

Instituto Universitario de Investigación Mixto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea



Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea

**MEMORIA
ACTIVIDADES
2012**

ÍNDICE

Introducción	1
Resultados destacados del ISQCH	5
Apartado 1. Estructura organizativa y recursos humanos.....	9
1.1 Equipo directivo y áreas de organización	
1.2 Recursos Humanos	
Apartado 2. Líneas de investigación y grupos de investigación.....	16
Apartado 3. Estructura de financiación.....	54
Apartado 4. Actividad Científica, Innovadora y Tecnológica	57
4.1 Proyectos	
Proyectos de carácter europeo	
Proyectos de convocatorias nacionales	
Proyectos de convocatoria autonómicas	
Proyectos con empresas	
4.2 Publicaciones	
Libros	
Capítulos de libros	
Artículos	
4.3 Comunicaciones a congresos	
Plenarias	
Comunicaciones orales	
Comunicaciones posters	
Conferencias invitadas	
4.4 Conferencias impartidas en el ISQCH	
4.5 Pertenencia a comités	
4.6 Patentes	
Apartado 5. Formación.....	109
Docencia en Másteres	
Docencias en Primer y Segundo Ciclo	
Tesis doctorales y Proyectos Fin de Máster	
Becas de iniciación a la investigación	
Cursos de formación impartidos	
Apartado 6. Proyección Internacional	118
Investigación en colaboración con centros extranjeros	
Estancias de investigación en centros extranjeros	
Estancias de investigadores extranjeros en el Instituto	
Apartado 7. Interacción con la sociedad.....	122



Introducción

El Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea surge a partir de un convenio específico suscrito entre la Agencia estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) y la Universidad de Zaragoza (UZ) el día 5 de Abril de 2011. Este convenio recoge el marco genérico de creación de este *Instituto Mixto de Investigación*, haciendo indicaciones acerca del personal que lo forma, los espacios que ocupa, así como los mecanismos de gestión económica y de los gastos de funcionamiento.

La creación del ISQCH se enmarcó en un proceso racionalizado y negociado entre UNIZAR y CSIC para la reestructuración del extraordinario potencial científico y tecnológico que, en el área de la investigación en Química, representaba la presencia en un mismo entorno físico, del Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA) y del Instituto Universitario de Catálisis Homogénea (IUCH). El ICMA, instituto de naturaleza mixto creado en 1985, por una parte, contribuía con una dilatada experiencia en el campo de la Síntesis Química y, por su parte, el IUCH aportaba el marcado dinamismo de un instituto joven e internacionalmente reconocido en el área de la Catálisis Homogénea. La madurez del viejo ICMA, unido al excesivo tamaño conjuntamente alcanzado, aconsejaron una reorganización de ambos institutos para la optimización del potencial científico existente en el área de la Química.

Este convenio de creación presenta dos aspectos que merecen una mención especial. Por una parte, el deseo manifiesto de ambas instituciones que lo suscriben de crear un grupo de trabajo para el desarrollo de una propuesta de reconocimiento del ISQCH como *Instituto Universitario de Investigación Mixto*, de acuerdo a la normativa recogida en la Ley Orgánica de Universidades y en el Reglamento Marco de Institutos Universitarios de Investigación de la Universidad de Zaragoza. Por otra parte, una vez logrado este reconocimiento, el propio convenio de creación del ISQCH entiende y suscribe la formal integración del Instituto Universitario de Catálisis Homogénea (IUCH), a todos los efectos, en el ISQCH y su desaparición como centro independiente.

Conocida esta sucinta historia del proceso de creación del ISQCH, queda patente la juventud de nuestro Instituto, a la vez que la dilatada experiencia de muchos de los investigadores que lideran la investigación en nuestro centro. Esta juventud nos debe aportar el dinamismo y la ilusión para afrontar nuevos retos científicos, mientras que la experiencia de sus investigadores nos asegura un conocimiento y una madurez fundamental para garantizar el éxito en las nuevas iniciativas científico-tecnológicas.

Objetivos del ISQCH

Desde su creación, y ya en el convenio específico establecido entre el CSIC y la UZ, el ISQCH ha marcado una serie de objetivos ambiciosos, acordes con los nuevos retos de la investigación química, y que deben estabilizar su presencia como un centro de referencia internacional en el ámbito de la síntesis química y la catálisis homogénea. Entre los objetivos, explícitamente recogidos desde la creación del ISQCH, merece resaltar los siguientes:

- El ISQCH promoverá la excelencia científica, reforzando y consolidando el marco de investigación existente.
- El ISQCH contribuirá al progreso de la investigación científica y al desarrollo tecnológico en Ciencias y Tecnologías Químicas en una dimensión internacional.
- El ISQCH coordinará la investigación con sus vertientes prácticas de aplicación en los campos antes citados, estimulando la innovación en aquellos resultados que lo posibiliten.
- El ISQCH promoverá la conexión de la investigación con la sociedad, para tratar de demostrar los beneficios de adoptar una gestión basada en el conocimiento científico.

- El ISQCH estimulará y participará activamente en la formación de personal investigador y apoyará la intensificación de la docencia en el contexto universitario de la UZ.
- El ISQCH aprovechará su reconocimiento internacional para potenciar las relaciones con otros centros nacionales e internacionales dirigido a lograr una integración mayor en el Espacio Europeo de Investigación.
- El ISQCH estimulará la cooperación con el sector industrial y los agentes económicos y sociales, desarrollando servicios y mecanismos de transferencia de tecnología precisos y efectivos.

Todos estos objetivos hacen concluir que la principal seña de identidad del ISQCH debe ser el desarrollo de una investigación de calidad con un planteamiento global y una aproximación multidisciplinar, contribuyendo tanto al avance del conocimiento, como a la resolución de problemas concretos planteados desde distintos ámbitos de la sociedad.

Proceso técnico de creación del ISQCH

Conocido el marco de creación de nuestro Instituto, creemos que es de cierta relevancia para entender y valorar adecuadamente la presente memoria, el conocer algunos detalles de la estrategia seguida para, de un modo sosegado y paulatino, proceder al complicado proceso, no muy común, de desdoblamiento de un instituto de investigación mixto, a su reconocimiento como Instituto Universitario de Investigación y a la integración de otro centro de investigación (IUCH) previamente existente, que mantiene un proceso dinámico y eficiente de producción científica.

Cuando la dirección en funciones asume sus tareas en mayo de 2011, recoge la responsabilidad de cumplir los tres objetivos que el convenio de creación explícitamente enumera: crear el marco normativo de gestión del nuevo Instituto, gestionar el proceso administrativo de integración del ISQCH en sus dos instituciones (CSIC y UZ) y promover el reconocimiento del ISQCH como Instituto Universitario de Investigación Mixto.

El marco normativo de gestión del ISQCH se materializó, con la redacción y aprobación por CSIC y por la UZ, el 5 de Enero de 2012, del Reglamento de régimen interno del ISQCH. Este reglamento recoge una reestructuración temática del instituto, estableciendo un marco sobre la base de cuatro departamentos y 13 grupos de investigación, estructura asimismo acorde, por otra parte, al sistema de gestión de la investigación establecido por el Gobierno de Aragón. Hay que destacar que este reglamento de régimen interno para la gestión científica y administrativa del ISQCH, representa un compromiso entre la normativa genérica del CSIC para sus institutos de investigación y la regulación que la Universidad de Zaragoza aplica a sus Institutos Universitarios, lo que ha facilitado enormemente el proceso posteriormente realizado de reconocimiento del ISQCH como Instituto Universitario.

