de aminas primarias pero son escasos los ejemplos descritos con aminas secundarias. Además las estructuras tipo quinolina, isoquinolina e indolina están presentes en numerosos productos naturales y compuestos de interés fisiológico. Desimetrización enantioselectiva de derivados de 1,3-propanodiamina, unidad presente en compuestos con importantes funciones biológicas, puesto que aunque la desimetrización de alcoholes y derivados de ácidos carboxílicos es bien conocida, no existen referentes en la actualidad sobre la desimetrización enzimática de aminas. Preparación de derivados de imidazol ópticamente activos mediante procesos de transesterificación o aminólisis enzimática y posteriores modificaciones con el fin de obtener líquidos iónicos enantiopuros los cuales presentan la ventaja de sus múltiples aplicaciones en organocatálisis. Uso de hidrolasas en procesos no convencionales como la formación regio- o enantioselectiva de enlaces carbono-carbono ó heteroátomo-carbono con el fin de preparar compuestos de interés biológico e industrial.

Resumen del Curriculum Vitae:

El solicitante realizó sus estudios de licenciatura y doctorado en la Universidad de Oviedo. Entre los años 1997 y 2001 desarrollo su Tesis Doctoral bajo la supervisión del Profesor Vicente Gotor Santamaría y la Doctora Susana Fernández González trabajando en la síntesis de derivados de la vitamina D3 mediante metodologías quimioenzimáticas, obteniendo el Premio Extraordinario de Doctorado. Durante este período participó en distintos proyectos de investigación destacando su colaboración con la empresa Du Pont Ibérica en la optimización de procesos para la obtención de fungicidas que dio lugar a la solicitud de una patente. Durante este tiempo en la Universidad de Oviedo colaboró como profesor asistente en docencia de prácticas de laboratorio de la Licenciatura de Química. En junio de 2002 se incorporó al grupo del Profesor Nicholas John Turner en la Universidad de Edimburgo con un contrato Marie Curie de dos años de duración concedido por la Unión Europea, para trabajar en el desarrollo de amino oxidasas enantioselectivas por métodos de evolución dirigida y su aplicación a procesos de desracemización de aminas, familiarizándose con técnicas de biología molecular y resonancia magnética nuclear de muestras sólidas, participando activamente en diversos seminarios de investigación así como en el desarrollo de prácticas de laboratorio en la Licenciatura de Química de esa universidad. En enero de 2005 se reincorporó al grupo de Bioorgánica de la Universidad de Oviedo dentro del Programa Juan de la Cierva donde se encuentra actualmente trabajando en distintos proyectos de investigación como la síntesis y resolución enzimática de distintos tipos de aminas, desarrollo de catalizadores nucleófilos y líquidos iónicos quirales o en el diseño de procesos enzimáticos no convencionales para lo cual se ha especializado en el uso de técnicas de modelización molecular como herramientas de predicción y racionalización. Además es usuario habitual de técnicas de análisis como la resonancia magnética nuclear, cromatografía líquida y gaseosa, la electroforesis capilar... Actualmente supervisa el trabajo de investigación de tres estudiantes de doctorado que trabajan en las ramas especificadas con anterioridad, habiendo presentado como director una Tesis Doctoral en marzo de 2007. También ha dirigido dos Tesis de Licenciatura y una Memoria de Investigación. Está incluido dentro del plan docente del Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la Facultad de Química de la Universidad de Oviedo donde ha impartido docencia en distintas asignaturas de la Licenciatura de Química y de Ingeniería Técnica Forestal. Su experiencia investigadora queda reflejada en la aceptación de una patente, 20 trabajos de investigación en revistas de alto índice de impacto incluyendo revisiones bibliográficas como experto conocedor del trabajo con enzimas en disolventes orgánicos y 3 capítulos de libros. Además, varios trabajos más están en preparación o enviados para su publicación. Ha participado en varios congresos científicos internacionales, formando parte en la actualidad del comité organizador del congreso internacional Biotrans 2007, uno de los más reconocidos internacionalmente dentro del campo de la Biocatálisis. Además está acreditado desde el 23 de Octubre de 2006 por la Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación (ANECA) como profesor contratado doctor, profesor colaborador, profesor ayudante doctor y profesor de universidad privada.

PROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2007

Nombre: Vivo Truyols, Gabriel

Referencia: RYC-2007-00007

Area: Química

Número de orden: 9 **Correo electrónico:** vivo@science.uva.nl

Título:

Desarrollo de métodos quimiométricos no supervisados: agilización del tratamiento masivo de datos en cromatografía y espectroscopia

Resumen de la Memoria:

Una de las mayores dificultades en los laboratorios modernos es la conversión de la enorme cantidad de datos obtenida en información. La quimiometría ha estado ocupada en el diseño de algoritmos dedicados a esta tarea. Sin embargo, estos métodos no suelen alcanzar el nivel de análisis de rutina fundamentalmente por tres razones (i) la demanda de usuarios experimentados es muy alta (ii) la instrumentación y los datos obtenidos son muy complejos y (iii) la cantidad de datos a analizar es enorme (alrededor de 1 GB/hora). Esta línea de investigación tiene como objetivo cubrir el hueco que todavía existe entre los métodos quimiométricos avanzados y su aplicación al análisis de rutina con instrumentación moderna. De manera más específica, esta línea de investigación consiste en la semiautomatización de las etapas de pre-procesado, procesado y validación de métodos de tratamiento de datos. Mediante el uso de métodos semiautomáticos, se reduce la demanda de usuarios experimentados. Obviamente, nunca se podrán procesar completamente todos los datos de forma automatizada: la idea es marcar aquella parte de los datos que no ha podido ser analizada de forma automática, que deberá ser revisada manualmente en un segundo paso. En cualquier caso, el ahorro en tiempo y dinero es relevante, puesto que la demanda de usuarios experimentados decrece. La porción relativa de datos que debe ser analizada manualmente puede depender de la calidad requerida de los resultados. Las áreas de aplicación de esta línea de investigación son principalmente la industria farmacéutica, petroquímica y alimentaria, e implican el uso de métodos cromatográficos y espectroscópicos. Tanto la instrumentación analítica como las aplicaciones han sido seleccionadas en base a mi experiencia previa. De todos modos, me gustaría señalar que no estoy restringido ni a estas áreas ni a este tipo de instrumentación.

Resumen del Curriculum Vitae:

He publicado alrededor de 25 artículos, fundamentalmente en las áreas de quimiometría aplicada a cromatografía líquida. Parte de mi investigación se focaliza en la optimización de métodos cromatográficos (últimamente en cromatografía bidimensional). Otra parte se desarrolla en el tratamiento de datos cromatográficos (ajuste de picos cromatográficos, calibración multivariante, resolución multivariante de curvas y métodos de regresión). Poseo experiencia tanto en el diseño de algoritmos (programación) como en el manejo de instrumentación analítica. Últimamente, mi área de investigación se ha expandido a diversos tipos de instrumentación analítica (cromatografía de líquidos bidimensional, cromatografía de gases; espectrometría de masas y resonancia magnética nuclear, fundamentalmente). Actualmente estoy desarrollando proyectos de investigación con aplicaciones en ciencias forenses, análisis de polímeros, industria farmacéutica e industria de alimentación. Gran parte de mi investigación se desarrolla en contacto directo con la industria. He desarrollado investigación en 4 universidades europeas (Navarra, Valencia, Bruselas y Ámsterdam). He dado clases en tres de ellas (Navarra, Valencia y Ámsterdam). Actualmente (universidad de Ámsterdam) estoy dirigiendo 6 tesis de Máster, y estoy involucrado en la co-dirección de 3 tesis doctorales. He pronunciado alrededor de 10 conferencias orales en congresos internacionales (algunas de ellas por invitación de los organizadores). He sido becario FPI, post-doc y actualmente disfruto de una beca Marie-Curie de la Unión Europea. Llevo 3 años en el extranjero. Hablo con fluidez tres idiomas europeos (castellano, catalán, inglés) y tengo un conocimiento básico de otros tres (holandés, francés e italiano). Premios: premio extraordinario de doctorado (Valencia;06), ¿DL Massart award in chemometrics¿ (Bruselas¿06), primer premio al mejor poster en el congreso SCM-2 (Ámsterdam¿05), tercer premio al mejor poster en el congreso ISC¿04 (París¿04), primer premio ¿San Alberto¿ (Palma de Mallorca¿01). Soy revisor regular de distintas revistas (J. Chromatogr. A, Anal. Chim. Acta., Chemom. Intell. Lab. Syst., J. Chemom., etc.). Recientemente, la editorial internacional Elsevier ha contactado conmigo para escribir lo que puede constituir mi primer libro.

**PROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2007**

Nombre: LHIAUBET -, Virginie

Referencia: RYC-2007-00476

Area: Química

Número de orden: 10 **Correo electrónico:** lvirgini@itq.upv.es

Título:

Fotocatalizadores biomiméticos: Fotoenzimas, anticuerpos fotocatalíticos y sistemas modelos

Resumen de la Memoria:

La fotobiocatálisis es una estrategia muy atractiva que aprovecha la estructura del sitio activo o del sitio de interacción de la enzima para canalizar la conformación de los estados excitados del sustrato y controlar así a los productos. A pesar de dichas propiedades, los ejemplos de fotocatálisis enzimática o biomimética presentados son hasta ahora escasos. Se pretende realizar el estudio de catálisis biomimética de reacciones fotoquímicas clásicas fotobiocatalizadas por enzimas, anticuerpos catalíticos y sistemas modelos de fotoenzimas. Como reacciones se centrará la atención, en primer lugar, en aquellas que tienen un rol biológico relevante como la fotociclación [2+2] con la formación de dímeros de timina, la fotocicloaddición de Paternó Büchi al origen de la formación de fotoaductos (6-4) de la timina y también sus procesos de ciclorreversión respectivos. Por otra parte, se propone estudiar otras reacciones clásicas de la fotoquímica como la foto-Claisen y la foto-Fries, relacionadas al nivel mecanístico ya que tratan de la obtención de fenoles orto- y para-sustituídos a partir de ésteres o éteres. Se seguirá la evolución de las reacciones con técnicas analíticas (HPLC/HPLC-MS, GC/GC/MS) y se caracterizarán los fotoproductos obtenidos, lo cual permitirá la comparación de la distribución regio- y/o estereoselectiva de los fotoproductos en las reacciones fotobiocatalizadas o no. En paralelo, se utilizarán técnicas espectroscópicas (fotólisis de destello láser, fluorescencia estacionaria y resuelta en el tiempo) con el propósito de estudiar las interacciones entre el fotobiocatalizador y el sustrato en sus estados excitados, y también obtener la información relevante a nivel de interacción y de reactividad con la biomolécula para entender y mejorar los procesos involucrados en la fotocatálisis biomimética. Estos sistemas son de gran utilidad tanto a nivel de la fotoquímica fundamental como también a nivel más aplicado de la química biológica como el diseño de nuevos agentes de reparación de daños al ADN.

Resumen del Curriculum Vitae:

El candidato empezó su trayectoria científica en el grupo de la Dra Nicole Paillous en el Laboratorio de las IMRCP (Univ. Paul Sabatier Toulouse, Francia) donde realizó su tesis doctoral. Su trabajo se centró en el estudio de la fotosensibilización del ADN por fármacos derivados de cetonas aromáticas. Durante la elaboración de dicha tesis adquirió una formación importante en fotoquímica (separación y caracterización de fotoproductos) como también en técnicas de detección y caracterización del daño al ADN por electroforesis. Actualmente y desde Noviembre 2001, el candidato desarrolla sus líneas de investigación en el grupo del Prof. Miguel Ángel Miranda en el Instituto de Tecnología Química UPV-CSIC de Valencia. En primer lugar, realizó una estancia postdoctoral gracias a la concesión de una beca Marie Curie (Individual Fellowship), seguida de una beca de la Fundación José y Ana Royo y de una del Ministerio español para estancias de jóvenes doctores y tecnólogos extranjeros en España. Los temas desarrollados durante este periodo postdoctoral se centraron en la búsqueda de procesos enantioselectivos en las interacciones de los estados excitados de fármacos con las biomoléculas o sus componentes. Así, el candidato se especializó en las técnicas espectroscópicas de fotólisis de destello láser, de fluorescencia estacionaria/resuelta en el tiempo. De Octubre 2005 a Marzo 2006, el candidato realizó una estancia postdoctoral en el Centro de Investigación del Hospital La Fe, donde puso a punto el ensayo Comet que permite revelar los daños del ADN como resultado de la fotosensibilización de células enteras (fibroblastos, hepatocitos). Al cabo de este periodo, se reincorporó al Instituto de Tecnología Química UPV-CSIC con un contrato I3P Doctor y una nueva línea de investigación titulada ¿Fotocatalizadores biomiméticos: fotoenzimas, anticuerpos fotocatalíticos y sistemas modelos¿. Las aptitudes adquiridas por el candidato corresponden al estudio fotoquímico, fotofísico y fotobioquímico de fotosensibilizadores. Se consiguió un dominio de las técnicas espectroscópicas (UV-Visible, fluorescencia y fosforescencia estacionaria y resuelta en el tiempo, fotólisis de destello láser), analíticas (HPLC fase directa/reversa/quiral con detección por UV-VIS, por fluorescencia, por masa), de caracterización (RMN, IR, RPE), de electroforesis como también de manipulación de elementos radioactivos (32P), de sustancias biológicas (ADN, proteína, células).

PROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2007

Nombre: **Mas Balleste, Ruben**

Referencia: RYC-2007-00985

Area: Química

Número de orden: 11 Correo electrónico: mas@chem.umn.edu

Titulo:

Catalizadores de níquel bioinspirados para procesos de oxidación.

Resumen de la Memoria:

Procesos de oxidación constituyen un paso imprescindible en la síntesis de numerosos productos químicos, tanto de especies químicas simples, como de sofisticados compuestos químicos tales como los obtenidos en la industria farmacéutica. Además, en los últimos años, procesos oxidativos han sido estudiados como nuevas estrategias para lograr la desulfuración de petróleo o el tratamiento de contaminantes que consisten en especies halogenadas, lo cual puede tener un gran impacto en el diseño de tecnologías más respetuosas con el medio ambiente. Sin embargo, gran parte de los procesos de oxidación requieren el uso de metales pesados en altos estados de oxidación y son generalmente estequiométricos, caros y nocivos para el medio ambiente. En un esfuerzo por superar estos inconvenientes se han hecho grandes avances en el desarrollo de sistemas catalíticos bioinspirados que utilizan catalizadores basados en centros metálicos inocuos y baratos, y oxidantes limpios tales como O₂ o H₂O₂. La inspiración para el diseño de estos catalizadores se ha encontrado en el descubrimiento del papel vital de centros de hierro o cobre en enzimas que catalizan importantes procesos de oxidación en los seres vivos. Como consecuencia, la química de oxidación de complejos de estos metales ha alcanzado un grado notable de madurez. Sin embargo, en muchos casos, aun se está lejos de poder implementar los catalizadores bioinspirados en procesos a gran escala. En la línea de investigación que se propone, se explorarán nuevas alternativas para lograr catalizadores bioinspirados eficientes. El reciente descubrimiento de proteínas que contienen átomos de níquel y que están envueltas en procesos redox, tales como ζ SuperOxide Dimutase ζ (Ni-SOD) y ζ Acireductone dioxigenase ζ (ARD) servirá de inspiración para estos estudios. El propósito de esta línea de investigación será estudiar diferentes complejos de níquel que serán diseñados con el objetivo de mimetizar las características estructurales fundamentales que se encuentran en la naturaleza, aplicando las técnicas y conceptos desarrollados en el estudio de compuestos de hierro y cobre. Una cuestión fundamental que se abordará en diversos proyectos de esta línea es como la reactividad es afectada por la esfera de coordinación primaria. En los proyectos dedicados al estudio de la reactividad y actividad catalítica de estos nuevos compuestos de níquel, se utilizará una amplia variedad de oxidantes (O₂, H₂O₂, alquilhidroperóxidos, perácidos y yodosobenceno (PhIO)) y sustratos (alcanos, alquenos, arenos, sulfuros orgánicos y compuestos halogenados). Por otra parte, los proyectos dedicados al estudio de los mecanismos de activación del enlace O-O se realizarán desde una perspectiva multidisciplinar en los que se intentará ζ atrapar ζ y caracterizar espectroscópicamente intermedios metaestables y se realizarán medidas cinéticas tanto de los procesos de formación como de descomposición de tales especies químicas. Por otra parte, se obtendrán parámetros estructurales, termodinámicos y cinéticos por medio de cálculos teóricos. En resumen, aplicando las técnicas, conocimientos y principios propios de la química bioinorgánica, esta línea de investigación pretende descubrir nuevas reactividades y nuevos mecanismos en procesos de oxidación utilizando compuestos de níquel, con el objetivo final de diseñar una nueva generación de catalizadores bioinspirados eficientes, económicamente rentables y respetuosos con el medio ambiente.