Desde un punto de vista organizativo se consideró adecuado no realizar el desdoblamiento administrativo formal del viejo ICMA a los dos nuevos institutos, ICMA (nuevo) e ISQCH, hasta final de 2011, de acuerdo con los responsables del CSIC y de la UZ. Este proceso administrativo supuso la migración del personal en las respectivas relaciones de puestos de trabajo (RPT), conjuntamente con la migración de personal contratado, de los proyectos de investigación y de todas las cuentas financieras respectivas. Esta situación mantuvo la existencia del viejo ICMA hasta el 31 de Diciembre de 2011, por lo que la extracción de información precisa, tanto de personal, como de aspectos económicos, para el ISQCH por separado, resulta harto difícil para este período.

En el plano de la producción científica, el proceso fue progresivo, iniciándose una vez que la nueva dirección del ISQCH tomó posesión en Mayo de 2011. En este momento se planteó la necesidad de cambiar la adscripción de los miembros del ISQCH, desde el viejo ICMA o del IUCH, en todos los trabajos científicos publicados a partir de esa fecha. Aunque puede resultar relativamente sencillo la asignación de la producción científica a uno u otro instituto en este periodo, en los análisis de la producción científica del ISQCH realizados para 2011 se mantuvo la unidad con el ICMA, con el visto bueno de nuestras dos instituciones, CSIC e UZ.

Fue el 1 de Enero de 2012 cuando, a todos los niveles, se plantea la separación de hecho del ISQCH del viejo ICMA, y la integración, a todos los efectos (infraestructura y personal), del IUCH en el ISQCH.

Únicamente se mantiene común, con el nuevo Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA), la infraestructura de Servicios y de Administración que constituye lo que se conoce como Centro de Química y Materiales de Aragón (CEQMA) y que aglutina al personal, tanto técnico como de administración, que soportan los servicios científico técnicos comunes a ambos institutos y toda la administración de ambos institutos, gestionada fundamentalmente por personal adscrito al CSIC.

Todo este proceso de reestructuración concluyó con el reconocimiento del ISQCH como *Instituto Universitario de Investigación Mixto*, circunstancia que tuvo lugar el pasado 12 de febrero de 2013 mediante la publicación en el BOA de la orden de 30 de enero de 2013 firmada por la Consejera de Educación, Universidad, Cultura y Deporte del Gobierno de Aragón.



Resultados científicos destacados del ISQCH 2012

Si bien el grueso de la productividad científica se recoge con detalle en los siguientes apartados, nos parece oportuno subrayar algunas de las contribuciones más destacadas de nuestro instituto, añadiendo algún comentario, no excesivamente técnico, acerca de la relevancia de los resultados.

Una primera aportación que merece ser destacada es la realizada por los doctores Fernández-Alvarez y Lalrempuia. Se trata del desarrollo de un proceso catalítico muy selectivo, que se realiza en condiciones muy suaves, y que no requiere disolventes, ni origina residuos (Figura 1). El nuevo catalizador basado en un complejo de iridio estable al aire permite transformar el dióxido de carbono (CO_2) en sililformiatos, y posibilitar, de esta manera, una esperanzadora entrada a procesos preparativos o catalíticos para la incorporación de carbono atmosférico en la industria química convencional. (R. Lalrempuia, M. Iglesias, V. Polo, P.J. Sanz Miguel, F.J. Fernández-Alvarez, J. J. Pérez-Torrente, L.A. Oro. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2012, 51, 12824-12827)



Figura 1.- Esquema sintético del proceso catalítico descrito con indicación de la transformación de CO_2 en un producto orgánico con potenciales aplicaciones posteriores

Por otra parte, el grupo liderado por los profesores Carmona y Lahoz ha descrito una familia de trómeros quirales de osmio conteniendo ligandos amino carboxilato, cuya configuración absoluta interna se establece con reconocimiento molecular, y han demostrado su comportamiento como excelentes catalizadores enantioselectivos en reacciones de transferencia de hidrógeno de 2-propanol a cetonas. El trabajo realizado ha permitido determinar que la transferencia tiene lugar a través de un mecanismo bifuncional de esfera externa (mecanismo de Noyori) (Figura 2) y mediante el establecimiento de interacciones CH/π entre el catalizador y la cetona, lográndose entender, a partir de esta propuesta, el signo de la enantioselección observada. (D. Carmona, F. J. Lahoz, P. García-Orduña, L. A. Oro, M. P. Lamata, F. Figuri. *Organometallics*, 2012, 31, 3333-3345)

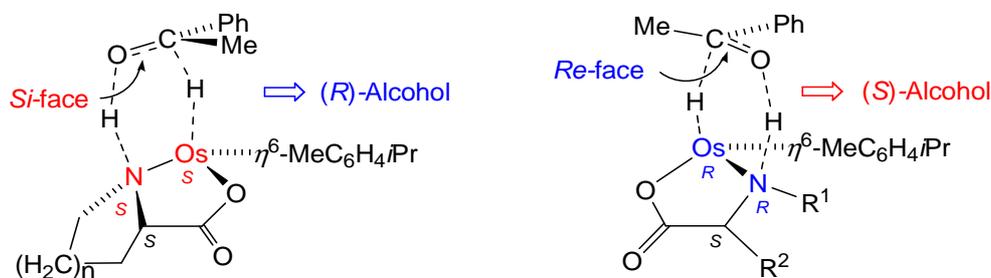
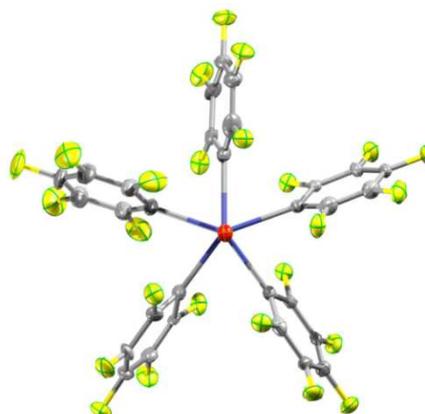


Figura 2.- Diagrama que muestra la formación del intermedio de reacción y que permite racionalizar la enantioselectividad observada en el proceso catalítico

Es bien conocido que la inmensa mayoría de compuestos de coordinación hexacoordinados presentan estructura octaédrica. Sin embargo, en un reciente trabajo del grupo liderado por el Dr. Menjón, se ha descrito la preparación y caracterización de un particular oxo-derivado de niobio(V) $[\text{NBu}_4]_2[\text{NbO}(\text{C}_6\text{F}_5)_5]$. Este compuesto hexacoordinado presenta una estructura de pirámide pentagonal, muy poco frecuente en Química. De hecho, se trata del primer compuesto organometálico que contiene un metal de transición con dicha geometría. (M. A. García-Monforte, M. Baya, L. Falvello, A. Martín, B. Menjón. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2012, 51, 8046-8049) (En la figura de la derecha, se representa la estructura molecular de dicho complejo de Niobio; en el dibujo se sigue el siguiente código de colores: C gris, O rojo, F amarillo y Nb azul).



Otro resultado de clara proyección lo constituyen los resultados desarrollados por el grupo de los doctores Tejel y Ciriano. Este equipo ha mostrado cómo una cadena de átomos metálicos 'semi-desnudos' (seminaked) es capaz de realizar la oxidación aeróbica de CO a CO_2 . Mientras que una molécula de dióxido de carbono queda enlazada a la cadena metálica, como un grupo formiato doblemente desprotonado (Figura 3), se produce la liberación de una segunda molécula de CO_2 . Muy probablemente, uno de los metales sea responsable de activar la molécula de oxígeno para reaccionar con un grupo carbonilo que se encuentra unido al metal adyacente. Ambos metales actúan de modo cooperativo, rompiendo y transfiriendo ambos átomos de la molécula de O_2 a dos ligandos carbonilo en dos etapas consecutivas. Estos resultados, obtenidos a partir de un sistema molecular discreto, pueden proporcionar información adicional de extraordinaria relevancia acerca del mecanismo de adición de oxígeno al CO, proceso todavía no bien comprendido en las reacciones catalíticas que tienen lugar en la periferia de nanopartículas metálicas. (C. Tejel, S. Sancho, J.A. López, M.A. Ciriano, *Chem. Eur. J.* 2012, 18, 15250-15253)

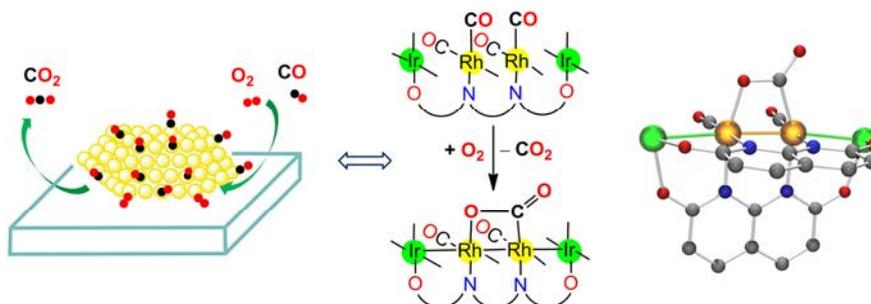


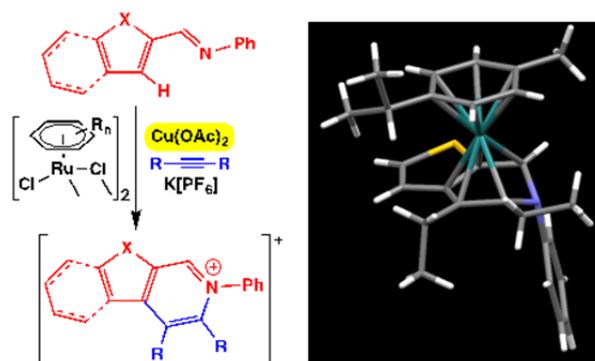
Figura 3.- Esquema de la reacción de oxidación de monóxido de carbono, estructura del producto y representación de su análoga en catálisis heterogénea

Es bien sabido que los compuestos hipervalentes de estequiometría AX_5 son especies altamente fluxionales, sometidas a un proceso de pseudo-rotación de Berry. La diferencia de energía entre las dos geometrías involucradas en dicho proceso (pirámide de base cuadrada y bipirámide trigonal) suele ser tan baja que hasta ahora no había sido posible determinar la naturaleza del estereoisómero más estable en disolución. La síntesis del derivado homoléptico de antimonio $\text{Sb}(\text{C}_6\text{F}_5)_5$ realizada en el ISQCH por el grupo de investigación del Dr. Menjón ha permitido, por primera vez, detectar la geometría del estereoisómero (politopo) más estable, tanto en estado sólido como en disolución. (M. A. García-Monforte, P. J. Alonso, I. Ara, B. Menjón, P. Romero. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2012, 51, 2754-2757)



Figura 4.- Diagrama de niveles de energía para un proceso de pseudorotación de Berry y representación molecular del politopo más estable caracterizado en el referido trabajo.

Otra aportación que también merece ser destacada es la llevada a cabo por los Dres. Cuesta y Urriolabeitia. En ella se describe un método de síntesis de heterociclos fusionados basado en el acoplamiento oxidativo entre heteriliminas y alquinos internos promovido por complejos de rutenio. Este tipo de heterociclos son difíciles de obtener por métodos orgánicos clásicos y este método, que aquí se describe, resulta ser una eficaz alternativa. La reacción se basa en la incorporación del rutenio al esqueleto orgánico por activación específica de un enlace C-H adyacente al grupo imina. Tras una inserción migratoria del alquino se produce el correspondiente acoplamiento C-N. Además de su utilidad práctica, otro aspecto destacable de esta aportación es que tras el acoplamiento C-N no se produce la habitual reducción del metal, sino que tiene lugar un proceso de desaromatización, dando lugar a estructuras organometálicas sin precedentes (L. Cuesta, T. Soler, E. P. Urriolabeitia, *Chem. Eur. J.* **2012**, *18*, 15178).



Para terminar con esta breve introducción a la actividad científica del ISQCH, nos gustaría mencionar la concesión del reconocido **Premio Lilly** a la doctora Raquel Pérez-Herrera, premio otorgado por esta empresa química al mejor investigador joven (menor de 40 años de España) en Química orgánica; la elección del Prof. Fernando J. Lahoz como Chair de la Commission on Structural Chemistry de la IUCr, máximo comité ejecutivo internacional en el campo de la Química Estructural en el marco de la *International Union of Crystallography*, y el nombramiento del Prof. Luis A. Oro, como miembro del Consejo Asesor de Ciencia, Tecnología e Innovación de la Secretaría de estado de I+D+i, siendo este Consejo el máximo órgano de participación de la comunidad científica y tecnológica y de los agentes sociales y económicos en el Sistema Español de I+D+i.



Apartado 1. Estructura organizativa y recursos humanos

1.1 Equipo directivo y áreas de organización

1.1 Equipo directivo

Director

Fernando J. Lahoz Díaz

Vicedirectora

María Concepción Gimeno Floría

Vicedirector

Jesús J. Pérez Torrente

1.2 Áreas de organización

El Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea se estructura sobre la base de cuatro Departamentos que presentan proximidades temáticas manifiestas y requerimientos de infraestructura científica semejante. Dentro de cada uno de estos Departamentos se localizan las verdaderas unidades de trabajo investigador que constituyen los Grupos de Investigación.

Es de destacar que la estructura organizativa del ISQCH, basada sobre los Grupos de Investigación, hace coincidir estos grupos de trabajo con los Grupos de Investigación tal y como los reconoce el Gobierno de Aragón.