Resumen del Curriculum Vitae:

Después de obtener la licenciatura en Química por la Universidad Autónoma de Barcelona (UAB) en Junio de 1998, yo, Rubén Mas Ballesté, me incorporé, gracias a una beca pre-doctoral concedida por la UAB, al grupo de investigación de la Dra. Pilar Gonzalez-Duarte del departamento Química de la misma universidad para realizar mi tesis doctoral, la cual fue co-dirigida por el profesor Agustí Lledós. La tesis doctoral, la cual se leyó el 13 de Febrero de 2004, fue merecedora del premio extraordinario de doctorado, otorgado por el departamento de química de la UAB. La investigación durante este periodo doctoral se centró en varios aspectos de la reactividad de compuestos de fórmula general [L₂Pt(μ-S)₂PtL₂], inexplorados hasta ese momento, para lo que se utilizaron diversas técnicas experimentales (RMN, ESI-MS, MALDI-TOF-MS difracción de rayos X, voltametría cíclica), así como cálculos teóricos. Los resultados obtenidos permiten prever futuras aplicaciones de estos compuestos en áreas tales como catálisis, química organometálica y química supramolecular. Durante mis dos últimos años en la UAB colaboré en la dirección del trabajo de dos nuevos jóvenes investigadores (Ainara Nova Flores y Fernando Novio Vázquez) en nuevas líneas de investigación que exploran el uso de complejos de Platino en la activación de enlaces C-F o C-S. Se prevé que en Julio de 2007 se lea la tesis doctoral de Fernando Novio Vázquez, de la cual soy co-director. Gracias a una beca concedida por el ministerio de educación y ciencia, en Junio de 2004 me incorporé al grupo de investigación del profesor Lawrence Que Jr en la University of Minnesota para realizar una estancia post-doctoral. Desde Junio de 2004 hasta el momento presente he colaborado con el grupo del profesor Que en el desarrollo de catalizadores bioinspirados, diseñando compuestos no-hemo de hierro capaces de catalizar procesos químicos similares a los procesos de oxidación de sustratos orgánicos en los que participan diversas enzimas. Durante mi trayectoria como investigador he publicado 17 artículos en revistas internacionales de reconocido prestigio (1 Science (perspective), 2 Angewandte Chemie International Edition, 1 Journal of the American Chemical Society, 3 Chemistry, a European Journal, 3 Inorganic Chemistry, 1 Organometallics, 2 Dalton transactions, 2 European Journal of Inorganic Chemistry, 1 Journal of Molecular Catalysis A: Chemical and 1 Inorganica Chimica Acta). También se han presentado 11 comunicaciones en congresos de ámbito internacional y 6 comunicaciones en congresos de ámbito nacional. Sin embargo, no solo eso, si no también cabe destacar el valor formativo de mis periodos pre- y post-doctorales. Durante mi periodo pre-doctoral he adquirido experiencia en síntesis y caracterización de compuestos inorgánicos, cálculos teóricos y reacciones de activación de enlaces C-S o C-F. A esto se añade la formación obtenida durante el periodo post-doctoral en el estudio de reacciones de oxidación catalizadas por compuestos de hierro, el uso de técnicas de baja temperatura para ζ atrapar ζ intermedios metaestables, y el uso de sofisticadas técnicas espectroscópicas (resonancia raman, RMN de compuestos paramagnéticos, Mossbauer, EXAFS). En conjunto, la trayectoria expuesta me concede la experiencia, formación y competencia necesarias para afrontar con garantías una nueva etapa profesional como investigador independiente.

PROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2007

Nombre: Angulo Álvarez, Jesús

Referencia: RYC-2007-01791

Area: Química

Número de orden: 12 **Correo electrónico:** jesus@iiq.csic.es

Título:

Reconocimiento Molecular de Carbohidratos en Sistemas Polianiónicos y Multivalentes: RMN y Química Computacional aplicada a Glicosaminoglicanos y Gliconanopartículas

Resumen de la Memoria:

El creciente interés por el estudio de procesos de reconocimiento molecular en los que estén implicados carbohidratos se puede comprender considerando la gran cantidad de información que pueden almacenar (el también denominado "código de los azúcares"), como consecuencia de unas estereoquímica y polaridad particulares. Aunque multitud de estudios, principalmente para carbohidratos neutros, han caracterizado las interacciones clave responsables de la afinidad y especificidad (enlaces de hidrógeno de grupos polares clave, interacciones de vdW, enlaces de hidrógeno no convencionales, CH- π en interacciones carbohidrato-aromático), hay dos aspectos importantes de las interacciones carbohidrato-receptor que todavía requieren de más investigación: (a) las bases estructurales que posibilitan una alta especificidad en interacciones receptor-carbohidratos polianiónicos, ya que implican fundamentalmente interacciones por pares que son no-direccionales (carga-carga); y (b) los efectos sobre las interacciones glicano-receptor, desde el punto de vista estructural, de las presentaciones multivalentes de carbohidratos que se encuentran típicamente en la Naturaleza. Se propone profundizar en el conocimiento de estos aspectos mediante la aplicación de la espectroscopía RMN y la química computacional, para estudiar: (1) la estructura, dinámica, e interacciones de glicosaminoglicanos (GAGs), que son poli-/oligosacáridos polianiónicos altamente cargados, presentes fundamentalmente en la matriz extracelular (MEC) y que están implicados en un gran número de fenómenos biológicos clave; y (2) la estructura, dinámica, e interacciones de clusters metálicos 3-D, de tamaño nanométrico, funcionalizados con sustancias bio-activas, como los azúcares (gliconanopartículas, GNPs). Para (1) se propone combinar las técnicas espectroscópicas y computacionales de uso común para estos sistemas con nuevas aproximaciones. Así, se esperan obtener alineamientos débiles de éstos poli-/oligosacáridos en el espectrómetro de RMN, para medir constantes de acoplamientos residuales dipolares, un nuevo tipo de restricciones experimentales que no se habían usado hasta ahora para GAGs, así como también es esperable que el uso de la paralelización intensiva que se implementa en los programas de modelización molecular recientes permita llevar a cabo simulaciones de dinámica molecular más largas (> 50ns) que las descritas hasta ahora para estos sistemas. El tema de investigación (2) propone una aproximación original para estudiar interacciones débiles de carbohidratos por espectroscopía RMN, aprovechando el incremento de afinidad debido a la presentación multivalente del compuesto bio-activo (efecto cluster). Se propone utilizar técnicas de RMN de bioafinidad para caracterizar interacciones molécula-pequeña molécula, que en muchas ocasiones son difíciles de observar por estas técnicas, utilizando las nanopartículas como plataformas 3-D de gran tamaño para la inmovilización de uno de los ligandos, con los cambios correspondientes en sus propiedades hidrodinámicas y de relajación.