Departamento 1: Compuestos Organometálicos y de Coordinación*Grupos de Investigación*

Diseño de Compuestos de Coordinación con Propiedades de Interés
Química Inorgánica y de los Compuestos Organometálicos
Química Organometálica Aplicada

Departamento 2: Catálisis y Procesos Catalíticos*Grupos de Investigación*

Catálisis Heterogénea en Síntesis Orgánicas Selectivas
Catálisis Homogénea Enantioselectiva
Catálisis Homogénea por Compuestos Organometálicos
Compuestos Enantiopuros y Procesos Sostenibles – CEPS

Departamento 3: Síntesis y Estructura de Biomoléculas*Grupos de Investigación*

Aminoácidos y Péptidos
Química Bioorgánica

Departamento 4: Activación de Enlaces por Complejos Metálicos*Grupos de Investigación*

Activación Molecular a través de Organometálicos
Arquitectura Molecular Inorgánica y Aplicaciones
Catalizadores y Mecanismos
Organometálicos y Catálisis

1.2 Recursos Humanos

El Instituto está formado por investigadores que pertenecen al Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) y a la Universidad de Zaragoza (UZ). En esta tabla se presenta un resumen del personal del ISQCH, a fecha 31 de diciembre de 2012:

	CSIC	UZ	Total
PDI Dr.	0	46	46
Investigadores Dr.	32	14	46
Investigadores Lcd.	20	44	64
Personal Técnico Lab.	0	1	1
Personal Administración	0	1	1
Personal ISQCH	52	106	158

	CSIC	UZ	Total
Doctores	32	61	93
No Doctores	20	45	65
Personal ISQCH	52	106	158

PDI Dr.		46
Catedrático Universidad	UZ	12
Catedrática E.U.	UZ	1
Titular Universidad	UZ	21
Prof. Ayudante Doctor	UZ	2
Prof. Contratado Doctor	UZ	2
Prof. Contratado Doctor Inv.	UZ	5
Contrato Ramón y Cajal	UZ	1
Contrato Juan de la Cierva	UZ	2
Investigadores Dr.		46
Prof. De Investigación	CSIC	7
Investigador Científico	CSIC	8
Científico Titular	CSIC	8
Contrato Juan de la Cierva	CSIC	1
Contrato Proyecto	CSIC	8
Contrato Proyecto	UZ	14
Investigadores Lcd.		64
CSIC (Contratados Proyecto + Becarios)		20
UZ (Contratados Proyecto + Becarios)		44

Las tareas administrativas y los servicios de apoyo a la investigación del Instituto son realizadas por el personal del Centro de Química y Materiales de Aragón (CEQMA).

	CSIC	UZ	Total
Administración	6	2	8
Técnicos no Dr.	11	0	11
Técnicos Dr.	4	0	4
Personal CEQMA	21	2	23

Personal ISQCH – 31 diciembre 2012

APELL. 1	APELL. 2	NOMBRE	Contrato	PDI/Investig.	Centro	Titul.
Abril	Galve	Paula	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Alcaine	Laborda	Ana	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Alós	Rando	Joaquín	BEC Predoc	Investigador	CSIC	Lcd
Andrés	Esquivias	Patricia	BEC FPI	Investigador	UZ	Lcd
Angoy	Melida	Marta	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Ara	Laplana	Irene V.	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Arias	Aguilar	Andersson	Contrato EPIF	Investigador	UZ	Lcd
Asenjo	Orzanco	Ainara	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Atrián	Blasco	Elena	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Azpíroz	Latre	Ramón	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Lcd
Bachl		Jürgen	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Badorrey	Miguel	Ramón Á.	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Bajo	Velázquez	Sonia	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Ballano	Ballano	Gema	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Dr
Ballesteros	Pallarés	Almudena	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Est
Batuecas	Batuecas	María	Contrato EPIF	Investigador	CSIC	Lcd
Baya	García	Miguel	Prof. Contr. Doctor	PDI	UZ	Dr
Belío	Becerril	Úrsula	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Blanco	Ortiz	M ^a d Carmen	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Dr
Bolaño	García	Tamara	Juan de la Cierva	PDI	UZ	Dr
Borja	Ustáriz	M ^a Pilar	Contrato EPIF	Investigador	UZ	Lcd
Borrajo	Lorente	M ^a Pilar	Contrato Proyecto	Administración	UZ	Lcd
Bravo	Peña	José Luis	Técnico Apoyo	Administración	UZ	Dipl.
Buil	Juan	M ^a Luisa	Prof. Contr. Doctor	PDI	UZ	Dr
Calaza	Cabanas	Isabel	Prof. Contr. Doctor	PDI	UZ	Dr
Calvo	López	Sara Elena	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Calvo	Calvo	Beatriz	BEC JAE Predoc	Investigador	UZ	Lcd
Carmona	Gascón	Daniel	Prof. de Investig.	Investigador	CSIC	Dr
Carretero	García	Angel	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Casado	Lacabra	Miguel Ángel	Prof. Contr. Doctor	PDI	UZ	Dr
Casas	del Pozo	José M ^a	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Castarlenas	Chela	Ricardo	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Dr
Cativiela	Marín	Carlos	Catedrático Univ.	PDI	UZ	Dr
Cebollada	Muñoz	Andrea	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Cerrada	Lamuela	Elena	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Ciriano	López	Miguel Ángel	Prof. de Investig.	Investigador	CSIC	Dr
Crespo	Zaragoza	Olga	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Díaz	Díaz	David	Científico Titular	Investigador	CSIC	Dr
Díaz de Villegas	Soláns	María Dolores	Investig. Científico	Investigador	CSIC	Dr
Eguillor	Armendáriz	Beatriz	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Dr
Elduque	Palomo	Ana Isabel	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Esteban	Pérez	Montserrat	Catedrática E.U.	PDI	UZ	Dr
Esteruelas	Rodrigo	Miguel Ángel	Prof. de Investig.	Investigador	CSIC	Dr
Fernández	Cardo	Juan José	BEC Predoc	Investigador	CSIC	Lcd

Fernández	Moreira	Vanessa	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Dr
Fernández	Tornos	Javier	Contrato EPIF	Investigador	UZ	Lcd
Fernández	Álvarez	Francisco J.	Prof. Contr. Doctor	PDI	UZ	Dr
Ferrer	Cerra	Joaquina	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Forniés	Gracia	Juan	Catedrático Univ.	PDI	UZ	Dr
Fortuño	Turmo	Consuelo	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Fraille	Dolado	José María	Investig. Científico	Investigador	CSIC	Dr
Fuertes	Lorda	Sara	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Dr
Gallardo	Gallardo	Piedraescrita	Contrato EPIF	Investigador	CSIC	Lcd
Gálvez	Lafuente	José Antonio	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Garcés	Leonard	Karin	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Dr
García	Laureiro	José Ignacio	Prof. de Investig.	Investigador	CSIC	Dr
García	Orduña	Mª Pilar	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Dr
García	Monforte	Mª Ángeles	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Dr
García	Marín	Héctor	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Dr
García	Batista	Nuria Ester	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
García	Clemente	Mª Pilar	Catedrático Univ.	PDI	UZ	Dr
García	Yebra	Mª Cristina	Prof. Contr. Doctor	PDI	UZ	Dr
Gasco	Pérez	Lorena	Contrato EPIF	Investigador	CSIC	Lcd
Gascón	Jiménez	Elena	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Lcd
Gay	García	Mª Pilar	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Geer	Ramos	Ana Mª	Contrato EPIF	Investigador	UZ	Lcd
Gil	Ferrás	Ana	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Dr
Gimeno	Floría	M Concepción	Prof. de Investig.	Investigador	CSIC	Dr
Giuseppe		Andrea Di	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Gómez	Bautista	Daniel	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Gómez	Alabau	Roberto	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Gomollón	Bel	Fernando	BEC JAE Predoc	Investigador	CSIC	Lcd
González	del Rosal	Aida	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Gutiérrez	Allueva	Alejandro	Contrato EPIF	Investigador	CSIC	Lcd
Heiran		Roghayeh	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Lcd
Herrerías	Larripa	Clara Isabel	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Iglesias	Alonso	Manuel	Juan de la Cierva	PDI	UZ	Dr
Izquierdo	Ferrer	Susana Mª	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Jiménez	Sanz	Ana Isabel	Científica Titular	Investigador	CSIC	Dr
Jiménez	Rupérez	Mª Victoria	Científica Titular	Investigador	CSIC	Dr
Jiménez	Osés	Gonzalo	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Dr
Jiménez	Villar	Josefina	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Julián	Arrese	Alejandro	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Laborda	Martínez	Pedro	Contrato EPIF	Investigador	UZ	Lcd
Laga	Lázaro	Eduardo	Contrato EPIF	Investigador	CSIC	Lcd
Laguna	Castrillo	Mariano	Prof. de Investig.	Investigador	CSIC	Dr
Laguna	Castrillo	Antonio	Catedrático Univ.	PDI	UZ	Dr
Lahoz	Díaz	Fernando J.	Prof. de Investig.	Investigador	CSIC	Dr
Lamata	Cristóbal	Mª Pilar	Catedrático Univ.	PDI	UZ	Dr
Larramona	Asensio	Carmen	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Lázaro	Villarroya	Guillermo	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Lezáun	Alcalá	Virginia	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd

López	de Lama	Ana Margarita	Catedrático Univ.	PDI	UZ	Dr
López	Calvo	José Antonio	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
López	Ram de Viu	Mª Pilar	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Luaces	Orobitg	Susana María	BEC FPI	Investigador	UZ	Lcd
Luquín	Martínez	Mª Asunción	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Dr
Macías	Maza	Ramón	Prof. Contr. Doctor	PDI	UZ	Dr
Marca	Metola	Eduardo	BEC FPU	Investigador	UZ	Lcd
Marqués	López	Mª Eugenia	Prof. Ayud. Doctor	PDI	UZ	Dr
Martín	Tello	Antonio J.	Investig. Científico	Investigador	CSIC	Dr
Martín	Casado	Marta	Científica Titular	Investigador	CSIC	Dr
Martínez	Esteban	Alejandro V.	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Martínez	Salvador	Sonia Pilar	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Mata	Martínez	Lara	Contrato EPIF	Investigador	CSIC	Lcd
Mateo	Pérez	Ana Concep.	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Dr
Mayoral	Murillo	José Antonio	Catedrático Univ.	PDI	UZ	Dr
Mena	Pardos	Inmaculada	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Méndez	Tejeda	Isabel	Contrato EPIF	Investigador	CSIC	Lcd
Menjón	Ruiz	Babil	Investig. Científico	Investigador	CSIC	Dr
Merchán	Alvarez	Francisco L.	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Merino	Filella	Pedro	Catedrático Univ.	PDI	UZ	Dr
Miñana	Segura	Ana C.	Contrato EPIF	Investigador	CSIC	Lcd
Modrego	Pérez	Francisco J.	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Mohammadi		Somayeh	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Lcd
Montanel	Pérez	Sara	Contrato EPIF	Investigador	UZ	Lcd
Mora	Cárdenas	Malka Irina	Contrato EPIF	Investigador	CSIC	Lcd
Navarro	Martín	Rafael	Catedrático Univ.	PDI	UZ	Dr
Oliván	Esco	Montserrat	Científica Titular	Investigador	CSIC	Dr
Oñate	Rodríguez	Enrique	Científico Titular	Investigador	CSIC	Dr
Oro	Giral	Luis Antonio	Catedrático Univ.	PDI	UZ	Dr
Ortego	Cañaveras	Mª Lourdes	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Dr
Osante	García	Iñaki	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Dr
Palacios	Gutiérrez	Laura	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Palacios	Laganga	Adrián Úrbez	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Pardo	Abadía	Pilar	Contrato EPIF	Investigador	CSIC	Lcd
Pérez	Herrera	Raquel	Científica Titular	Investigador	CSIC	Dr
Pérez	Torrente	Jesús J.	Catedrático Univ.	PDI	UZ	Dr
Pires	Ezquerria	Elisabet	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Puerta	Oteo	Raquel	BEC FPI	Investigador	UZ	Lcd
Riera	Menéndez	Lucía	Científica Titular	Investigador	CSIC	Dr
Río	Varea	Mª Pilar del	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Dr
Roca	López	David	BEC FPU	Investigador	UZ	Lcd
Rodríguez	Díaz	Isabel	Contrato EPIF	Investigador	UZ	Lcd
Roldán	Muñoz	Laura	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Dr
Rubio	Pérez	Laura	BEC OOII	Investigador	UZ	Dr
Sádaba	Mendoza	David	BEC JAE Predoc	Investigador	CSIC	Lcd
Salvatella	Ibáñez	Luis	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Sancho	Gracia	Sofía	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Lcd
Sanz	Miguel	Pablo J.	Ramón y Cajal	PDI	UZ	Dr

Sayago	García	Fco. Javier	Prof. Ayud. Doctor	PDI	UZ	Dr
Segura	Segura	Elena	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Ing
Serrano	Martín	Elena	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Dr
Sicilia	Martínez	Violeta	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Sola	Larraya	Eduardo	Investig. Científico	Investigador	CSIC	Dr
Suárez	Álvarez	Francisco J.	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Dr
Tejel	Altarriba	Mª Cristina	Investig. Científico	Investigador	CSIC	Dr
Tejero	López	Tomás	Catedrático Univ.	PDI	UZ	Dr
Tomás	Lisbona	Milagros	Investig. Científico	Investigador	CSIC	Dr
Torres	Blasco	Olga	Contrato Proyecto	Investigador	CSIC	Dr
Urriolabeitia	Arrondo	Esteban P.	Investig. Científico	Investigador	CSIC	Dr
Vélez	Blasco	Andrea	Contrato Proyecto	Investigador	UZ	Lcd
Viguri	Rojo	Fernando	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Villacampa	Pérez	Mª Dolores	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Villarroya	Aparicio	Beatriz Eva	Titular Universidad	PDI	UZ	Dr
Villuendas	Piqueras	Pedro	Juan de la Cierva	Investigador	CSIC	Dr
Visbal	Acevedo	Renso R.	BEC FPI	Investigador	UZ	Lcd
Vispe	Palacín	Eugenio	Contrato Técnico	Técnico	UZ	Dr.

Personal CEQMA

APELL. 1	APELL. 2	NOMBRE	Labor	Centro	Titul.
Elías	Martínez	Mª Isabel	Administración	CSIC	
Sierra	Lite	Ana Cristina	Administración	CSIC	
Marco	Pérez	Concepción	Administración.	CSIC	
Pérez	Montañés	Mª Pilar	Administración	CSIC	
García	Val	José Carlos	Administración	CSIC	
Lloret	Barrachina	José	Administración	CSIC	
Segura	Segura	Elena	Administración	UZ	
Sarto	Asensio	Mª Dolores	Administración	UZ – ICMA	
Todorova	Marinova	Yordanka	Técnico	CSIC	Dr
Savirón	Sánchez	María	Técnico	CSIC	Dr
Delso	Hernández	José Ignacio	Técnico	CSIC	Dr
Lahoz	Espinosa	Ruth	Técnico	CSIC	Dr
Martínez	Ruiz	Marisol	Técnico	CSIC	
Bernad	Pérez	Ana Lidia	Técnico	CSIC	
Monteagudo	Huerta	Marta María	Técnico	CSIC	
Gil	Andaluz	Miguel Ángel	Técnico	CSIC	
Castañón	Tomé	Fernando	Técnico	CSIC	
Artigas	Jariod	Mª José	Técnico	CSIC	
Asensio	García	Laura	Técnico	CSIC	
Berruoco	Martínez	Beatriz	Técnico	CSIC	
Pedraz	Carrasco	Patricia	Técnico	CSIC	
Estepa	Millán	Luis Carlos	Técnico	CSIC	
González	Pérez	Pedro	Técnico	CSIC	



Apartado 2. Líneas de investigación Grupos de investigación

Como se ha comentado con anterioridad, la estructura organizativa del ISQCH ha hecho coincidir, de manera razonada y premeditada, los Departamentos de investigación del Instituto con las líneas de investigación (si bien con nombres ligeramente más explícitos), y, a su vez, las distintas sublíneas con los verdaderos grupos de investigación actualmente en funcionamiento.