Resumen del Curriculum Vitae:

Jesús Angulo Álvarez obtuvo el título de Licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de Sevilla (1998) y comenzó su carrera investigadora el mismo año en el Grupo de Carbohidratos del Instituto de Investigaciones Químicas (CSIC), en Sevilla, obteniendo el grado de doctor en diciembre de 2002, bajo la supervisión del Dr. Pedro M. Nieto (Beca "Fundación Ramón Areces", convocatoria 1998). Durante este período, adquirió una formación sólida especializándose en técnicas de RMN y de modelización molecular, estudiando estructuras 3-D y dinámicas de oligosacáridos tipo-heparina sintéticos y biológicamente activos, como modelos homogéneos de los glicosaminoglicanos naturales (GAGs) que actúan como receptores de baja afinidad en la transducción de la señal mitogénica estimulada por factores de crecimiento para fibroblastos (FGFs). Sus estudios permitieron establecer correlaciones estructura-actividad en la participación de los GAGs en dichos procesos mitogénicos. Para llevar a cabo medidas de relajación por RMN y estudiar dinámicas de los GAGs, realizó una estancia corta en el Instituto Ronzoni de Milán. Asimismo, durante este período contribuyó a los estudios estructurales de pseudodisacáridos moduladores de señalización intracelular (inositolfosfoglicanos). En febrero de 2003 se incorporó al laboratorio del Prof. Thomas Peters en la Universidad de Lübeck, Alemania, con un contrato post-doctoral de la Universidad. De enero de 2004 a diciembre de 2005, el candidato disfrutó de una beca post-doctoral individual europea "Marie Curie" (convocatoria 2003), para trabajar en dicho laboratorio. Esta etapa le permitió adquirir una experiencia substancial en métodos de RMN de bioafinidad, en uno de los laboratorios pioneros en estas técnicas. Asimismo continuó realizando un trabajo importante en cálculos de modelización (docking ligando-proteína). Aunque sus estudios se centraron en el reconocimiento de substratos por glicosiltransferasas humanas, también colaboró en estudios de interacciones virus-péptidos, y reconocimiento molecular en Importinas humanas, por RMN. Como valor añadido, trabajó también en la producción de enzimas recombinantes (sobre-expresión y purificación) tanto en abundancias naturales, como adecuadamente marcadas en isótopos activos en RMN (^{15}N , ^2H), adquiriendo experiencia también en las diferentes técnicas para las medidas de actividad (ensayos enzimáticos radio-químicos), plegamiento (dicroísmo circular), y estados de multimerización (Light scattering, microscopio de transmisión electrónica). Desde enero de 2006, el candidato trabaja en el Instituto de Investigaciones Químicas como post-doctoral contratado "Juan de la Cierva" (convocatoria 2005), en estudios por RMN y modelización de interacciones proteína - carbohidratos polianiónicos y en RMN de interacciones de gliconanopartículas multivalentes. Desde marzo de 2006 hasta febrero de 2007, disfrutó de una ayuda europea "Marie Curie" para su reincorporación, que permitió la inclusión de un estudiante pre-doctoral para el proyecto de RMN de gliconanopartículas (Marie Curie Reintegration Grant, convocatoria 2005). Sus contribuciones científicas multidisciplinarias se han recogido en 24 contribuciones a congresos científicos nacionales e internacionales, 1 conferencia invitada, 18 publicaciones en revistas internacionales de impacto en su campo, 1 capítulo de libro, así como 1 manuscrito enviado, 1 en preparación, y 1 capítulo de libro en prensa.

PROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2007

Nombre: alvarez puebla, ramon

Referencia: RYC-2007-00168

Area: Química

Número de orden: 13 **Correo electrónico:** Ramon.Alvarez-Puebla@nrc-cnrc.gc.ca

Título:

Fabricación, optimización y aplicación de nuevos ζ optical enhancers ζ para SERS

Resumen de la Memoria:

El desarrollo de síntesis selectivas para la fabricación de nanocristales metálicos y semiconductores es un área de intenso interés debido a la dependencia de las propiedades de estas nanoestructuras respecto a su tamaño, forma y composición química. En particular, la preparación de nanoestructuras metálicas anisotrópicas tiene gran aplicación en el desarrollo de sensores ópticos (optical enhancers) para surface-enhanced Raman scattering (SERS). Mi línea principal de investigación se centra en la fabricación, desarrollo y aplicación de nuevos materiales activos en SERS con alta actividad óptica, reproducibilidad, sintonizabilidad plasmónica y estabilidad química a través del control del tamaño, forma, composición química y propiedades superficiales de materiales nanoestructurados de oro, plata y sus aleaciones con otros metales. Estos sensores permiten la ultra-detección (con límites de detección de incluso una sola molécula) de analitos de gran importancia en diversos campos entre los que destacan el diagnóstico biomédico (drogas, patógenos, marcadores de enfermedades), ciencias medioambientales (detección de contaminantes en aguas y suelos), seguridad (detección de agentes químicos, biológicos o explosivos) desarrollo de nuevos fármacos o caracterización estructural. Los sensores basados en SERS tienen un alto potencial para disminuir sensiblemente el costo de producción y aumentar los límites de detección de una gran cantidad de sustancias. Por otro lado, estas plataformas son no invasivas, ofrecen una gran información del analito (ya que contienen su huella dactilar vibracional) y pueden ser usadas para el estudio a distancia de fuentes de contaminación extraordinariamente tóxicas.

Resumen del Curriculum Vitae:

Dr. Ramon A. Alvarez Puebla Research Officer Supramolecular Nanoscale Assembly Group (SNAG) National Institute for Nanotechnology, National Research Council of Canada (NINT-NRC) Los campos de especialización del Dr Alvarez Puebla se centran en espectroscopía vibracional, fabricación, modificación y caracterización de materiales nanoestructurados con propiedades ópticas, y caracterización de superficies de materiales funcionales. Durante la realización de sus tesis doctoral en la Universidad Pública de Navarra, El Dr Alvarez estudió los fenómenos de retención de varios metales de transición sobre sustancias húmicas y arcillas, desarrollando un nuevo modelo teórico, basado en la química de coordinación de dichos metales, para explicar sus procesos de retención específica (coordinación en la superficie) y precipitación superficial [1, 2]. Dichos procesos se estudiaron mediante una combinación de técnicas microscópicas (espectroscopía vibracional y de difracción de rayos x, microscopía electrónica de barrido y modelización molecular) y macroscópicas (isotermas de adsorción y sus modelos matemáticos) [1-8]. Durante su estancia posdoctoral en la Universidad de Windsor (ON, Canada), El Dr. Alvarez desarrollo nuevas metodologías para la preparación de ζ nano-shells ζ y nano-coloides con tamaño, geometría y propiedades plasmónicas controlables, así como nuevos métodos para la fabricación de películas delgadas activas en SERS [9-14]. Por otro lado, estos nuevos materiales nano-estructurados se utilizaron para la caracterización vibracional, y ultra-detección de biomoléculas, contaminantes [15, 16], y macromoléculas [17-20] mediante espectroscopías SERS (surface-enhanced Raman scattering), y SEIRA (surface-enhanced infrared absorption) y cálculos computacionales usando métodos ab initio/DFT. La combinación de nano-fabricación de ζ optical enhancers ζ y el estudio de algunos de los factores que afectan a la señal en SERS, llevaron a nuevas aproximaciones que incrementan el factor de aumento (enhancement-factor) de la señal de estas técnicas ultra-sensibles [9, 13, 14, 21]. En colaboración con el Centro de Investigación y Desarrollo de General Motors Corporation en Warren (MI, USA), el Dr Alvarez fue responsable de un proyecto exploratorio para el desarrollo e ingeniería de nano-materiales en sistemas de conversión de energía tales como celdas de combustible y baterías avanzadas [9, 14]. Desde su llegada al SNAG, el interés científico del Dr Alvarez se centra en el desarrollo de nuevas tecnologías para la detección de patógenos y biomoléculas mediante espectroscopía Raman/SERS. Esta línea de investigación general incluye i) el desarrollo y caracterización de nuevos coloides y películas delgadas con actividad óptica para SERS [22-25]; ii) aplicación directa de espectroscopía SERS en la ultra-detección patógenos y bioanalitos [26, 27]; iii) micro y nano-fabricación de sistemas híbridos polímero/coloide/biomolécula para detección avanzada mediante Raman/SERS [27-31]; iv) nuevas plataformas para SERS, con propiedades ópticas estables en el tiempo, para el estudio de fuentes de contaminación (química y biológica) altamente tóxicas [27]; y, v) aplicación de espectroscopía Raman/SERS para el marcado e identificación de bienes de consumo [32, 33].

PROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2007

Nombre: Luque Garcia, Jose Luis

Referencia: RYC-2007-00384

Area: Química

Número de orden: 14 **Correo electrónico:** jlluque@cni.es

Título:

Desarrollo e implantación de métodos analíticos de cuantificación basados en espectrometría de masas para el estudio de expresión proteica diferencial

Resumen de la Memoria:

Las proteínas controlan de forma directa casi todos los procesos celulares, por lo que son necesarias nuevas herramientas proteómicas para avanzar en biología post-genómica. La espectrometría de masas (MS), debido a su increíble avance en los últimos años, se presenta como una alternativa muy prometedora. En el campo de la MS, los métodos analíticos de cuantificación son de especial relevancia en este aspecto. Estos métodos, además de para identificar diferencias en niveles relativos de expresión proteica entre dos tipos de células o tejidos, son especialmente útiles para la determinación de cambios funcionales relevantes a nivel celular. En la actualidad existen diferentes estrategias de cuantificación que hace uso de MS, siendo las más empleadas las basadas en marcaje isotópico tales como ICAT (Isotope-Encoded Affinity Tags), SILAC (Stable Isotope Labeling by Amino Acids in Cell Culture) y las basadas en marcaje con agua pesada. Consisten en el marcado isotópico de una de las poblaciones celulares o tejidos que se quieren comparar con objeto de obtener péptidos químicamente idénticos en ambas muestras, salvo por la diferencia de masa conferida por la presencia de isótopos en los péptidos de una de las muestras. Esta diferencia de masa se traduce en la aparición de un doblete en el espectro de masas, donde el péptido de masa menor corresponde a las células o tejidos que no han sido marcados y el de masa mayor corresponde a las muestras marcadas isotópicamente. La relación existente entre las intensidades de pico ambos péptidos en el espectro de masas se puede relacionar directamente con la abundancia relativa de la proteína a la cual pertenece el péptido, en ambas muestras. En la línea de investigación propuesta se pretende desarrollar e implantar métodos de cuantificación, especialmente la estrategia SILAC que actualmente no se ha implantado en ningún laboratorio de proteómica español y que es el que ha proporcionado mejores resultados hasta la fecha, así como desarrollar otros métodos basados en marcaje con agua pesada o métodos *label-free*. El método SILAC tiene la ventaja de que realiza una incorporación metabólica de amino ácidos isotópicos consiguiendo un marcaje del 100% y, además, permite mezclar las dos poblaciones celulares antes de realizar tratamientos tales como fraccionamiento, purificación, extracción, etc., eliminando, por tanto, cualquier error en la cuantificación. La utilización de estos métodos permitirá el estudio de diversos procesos celulares y serán de especial utilidad en el estudio del cáncer. Por un lado, se utilizarán para identificar biomarcadores y dianas terapéuticas comparando proteínas expresadas diferencialmente en células de cáncer y células normales, y por otro se podrán emplear para estudiar diferentes mecanismos celulares de respuesta frente a diferentes estímulos o perturbaciones, interacciones de proteínas, dinámicas de señalización celular, modificaciones post-transcripcionales y un largo etcétera.

Resumen del Curriculum Vitae:

El solicitante José Luis Luque García se licenció en Ciencias Químicas (Sep 95-Jun 2000) por la Universidad de Córdoba con un excelente expediente y la calificación global final de sobresaliente. Posteriormente realizó su Tesis Doctoral en el Departamento de Química Analítica de la Universidad de Córdoba bajo la supervisión de la Dra. M. D. Luque de Castro con una beca FPU del Ministerio de Educación. Durante este periodo se especializó en el diseño, desarrollo, optimización y validación de métodos analíticos, con especial énfasis en los métodos de tratamiento de muestras sólidas así como en el uso de métodos quimiométricos de tratamiento y optimización de datos. Al final de la etapa predoctoral y con el doble objetivo de cumplir uno de los requisitos para la obtención del Doctorado Europeo y de enfocar su carrera dentro de la química bioanalítica, el solicitante realizó una estancia en el laboratorio del Prof. Righetti de la Universidad de Verona en Italia. Allí se formó en el uso de técnicas proteómicas. Finalmente, en diciembre de 2003 el solicitante presentó y defendió su Tesis obteniendo la calificación de sobresaliente cum laude por unanimidad y recibió el premio extraordinario de Tesis concedido por la Universidad de Córdoba en 2004. Durante su etapa post-doctoral en el laboratorio de Espectrometría de Masas del Skirball Institute of Biomolecular Medicine de la New York University y bajo la supervisión del Dr. T. Neubert, el solicitante se ha convertido en un experto en el uso de MALDI-(Q)-TOF, ESI con infusión directa y LC-MS/MS y en diversas metodologías proteómicas tales como digestión enzimática en disolución, en gel y en membrana, electroforesis, western blotting, purificación de proteínas de membrana, reacciones de cross-linking, etc., habiendo participado en un amplio número de proyectos financiados por el NIH y en colaboración con los grupos del Dr. T.T. Sun (bioquímica de la diferenciación urotelial) y del Dr. D. Fishman (National Ovarian Cancer Early Detection Program) con quien se realizó un estudio SILAC. La productividad científica del solicitante se puede resumir en la participación en: 18 proyectos de investigación; intervención en 45 publicaciones científicas, incluyendo 39 artículos de investigación, 5 capítulos de libro y un libro. Se están preparando 7 artículos más y otro capítulo de libro. Los 39 artículos han sido publicados en revistas de reconocido prestigio internacional con proceso de revisión, habiendo sido publicados 32 de ellos en revistas con un índice de impacto dentro del top 25%. Esto supone que el solicitante ha participado en el desarrollo de más de 25 métodos analíticos. Hay que destacar los 4 trabajos publicados en la revista *Analytical Chemistry*, la revista con más prestigio y mayor índice de impacto en su área. El solicitante es el primer autor en 17 artículos y corresponding author en 7. Asimismo, cabe destacar el índice de impacto acumulado, que es de 117.1, y el número de citas acumuladas que alcanza las 338 en este momento. Los trabajos realizados han sido presentados en un total de 25 comunicaciones a congresos, 19 internacionales y 6 nacionales (7 orales y 18 póster), ha participado en una patente, supervisado a 5 estudiantes de doctorado y co-dirigido una tesis doctoral. También, desde 2005, actúa como referee externo habitual de las revistas *Journal of Chromatography A* y *Talanta*.

**PROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2007**

Nombre: Caballero Bevia, Ana Reyes

Referencia: RYC-2007-00082

Area: Química

Número de orden: 15 **Correo electrónico:** ana@lcc-toulouse.fr

Título:

Reacción de borilación de enlaces C-H de alcanos catalizada por complejos de cobre (I).

Resumen de la Memoria:

Los organoboranos son intermedios orgánicos útiles que pueden ser convertidos en una gran variedad de moléculas orgánicas funcionales como alcoholes, aminas, aldehídos y haluros. La posibilidad de formar enlaces C-C a partir de la reacción de acoplamiento entre ésteres alquil o arilborónicos y haluros ha expandido el uso de estos compuestos organoboranos en síntesis. Los métodos tradicionales se basaban en la alquilación de trialkylboratos con agentes organomagnesianos. Pero en los últimos veinte años el uso de metales de transición para catálisis ha abierto nuevas posibilidades. Es el caso de la reacción de adición de hidroboranos a hidrocarburos no saturados, la hidroboración, que ha llegado a ser una de las técnicas más útiles en síntesis orgánica y de la que se conocen muchos ejemplos. Por otro lado, la activación y funcionalización de enlaces C-H catalizada por metales de transición ha atraído considerablemente la atención ya que permiten convertir sustancias simples, abundantes y de bajo coste como los hidrocarburos en otras más complejas y con un alto valor añadido. Si extendemos esta metodología a la borilación de enlaces C-H, ésta podría ser una mejor vía para la síntesis de organoboranos. Sin embargo poco sistemas activan y funcionalizan los hidrocarburos. La borilación C-H de alcanos fue demostrada por primera vez por Hartwig y colaboradores usando la activación fotoquímica de $Cp^*Re(CO)_3$. A partir de entonces se han reportado una serie de complejos de metales de transición que catalizan la borilación térmica de enlaces C-H aromáticos y benzílicos, pero la borilación catalítica de alcanos ha sido conducida sólo con Rh y Ru. Con metales del grupo 11 (Cu, Ag, Au) no se conocen ejemplos de compuestos que catalicen esta reacción. Sólo son conocidos compuestos que catalizan la hidroboración de dobles enlaces como por ejemplo Sadigui y colaboradores que reportaron el primer complejo borilo de Cu(I) con ligandos carbeno N-heterocíclicos que catalizan la diboración de aldehídos, ó Fernández y colaboradores que han empleado compuestos de plata con ligandos carbeno N-heterocíclicos como catalizadores para la reacción de diboración de dobles enlaces. Por tanto un trabajo interesante sería emplear compuestos de Cu(I) (metal menos caro que los empleados normalmente para esta reacción) con ligandos de tipo carbeno N-heterocíclicos o probar con otro tipo de ligandos como los TpX (trispirazolilboratos) (ya que de los sistemas que activan enlaces C-H muchos contienen un ligando aromático como el ciclopentadienilo (Cp)) en reacciones de borilación de enlaces C-H. Además, una ventaja es que se dispone de un gran número de ligandos TpX con distintos grupos unidos a los anillos de pirazol que posibilita el estudio de la influencia de tales sustancias en la actividad catalítica del metal al que esta unido y un ajuste de los mismos podrían optimizar la actividad y selectividad. Se podría ampliar también a los otros metales del grupo (Ag y Au) y podrían ser catalizadores prometedores en esta área de gran interés.