Responde esta estructura a una racionalización del funcionamiento organizativo de nuestro Instituto frente a los marcos institucionales de los dos patronos de nuestro centro, CSIC y Universidad de Zaragoza, a la vez que frente a la estructura organizativa de la investigación en nuestro entorno autonómico.

Línea 1. Síntesis, estructura y aplicaciones de compuestos organometálicos y de coordinación

- Sublínea 1.1. Diseño de compuestos de coordinación con propiedades de interés
- Sublínea 1.2. Diseño de sistemas moleculares y supramoleculares de elementos de transición
- Sublínea 1.3. Química organometálica aplicada

Línea 2. Catálisis y procesos catalíticos

- Sublínea 2.1. Catálisis homogénea por compuestos organometálicos
- Sublínea 2.1. Catálisis heterogénea y bifásica
- Sublínea 2.3. Catálisis estereoselectiva
- Sublínea 2.4. Compuestos orgánicos enantiopuros y catálisis

Línea 3. Síntesis y estructura de biomoléculas

- Sublínea 3.1. Aminoácidos y péptidos
- Sublínea 3.2. Síntesis asimétrica y aplicaciones en Química bioorgánica

Línea 4. Formación y ruptura de enlaces promovida por complejos organometálicos

- Sublínea 4.1. Formación y ruptura de enlaces C-H, C-C y C-heteroátomo inducidas por compuestos organometálicos
- Sublínea 4.2. Activación molecular a través de compuestos organometálicos
- Sublínea 4.3. Arquitectura molecular y reactividad de compuestos metalorgánicos
- Sublínea 4.4. Mecanismos de reacción en química organometálica y catálisis

Línea 1. Síntesis, estructura y aplicaciones de compuestos organometálicos y de coordinación

Esta línea de investigación se centra en la síntesis, estructura y estudio de las posibles aplicaciones de los compuestos organometálicos y de coordinación. Se busca que los compuestos preparados posean características especiales, como modos de coordinación inusuales, estabilización de estados de oxidación poco frecuentes, estructuras supramoleculares (a través de enlaces secundarios) u otro tipo de propiedades ópticas, catalíticas o biológicas. Aunque no de forma exclusiva, una gran parte del trabajo se centra en la síntesis de compuestos metálicos cuyo centro pertenezca al grupo del platino o al grupo 11, si bien se ha comenzado recientemente una nueva línea conteniendo lantánidos. La preparación de nuevos ligandos es una parte esencial en esta línea de investigación, ya que éstos son diseñados con el propósito de conferir a los compuestos preparados las nuevas propiedades que se buscan. La síntesis de los complejos metálicos a partir de estos ligandos y el posterior estudio de las propiedades que presentan son otros de los objetivos marcados. En este sentido la línea está especialmente interesada en las aplicaciones industriales de estos compuestos y es por ello que las aplicaciones en nuevos pigmentos cerámicos, luminiscentes o sensores nos han permitido colaboraciones con empresas cerámicas o de señales de seguridad.

Sublínea 1.1. Diseño de compuestos de coordinación con propiedades de interés

El objetivo fundamental de esta sublínea de investigación es la síntesis de compuestos de coordinación pero siempre pensando en las propiedades especiales que pueden presentar. El trabajo se centra principalmente en compuestos homometálicos del grupo 11, pero también se estudian especies heterobimetálicas, ya que la presencia de varios centros metálicos da lugar a interacciones metal-metal que pueden conferir o mejorar ciertas propiedades. Una característica primordial es la preparación de ligandos, de forma que se realiza una gran labor de investigación en el diseño de nuevos ligandos que puedan conferir a los compuestos sintetizados las propiedades que se van buscando de tipo ópticas, catalíticas o biológicas. Los ligandos utilizados van desde derivados del ferroceno o carboranos, iluros, carbenos, acetiluros, calcogenos, fosfinas y ligandos biológicos. En resumen la investigación se centra en el diseño de ligandos, preparación y caracterización de los complejos de coordinación y el estudio de las propiedades catalíticas o biológicas. Tanto los ligandos, como a su vez los complejos, se pueden ir modificando en atención a incrementar y mejorar las propiedades observadas.

Sublínea 1.2. Diseño de sistemas moleculares y supramoleculares de elementos de transición

Los objetivos globales de esta sublínea son la síntesis, caracterización y estudio de las propiedades de complejos organometálicos de los elementos del grupo del platino con diferentes tipos de ligandos. Los diferentes tipos de ligandos y su disposición en torno al elemento metálico se seleccionan con el objetivo de que estos muestren un interés adicional debido a:

a) Nuevos modos de coordinación de los ligandos

b) Centros metálicos en estados de oxidación inusuales. Estas situaciones se pueden favorecer por el tipo de ligando utilizado, por la esfera de coordinación resultante y por el tipo de agente oxidante utilizado. Así es importante el control del medio de reacción, de la temperatura y del tiempo que puede favorecer o dificultar el proceso de adición oxidante o eliminación reductora. En nuestra experiencia las reacciones que pueden dar lugar a complejos con metales en altos y bajos estados de oxidación son adecuadas para este propósito.

c) Presencia de propiedades interesantes como magnéticas, ópticas (luminiscencia, vapocromismo), catalíticas, etc. y en algunos casos puede ser de interés adicional las posibles aplicaciones industriales.

d) Reactividad especial de los nuevos complejos: Se estudiarán procesos de activación de enlaces C-H, C-F, C-C y C-P, además de la formación, a través del centro metálico, de este tipo de enlaces.

e) Posibilidad de formación de interesantes estructuras supramoleculares, en las que las moléculas individuales se conectan a través de interacciones de enlace secundarias, como interacciones metálicas, enlaces de hidrogeno y apilamientos de moléculas aromáticas.

Sublínea 1.3. Química organometálica aplicada

El objetivo general de esta sublínea es la síntesis y el estudio de las aplicaciones de compuestos conteniendo elementos del grupo 11 y de los lantánidos. Diversas son las áreas en las que se buscan las aplicaciones de estos complejos metálicos:

a) Compuestos solubles en agua: se persigue la preparación de compuestos de coordinación solubles en agua que puedan tener distintas aplicaciones en el campo de las propiedades biológicas, como anticancerígenos, incluyendo compuestos luminiscentes que permitan hacer un seguimiento del posible mecanismo de actuación. Otra característica importante es la posible actividad catalítica en agua de algunos de los complejos obtenidos.

b) Fabricación de materiales híbridos funcionales: la ablación laser de compuestos organometálicos adecuados del grupo 11 permite la obtención de espumas nanocompuestas de carbono/metal de gran interés en nanociencia y pueden tener interesantes implicaciones tecnológicas.

c) Estudio de complejos de lantánidos con terpiridinas: los complejos de lantánidos tienen unas propiedades luminiscentes singulares, como emisiones en frecuencias muy definidas y largos tiempos de vida media. El objetivo es la preparación de compuestos con polipiridinas y ligandos similares para estudiar las posibles aplicaciones de los compuestos obtenidos como sensores o para dispositivos electrónicos.

Línea 2. Catálisis y procesos catalíticos

El objetivo general de esta línea de investigación es la preparación de catalizadores más eficientes, con aplicación en diferentes áreas de la síntesis química, y un conocimiento completo de los mecanismos, de la actividad y selectividad de estos nuevos catalizadores. Este objetivo final está centrado en tres puntos concretos:

a) Diseño y síntesis: en esta parte se focalizan los esfuerzos en el diseño de nuevos ligandos, bien quirales y no quirales, polidentados y multifuncionales, que sean capaces de transmitir al centro metálico del complejo catalítico las características electrónicas y estéricas adecuadas (incluyendo la información quiral cuando se utilizan catalizadores asimétricos), el diseño de nuevos organocatalizadores quirales, capaces de inducir enantioselectividad eficientemente en las reacciones y la preparación y caracterización estructural de nuevos complejos mono y polinucleares con actividad catalítica.

b) Mecanismos de reacción: se centra en el estudio de la actividad catalítica y la investigación de los mecanismos de reacción, que requieren el estudio del ciclo catalítico, en la detección de intermedios orgánicos y organometálicos, en los estudios cinéticos y espectroscópicos y en modelos teóricos de las reacciones.

c) Desarrollo del proceso catalítico: este apartado cubre la investigación en las aplicaciones de los catalizadores desarrollados en procesos de interés práctico, como la hidrogenación o reacciones de transferencia de hidrogeno, activación de hidrocarburos y de

dióxido de carbono, reacción de formación de enlaces C-C, activación de enlaces C-H, etc. También será importante la optimización del proceso catalítico, utilizando catalizadores heterogéneos o bifásicos, metodologías de reactor continuo y, en general, mejorando la sostenibilidad de los procesos químicos.

Sublínea 2.1. Catálisis homogénea por compuestos organometálicos

El objetivo de esta sublínea de investigación es el diseño y optimización de nuevos catalizadores homogéneos de metales de transición, activos y selectivos en transformaciones con elevada economía atómica. Las aplicaciones catalíticas de interés preferente son: reacciones de hidrogenación y de transferencia de hidrógeno, activación de hidrocarburos y dióxido de carbono, hidratación, aminación e hidrosililación de olefinas y alquinos terminales. La aproximación a este objetivo es múltiple ya que implica el diseño de nuevos ligandos polidentados de carácter multifuncional que transmitan a los centros metálicos las características electrónicas y estéricas adecuadas, la preparación y caracterización estructural de compuestos mono- y polinucleares de metales de transición (metales de los grupos 4, 8, 9 y 10), el estudio de su actividad catalítica, la investigación del mecanismo de las reacciones, lo que implica el estudio de los ciclos catalíticos, la detección y caracterización de los intermedios organometálicos que participan en los mismos y la modelización teórica de las reacciones que permita su optimización y la explicación del origen de la selectividad del proceso.

Sublínea 2.2. Catálisis Heterogénea y Bifásica

El objetivo general de esta sublínea es el desarrollo de procesos catalíticos más sostenibles mediante el empleo de catalizadores heterogéneos (sólidos) o bifásicos (solubles). Desde el punto de vista más académico, el objetivo fundamental es la comprensión del fenómeno catalítico en su conjunto, es decir la interacción sustrato-catalizador y los parámetros que afectan a la actividad y, sobre todo, a los diferentes tipos de selectividad. Desde el punto de vista aplicado, el empleo de este tipo de catalizadores debe permitir mejorar las condiciones y los resultados de la reacción, reduciendo riesgos y costes, y mejorando el proceso en términos de una mayor sostenibilidad.

Sublínea 2.3. Catálisis Estereoselectiva

Esta sublínea persigue el desarrollo de nuevos sistemas catalíticos enantioselectivos aplicables a diferentes procesos orgánicos tales como la transferencia de hidrógeno a sustratos insaturados, reacciones de Diels–Alder, adiciones de Michael, cicloadiciones 1,3 dipolares, o reacciones de Friedel–Crafts, entre otros. Los precursores catalíticos son complejos organometálicos de iones d^6 con los fragmentos $(C_5Me_5)M$ ($M = Rh, Ir$) o $(areno)_2M'$ ($M' = Ru, Os$) con diferentes tipos de ligandos bidentados quirales. Se presta atención especial al estudio de las especies organometálicas implicadas en los procesos catalíticos para obtener información acerca de los mecanismos de reacción involucrados y del origen de las diferentes selectividades.

Sublínea 2.4. Compuestos orgánicos enantiopuros y catálisis

El objetivo de esta sublínea persigue el desarrollo de nuevas metodologías, diastereo- y enantioselectivas que permitan obtener compuestos orgánicos enantioméricamente puros con elevada diversidad estructural y estereoquímica para ser utilizados como inductores de asimetría en procesos catalíticos, bien como ligandos quirales unidos a metales, bien como organocatalizadores. El estudio del comportamiento de los compuestos obtenidos en procesos enantioselectivos efectuando el desarrollo de nuevos procesos enantioselectivos y el diseño racional de nuevos catalizadores quirales con estructura optimizada. Aplicación de la síntesis asimétrica a la obtención de productos de interés enantioméricamente puros.

Línea 3. Síntesis y estructura de biomoléculas

Los objetivos fundamentales de esta línea de investigación se centran en:

a) Desarrollo de nuevas metodologías en síntesis orgánica, orientadas hacia la síntesis de nuevas moléculas enantioméricamente puras, bioactivas con los correspondientes objetivos terapéuticos. Se persigue una mayor innovación en el control estereoquímico total de las transformaciones químicas complejas seguida por la combinación de avanzados métodos de síntesis, nuevas metodologías y nuevos conceptos en síntesis orgánica.

b) Síntesis de aminoácidos, análogos de los residuos proteínogénicos, y estudio de sus tendencias de conformación a través de la incorporación en pequeños péptidos modelo. De acuerdo con el comportamiento estructural de estos aminoácidos, algunos de ellos son seleccionados para su incorporación en sistemas más grandes de péptidos de interés estructural y / o biológico. Esto permite el diseño de péptidos con propiedades bien definidas en su conformación, con aplicaciones en diversos campos.

Sublínea 3.1. Aminoácidos y péptidos

La investigación de esta sublínea se desarrolla dentro del grupo "aminoácidos y péptidos", con una larga experiencia reconocida internacionalmente en la síntesis de aminoácidos no proteínogénicos, como lo demuestran los más de 300 artículos publicados en el campo. Más recientemente, se ha desarrollado un importante paso adelante que implica el estudio estructural de estos aminoácidos, además de llevar a cabo la explotación del gran potencial que tienen los aminoácidos modificados en el diseño de péptidos con propiedades bien definidas de conformación.