Resumen del Curriculum Vitae:

ANA REYES CABALLERO BEVIA. Fecha de nacimiento: 7/7/1976. SITUACIÓN PROFESIONAL ACTUAL: disfruto de una beca postdoctoral del MEC en Toulouse (Francia) en el Laboratoire de Chimie de Coordination (LCC) del CNRS (Centre National de la Recherche Scientifique) en el grupo de la Dra. Sylviane Sabo-Etienne desde Junio 2005 hasta la actualidad. LINEA DE INVESTIGACIÓN ACTUAL: Diseño de nuevos complejos de rutenio con modos de coordinación poco frecuentes y sus aplicaciones en reacciones catalíticas. FORMACIÓN ACADÉMICA: Licenciada en Ciencias Químicas por la Universidad de Sevilla en Junio 1999. Doctora en Química por la Universidad de Huelva en Noviembre del 2004. Tesis titulada: "Complejos de Cu(I) con ligandos de tipo homoescorpionato (Tpx) como catalizadores en reacciones de transferencia de carbenos a diferentes sustratos orgánicos. Efecto de los ligandos Tpx en la quimio-, regio- y diastereoselectividad de las reacciones". Realizada en el grupo de investigación del Dr. Pedro J. Pérez Romero. Premio extraordinario de doctorado y premio AIQB (Asociación de Industrias Químicas Básicas de Huelva) a la mejor tesis doctoral en el área Científico-Tecnológica. Durante este periodo disfruté de una beca de investigación del convenio Universidad de Huelva/ AIQB y de una beca predoctoral del MEC (FPU) y realicé actividades docentes en las titulaciones de Geología, Ciencias Ambientales, Ingeniería Técnica Agrícola, Ingeniería Técnica Forestal e Ingeniería Técnica Industrial de la Universidad de Huelva. PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN: "Polimerización de etileno y otras olefinas catalizada mediante complejos metálicos de la segunda mitad de las series de transición", (1FD1997-0919-C02-02 (QUI)). "Desarrollo de catalizadores de cobre para la obtención de productos de alto valor añadido mediante reacciones de enlaces carbono-hidrogeno y otros X-H (X = N, S, P) con diazocompuestos", BQU2002601114. "Synergie entre la première et la seconde sphère de coordination du métal pour une catalyse ultra sélective", ANR-06-BLAN-0060-01. PUBLICACIONES: J. Am. Chem. Soc (2), Organometallics (3), J. Org. Chem. (1), Org. Lett. (1), Eur. J. Inorg. Chem. (en prensa), Inorg. Chem. (en prensa). Enviados : dos artículos. Comunicaciones a congresos : 11.

**PROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2007**

Nombre: FERNÁNDEZ LÓPEZ, ISRAEL

Referencia: RYC-2007-00037

Area: Química

Número de orden: 16 **Correo electrónico:** israel@quim.ucm.es

Título:

ESTUDIO DE LOS MECANISMOS DE LAS REACCIONES ORGANOMETÁLICAS Y BIO-ORGÁNICAS

Resumen de la Memoria:

La ambiciosa línea de investigación propuesta es multidisciplinar y engloba distintas áreas del conocimiento desde la química sintética (orgánica y organometálica), la química teórica y computacional a la química biológica. Dicha línea de investigación pretende estudiar, tanto experimental como computacionalmente, los mecanismos de reacciones organometálicas y bio-orgánicas. En concreto, se estudiarán los orígenes de la estereoselectividad en la reacción aldólica de enolatos y enaminas (proceso considerado como uno de los más importantes para la formación de enlaces C-C en química orgánica) catalizada por enzimas (aldolasas de tipo I y tipo II). Asimismo, serán estudiados los procesos de transmetalación catalítica desde complejos metal-carbeno de tipo Fischer a metales de transición de los grupos 9 y 10. El aislamiento, caracterización, estudio de la situación de enlace y reactividad de las distintas especies implicadas en dichos procesos se llevará a cabo mediante una combinación de metodologías experimentales y teóricas. Finalmente, y en relación con el objetivo anterior, se pretende realizar un estudio comparativo de procesos orgánicos y organometálicos (v.g. reacciones de cicloadición y otras reacciones pericíclicas) en base al principio de la analogía isolobal.

Resumen del Curriculum Vitae:

Israel Fernández (Madrid, 1977) se licenció en Química por la Universidad Complutense de Madrid (Junio, 2000) siendo galardonado con el Premio Extraordinario de Licenciatura. En Abril de 2001 obtuvo una beca FPU-MEC para la realización de una tesis doctoral en el Dpto. de Química Orgánica de la UCM bajo la dirección del Prof. Miguel A. Sierra. En Marzo de 2005, IF defendió dicha tesis, enmarcada en el campo de la aplicación de compuestos organometálicos en síntesis orgánica y estudio de los mecanismos de las reacciones organometálicas, obteniendo la máxima calificación *¿Sobresaliente cum Laude¿* y posterior Premio Extraordinario de Doctorado. La excelencia del trabajo realizado se ha visto reflejado en la obtención del Premio de la Real Sociedad de Química Española-Sección Territorial de Madrid, a la *¿Mejor Tesis Doctoral en Química Sintética¿* (Marzo de 2006) y del prestigioso Premio Lilly de Investigación (Noviembre de 2004) concedido a los tres mejores doctorandos de toda España. IF fue contratado como estudiante post-doctoral (Abril, 2005) por la Philipps-Universität Marburg (Alemania) bajo la supervisión del Prof. Gernot Frenking y posteriormente obtuvo una beca post-doctoral del MEC. En la estancia post-doctoral el solicitante ha aplicado con éxito distintos métodos computacionales en el estudio de la conjugación, hiperconjugación y aromaticidad en compuestos orgánicos así como en el estudio de la situación de enlace de distintos complejos organometálicos. La producción científica de Israel Fernández ha quedado recogida, hasta el momento, en 26 publicaciones en revistas internacionales (de mayor a menor índice de impacto: 3 *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2 *J. Am. Chem. Soc.*, 5 *Chem. Eur. J.*, 1 *Chem. Comm.*, 2 *Org. Lett.*, 1 *Inorg. Chem.*, 1 *Faraday Discuss.*, 4 *J. Org. Chem.*, 5 *Organometallics*, 1 *Eur. J. Org. Chem.* y 1 *Tetrahedron Lett.*). Concretamente, el candidato ha sido el primer autor en 15 de las anteriores publicaciones y autor principal de 4 de ellas (1 *Chem. Eur. J.*, 2 *J. Org. Chem.* y 1 *Chem. Comm.*, habiendo sido esta última catalogada como *¿Hot Paper¿* y *¿Highlighted¿* en *Chem. Sci.* 2007, 2, C11). En el momento de tramitar esta solicitud, 3 nuevos artículos (1 *J. Am. Chem. Soc.*, 1 *ChemPhysChem* y 1 *Organometallics*-en este último Israel Fernández es el autor principal-) están siendo considerados para su publicación. Los resultados obtenidos durante los periodos pre- y postdoctorales también se han presentado como contribuciones a 9 congresos, tanto de carácter internacional (4) como de carácter nacional (5). Si bien la mayor parte de las participaciones a estos congresos ha sido mediante la presentación de un póster, cabe destacar la presentación de una comunicación oral (XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química) y una conferencia (III Symposium de Investigadores Jóvenes).

PROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2007

Nombre: Poater Teixidor, Jordi

Referencia: RYC-2007-00100

Area: Química

Número de orden: 17 **Correo electrónico:** jordi.poater@udg.es

Título:

Biología cuántica: Replicación del ADN y reconocimiento biomolecular

Resumen de la Memoria:

La replicación del ADN está en el corazón de la vida e invita a la imaginación. También es un ejemplo de libro de síntesis dirigida de un modelo, involucrando el reconocimiento molecular con enzima de las bases entrantes mediante la tira modelo. Todavía, a pesar de mucho trabajo hecho, cuestiones fundamentales sobre su mecanismo continúan abiertas. En esta línea de investigación, usando una aproximación químicocuántica, pretendemos dos objetivos: (1) entender la naturaleza electrónica del reconocimiento molecular en los pares de base de ADN, primero en modelos artificiales, y después en agregados macromoleculares de sistemas relacionados; (2) descifrar el preciso mecanismo de la replicación del ADN asistida por enzima, entendiendo el papel de los puentes de hidrógeno, los factores estéricos, y los efectos de solvente en este proceso con múltiples pasos. Los dos subproyectos están íntimamente conectados y se autocomplementan. Queremos explorar las posibilidades de diseñar racionalmente monómeros, cuya capacidad para autoorganizarse pueda encenderse o apagarse químicamente (mediante un tercer agente) o físicamente (por irradiación). Aplicaciones potenciales son la formación controlada y selectiva de macromoléculas, nanoestructuras y materiales. Además, esperamos obtener un mejor conocimiento y control del proceso de replicación. A largo plazo queremos contribuir al desarrollo de aproximaciones químicocuánticas para problemas biológicos relevantes, o sea, biología cuántica. Nuestros cálculos están mayoritariamente basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT), pero también en teoría ab initio de alto nivel, así como mecánica molecular. Diferentes estudios de validación, nuestros y de otros, han demostrado que el DFT es el método a escoger, tanto a nivel de eficiencia como de precisión, para grandes moléculas bioquímicas que contienen puentes de hidrógeno. Nuestra aproximación también implica la aplicación y desarrollo de técnicas híbridas QM/MM para tratar modelos de sistemas realistas del complejo modelo-primario-enzima involucrado en la replicación del ADN.

Resumen del Curriculum Vitae:

El candidato, Dr. Jordi Poater, inició el doctorado en enero del 2000 en el grupo de Modelage Molecular y Metodología Mecanocuántica del Instituto de Química Computacional de la Universidad de Girona. Se doctoró en abril de 2003 con la tesis: *¿Índices de localización y deslocalización derivados de la densidad bielectrónica: Análisis y aplicaciones en estructura molecular, reactividad química y aromaticidad?*, bajo la supervisión del Prof. Dr. Miquel Solà y el Prof. Dr. Miquel Duran. Posteriormente continuó en el mismo centro como profesor asociado del área de química física del departamento de química, centrándose en su principal línea de investigación: análisis de la aromaticidad mediante el índice de deslocalización, un nuevo criterio electrónico de aromaticidad. En octubre de 2004 el candidato entró como investigador postdoctoral en el departamento de química teórica de la Vrije Universiteit de Amsterdam (Holanda), bajo la supervisión del Dr. F. Matthias Bickelhaupt. Allí inició una nueva y diferenciada línea de investigación: replicación del ADN y reconocimiento biomolecular. La calidad del candidato fue premiada con una beca postdoctoral Marie Curie que disfruta desde enero de 2006. El candidato tiene 41 publicaciones, incluyendo 1 Chemical Reviews, 4 Chemistry A European Journal, 2 Journal of Physical Chemistry B, 2 ChemPhysChem, 6 Journal of Organic Chemistry, 1 Journal of Computational Chemistry, 1 Dalton Transactions, 1 Journal of Chemical Physics o 7 Journal of Physical Chemistry A. En la mayoría de los trabajos el candidato es primer autor, y en algunas de las más recientes aparece como autor principal. También cabe destacar las conferencias, comunicaciones y pósters presentados en distintos congresos internacionales, de relevancia la dos conferencias del ACS meeting de San Francisco en 2006.

**PROGRAMA RAMON Y CAJAL
CONVOCATORIA 2007**

Nombre: Quesada Pato, Roberto

Referencia: RYC-2007-00062

Area: Química

Número de orden: 18 **Correo electrónico:** roberto.quesada@uam.es

Título:

Desarrollo de moléculas sencillas para el transporte de aniones a través de membranas lipídicas

Resumen de la Memoria:

El control del transporte de iones a través de las membranas celulares es una función de vital importancia en todos los seres vivos. En el caso del cloruro, el anión más abundante en soluciones fisiológicas, este transporte se produce fundamentalmente mediante una familia de proteínas de membrana conocidas como proteínas CIC. La disfunción de éstas produce diversas enfermedades entre las que destaca por su incidencia la fibrosis quística, en este momento incurable y que es la enfermedad genética más extendida entre la población de raza blanca caucásica. En este sentido la síntesis de moléculas o sistemas artificiales capaces de suplir la función natural de estas proteínas sería una potencial solución terapéutica para este problema. Además el transporte de aniones variará el gradiente de concentración de éstos a ambos lados de la membrana, induciendo por tanto potencialmente efectos fisiológicos en las células. En esta línea de investigación se propone abordar la síntesis de moléculas sencillas capaces de transportar aniones cloruro a través de membranas lipídicas. Para ello se utilizarán plataformas aromáticas equipadas con grupos amida en posiciones adecuadas para conseguir una interacción cooperativa de los grupos N-H en la coordinación del anión. El control de la conformación relativa de estos grupos amida se conseguirá mediante la utilización de enlaces de hidrógeno intramoleculares, equipando a la plataforma aromática central con grupos hidroxilos. La relativa acidez de estos grupos permite además un ajuste de la conformación de los grupos amida y por tanto de su actividad como transportador en función del pH. Al ser el pH una de las características que diferencian los distintos tipos de células y orgánulos celulares, o que señalan el funcionamiento anormal de una de éstas, como ocurre en el caso de las células cancerosas, este aspecto permitiría el diseño de moléculas que tengan una determinada diana. La variación sistemática de los sustituyentes de los grupos amida permitirá un ajuste fino de la solubilidad, lipofilia y afinidad del receptor obteniéndose una librería de compuestos en la que identificaremos a aquellos más activos como transportadores en modelos micelares, siendo éstos los candidatos más prometedores para presentar actividad biológica.

Resumen del Curriculum Vitae:

Roberto Quesada obtuvo el título de licenciado en química por la Universidad de Oviedo en el año 1998. Ese mismo año realiza una estancia de cinco meses en la Universidad de Bristol (Reino Unido) bajo la supervisión del Dr. Philip J. King trabajando en la síntesis y reactividad de complejos trinucleares de rutenio con ligandos de tipo alenilideno. Tras esta primera estancia realiza sus estudios de doctorado entre los años 1999 y 2002 bajo la dirección de los doctores Javier Ruiz y Víctor Riera en la Universidad de Oviedo, defendiendo su tesis doctoral titulada "Reactividad de ligandos difosfinometanuro coordinados. Activación selectiva de enlaces carbono-hidrógeno y fósforo-carbono" en Octubre de 2002. En Octubre de 2003 se incorpora al grupo dirigido por la Prof. Sylvia M. Draper en el Trinity College Dublin (Irlanda) como investigador contratado. En este laboratorio realizó una estancia de un año participando en el proyecto "Smart Molecules for "Super" Materials" trabajando en síntesis orgánica dirigida hacia aplicaciones en materiales moleculares. En Noviembre de 2004 se incorpora al grupo dirigido por el Dr. Philip A. Gale en la Universidad de Southampton como becario postdoctoral, donde permaneció 14 meses participando en el proyecto "New Approaches to Selective Anion Recognition and Anionic Assembly", trabajando en dos líneas de investigación diferentes relacionadas con la química supramolecular de los aniones. Por un lado el desarrollo de moléculas orgánicas neutras que pueden actuar como sensores de aniones, y por otra parte desarrollo de nuevos materiales cristalinos mediante ingeniería de cristales. En Enero de 2006 se incorpora a la Universidad Autónoma de Madrid con un contrato "Juan de la Cierva" en el grupo dirigido por la Dra. Pilar Prados. Durante este tiempo, además de trabajar en la síntesis de calix[6]arenes funcionalizados como modelos de actividad enzimática ha puesto en marcha una nueva línea de investigación encaminada al desarrollo de moléculas de bajo peso molecular capaces de transportar aniones a través de membranas lipídicas. Los resultados obtenidos han dado lugar a un buen número de publicaciones (5 como "corresponding autor") en revistas con un alto índice de impacto tanto generales (J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem. Int. Ed. Engl., Chem. Commun.) como más especializadas (Coord. Chem. Rev., Organometallics, Dalton Trans.) y un capítulo de libro.

PROGRAMA RAMON Y CAJAL CONVOCATORIA 2007

Nombre: **Vicario Hernando, Javier**

Referencia: RYC-2007-00196

Area: Química

Número de orden: 19 Correo electrónico: javier.vicario@ehu.es

Titulo:

Reacciones catalíticas y asimétricas sobre alfa-iminoésteres e alfa-iminofosfonatos beta,gamma-insaturados. Síntesis enantioselectiva de derivados de alfa-aminoácidos y ácidos alfa-aminofosfónicos.

Resumen de la Memoria:

El reciente desarrollo de la metodología para la fácil preparación de 1-azadienos derivados de alfa- aminoácidos o alfa-aminofosfonatos mediante reacción aza-Wittig entre P-trimetilfosfacenos y alfa-cetoésteres o alfa-cetofosfonatos beta-gamma-insaturados ha abierto las puertas para el estudio de su reactividad frente a una gran variedad de reactivos. Los objetivos desarrollados en esta memoria, comprenden el estudio de reacciones catalíticas sobre éstos compuestos imínicos alfa,beta-insaturados en el transcurso de las cuales hay involucrada formación de uno o varios centros estereogénicos. Adiciones 1,2 catalíticas y enantioselectivas de reactivos nucleófilos sobre éstas iminas alfa,beta-insaturadas darían lugar a derivados de alfa-aminoácidos o ácidos alfa-aminofosfónicos vinílicos cuaternarios, mientras que la adición conjugada catalítica asimétrica sobre los mismos compuestos daría lugar de manera enantioselectiva a derivados de alfa-dehidroaminoácidos o sus análogos fosforados, ambos gamma-funcionalizados. La doble adición secuencial de reactivos nucleófilos rendiría los derivados de alfa-aminoácidos o ácidos alfa-aminofosfónicos saturados en los que hay presentes dos centros estereogénicos. Además del innegable interés biológico de estas moléculas objetivo, subsecuentes reacciones intermoleculares sobre éstas o los intermedios aniónicos de estas reacciones permitirán el acceso, de manera diastereoselectiva, a interesantes derivados polifuncionales con varios centros estereogénicos, mientras que de llevarse a cabo reacciones intramoleculares tendría lugar la formación de diversos heterociclos enantioméricamente enriquecidos. Por otro lado, dado que no existen precedentes de reacciones catalíticas de Diels-Alder con demanda electrónica inversa de 1-azadienos, otra de las pretensiones planteadas en esta memoria es, en primer lugar, la búsqueda de sistemas catalíticos para esta transformación y, seguidamente, su adaptación con el objeto de desarrollar una metodología asimétrica catalítica de esta reacción, para la obtención enantioselectiva de tetrahidropiridinas derivadas de α aminoácidos y ácidos alfa-aminofosfónicos. La doble relevancia de este último objetivo debe ser reseñada. Solamente el descubrimiento de catalizadores para la reacción de Diels-Alder con demanda electrónica inversa de 1-azadienos, sería un gran éxito y de venir acompañado por una síntesis enantioselectiva supondría indudablemente un gran paso adelante dentro de este campo.

Resumen del Curriculum Vitae:

El candidato Javier Vicario Hernando obtuvo su Licenciatura en Química Orgánica por la Facultad de Ciencias de la UPV/EHU en Junio de 1998. Ese mismo año se integra en el grupo del Prof. Francisco Palacios en el Departamento de Química Orgánica de la Fac. de Farmacia de la UPV/EHU en Vitoria Gasteiz, donde, durante su primer año, lleva a cabo su Tesina de Licenciatura versada en la síntesis y funcionalización de hidrazonas fosforadas y sus aplicaciones como intermedios en la preparación de heterociclos fosforados, (Tetrahedron 2001, 57, 1961-1972). Tras esto, le es adjudicada una beca predoctoral financiada por la UPV/EHU, con la que lleva a cabo su Tesis Doctoral durante los años 1999 a 2003 en el campo de la síntesis de derivados minofosforados y sus aplicaciones como intermedios en síntesis de moléculas aminofosforadas, (Eur. J. Org. Chem. 2001, 3357-3365; Eur. J. Org. Chem. 2002, 4131-4136, Heterocycles 2003, 59, 257-264) Durante estos 5 años como miembro del grupo de investigación del Prof. Palacios participa como investigador colaborador en diversos proyectos de investigación financiados por Gobierno Vasco, UPV/EHU o el MCYT. En Enero de 2004 se incorpora al grupo de Química Orgánica Sintética de la Universidad de Groningen (Holanda) dirigido por el Prof. Ben L. Feringa, gracias a la beca postdoctoral de Formación de Personal Investigador que le concede el Gobierno Vasco. Dentro del subgrupo de Nanotecnología comienza trabajando en síntesis de motores moleculares catalíticos (Chem. Commun. 2005, 3936-3938, protagonizando la portada de este número y figurando entre los "Hot articles" de la Royal Society Of Chemistry). Simultáneamente, comienza a trabajar en la síntesis de alquenos sobresustituídos (Org. J. Am. Chem. Soc. 2006, 128, 5127-5135), así como su conexión a nanopartículas (Nature 2005, 437, 1337-1340) y su utilidad como dopantes quirales en cristales líquidos (Nature 2006, 440; 163, J. Am. Chem. Soc. 2006, 128, 14397-14407). En Septiembre de 2005, el candidato firma un contrato como investigador con la Universidad de Groningen para permanecer en el grupo del Prof. Feringa, donde comienza a trabajar en la síntesis de tetraalquilporfirinas y el estudio mediante Microscopía de Efecto Tunnel (STM) y Espectroscopía Fotoelectrónica de Rayos X (XPS) de la autoorganización de monocapas de éstas sobre oro (J. Am. Chem. Soc. 2006, 128, 15537-15541). Durante este periodo comprendido entre Enero de 2004 y Diciembre de 2005 el candidato participa en el proyecto "Catalytic Molecular Motors" financiado por el programa Economy-Ecology-Technology del Gobierno Holandés. En la actualidad y desde enero de 2006, el candidato se encuentra reincorporado en el grupo del profesor Palacios en el Departamento de Química Orgánica en la Fac. de Farmacia de la UPV/EHU, donde compatibiliza tareas docentes e investigadoras gracias a los contratos, docente con la UPV/EHU y de investigación otorgado por el Gobierno Vasco, y donde ha retomado su trabajo en el campo de los compuestos organofosforados (Eur. J. Org. Chem. 2006, 2843-2850; Heterocycles 2006, 70, 261-170) y especialmente en reacciones aza-Wittig para la síntesis de 1-azadienos derivados de aminoácidos o aminofosfonatos (J. Org. Chem. 2006, 71, 7690-7696; J. Org. Chem. 2007, 72, ASAP) y adiciones asimétricas catalíticas sobre éstos (Org. Lett. 2006, 8, 5405-5408).