La preparación de los aminoácidos no naturales se lleva a cabo, ya sea por síntesis asimétrica, o por la combinación de la síntesis racémica y los procedimientos de resolución. En todos los casos, el aislamiento de cantidades significativas de compuestos en forma enantioméricamente pura es un objetivo importante. Los esfuerzos actuales se centran en la preparación de los análogos restringidos de prolina y fenilalanina, que están diseñados de acuerdo a las propiedades estructurales buscadas o para la aplicación particular que se requiere. Las preferencias conformacionales de los nuevos aminoácidos se determinan por el análisis estructural de pequeños péptidos modelo que los contengan. Sobre la base de sus propiedades conformacionales, algunos de estos aminoácidos son seleccionados para su incorporación en péptidos de interés biológico o estructural, con el fin de estabilizar un tipo particular de estructura secundaria o la mejora de su comportamiento biológico, lo que permite el establecimiento de las relaciones estructura-actividad. Además, algunos de estos aminoácidos son utilizados como ligandos en compuestos organometálicos o en otras aplicaciones desarrolladas en estrecha colaboración con diferentes grupos de investigación. Esto permite que la explotación del gran potencial de los aminoácidos no naturales en una gran variedad de campos confiera un carácter multidisciplinar a esta sublínea de investigación.

Sublínea 3.2. Síntesis Asimétrica y Aplicaciones en Química Bioorgánica

Esta línea de investigación tiene como objetivo desarrollar nuevas metodologías de síntesis orgánica orientadas hacia la síntesis de nuevas moléculas enantioméricamente puras, bioactivas con los correspondientes objetivos terapéuticos.

A pesar de los grandes avances en la síntesis asimétrica, el nivel de rendimiento deseado en la obtención de productos avanzados y materiales de interés biológico está aún lejos de alcanzar con las tecnologías actuales. Por lo tanto, el objetivo científico a largo plazo de esta línea de investigación es lograr grandes innovaciones para el control total de la estereoquímica de las transformaciones químicas complejas. Nuestro objetivo es desarrollar una nueva generación de metodologías sintéticas dirigidas a la preparación de moléculas orgánicas, pequeñas y medianas de interés biológico. Se pretende conseguir este objetivo mediante la combinación de métodos avanzados de síntesis en las reacciones de adición nucleófila con las reacciones

pericíclicas relacionadas con sistemas insaturados carbono-nitrógeno como nitronas y hidracinas. En comparación con la conocida química convencional sobre sistemas similares, tales como iminas, anticipamos que las características estéricas, electrónicas, y las propiedades de coordinación de las anteriores darán lugar a resultados inesperados tanto en la reactividad como en la selectividad.

Línea 4. Formación y ruptura de enlaces promovida por compuestos organometálicos

Esta línea de investigación se centra en el diseño de procesos homogéneos, promovidos por elementos metálicos, efectivos en la síntesis de moléculas orgánicas funcionalizadas utilizando unidades básicas de hidrocarburos, incluyendo alcanos. Estos procesos usualmente involucran la entrada, de una manera consecutiva y controlada, de moléculas orgánicas en la esfera de coordinación de un complejo metálico, para dar lugar a un complejo organometálico, que puede reaccionar con una función orgánica para dar la deseada molécula orgánica funcionalizada. Entre los principales objetivos de esta línea de investigación están la activación C-H y las reacciones de acoplamiento carbono-carbono y carbono-heteroátomo. La activación de hidrogeno y oxígeno molecular, a través de complejos de transición, y la subsiguiente reacción con moléculas orgánicas, además del estudio de formación de enlaces metal-metal se encuentran entre los principales puntos de interés de esta línea.

Sublínea 4.1. Formación y ruptura de enlaces C-H, C-C y C-heteroátomo inducidas por compuestos organometálicos

El objetivo de esta sublínea de investigación es diseñar procesos homogéneos, promovidos por complejos de metales de transición, efectivos en la síntesis de moléculas orgánicas funcionalizadas, a partir de unidades básicas de hidrocarburos, incluyendo alcanos. Nuestra hipótesis inicial es que este proceso implicaría la entrada, de forma consecutiva y controlada de los fragmentos orgánicos en la esfera de coordinación de complejos de metales de transición para dar un compuesto organometálico, que podría reaccionar con una función orgánica para producir la molécula orgánica funcionalizada y regenerar el complejo del metal de transición. El diseño de catalizadores y de nuevos procesos requiere un conocimiento básico de los factores principales de los ciclos catalíticos, es decir: los pasos elementales de la catálisis. En este caso, se trata de la activación de enlaces C-H y las reacciones de acoplamiento carbono-carbono y carbono-heteroátomo

Sublínea 4.2. Activación molecular a través de compuestos organometálicos

El principal objetivo de esta sublínea es la activación selectiva de enlaces C-X, promovida por complejos metálicos, en sustratos con más de una posición de coordinación disponible, con el objeto de dar compuestos ciclometalados. En los sustratos estudiados, X es principalmente H ó P, pero puede ser N ó S y los metales de transición pueden ser Pd, Pt, Au ó Ru. El propósito es determinar las mejores condiciones de reacción para conseguir una determinada activación (C-H versus C-P por ejemplo) y afinar las condiciones para cambiar la orientación de la metalación en otras posiciones. En este sentido, se preparan compuestos organometálicos con el metal en una posición identificada claramente. Este enlace C-M se transformará en un enlace C-C a través de una reacción del compuesto organometálico intermedio con sustratos orgánicos.

Sublínea 4.3. Arquitectura molecular y reactividad de compuestos metalorgánicos

El objetivo fundamental de esta sublínea es el desarrollo de una investigación en química fundamental con el objetivo de profundizar en el estudio de nuevas reacciones y procesos químicos, dirigida a la funcionalización de sustratos orgánicos como la oxigenación de olefinas y reacciones de oxidación mediante complejos metálicos. En conexión con estos estudios de reactividad, los complejos pueden unirse a dendrímeros con el propósito final de separar el catalizador de los productos finales. Por otra parte, se dedica una especial atención a la síntesis de compuestos con cadenas metálicas monodimensionales y cristales líquidos discóticos como base de una reactividad de tipo cooperativo entre los metales y por sus posibles aplicaciones en dispositivos electrónicos.

En esta sublínea se desarrollan varios objetivos que comprenden:

- a) Síntesis y diseño de complejos mono y dinucleares de elementos de transición con el objetivo de estudiar su estructura, enlaces de sustratos orgánicos, activación de oxígeno y reacciones entre ligandos. De especial interés es la síntesis de compuestos con enlaces múltiples M=E, así como el estudio de sus reacciones de transferencia de grupos orgánicos y sus reacciones de adición.
- b) Complejos polinucleares con estructuras prediseñadas que presenten cadenas discretas metálicas unidimensionales y compuestos metalo-orgánicos discóticos con propiedades de cristal líquido.

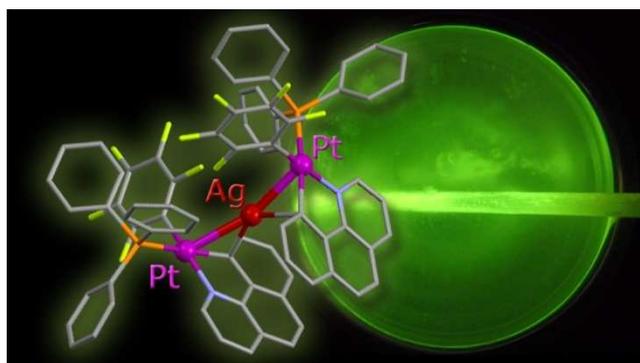
Sublínea 4.4. Mecanismos de reacción en química organometálica y catálisis

La optimización de procesos catalíticos ya conocidos y el desarrollo de otros nuevos se pueden abordar desde perspectivas diferentes, que van desde las puramente empíricas a las basadas en el conocimiento. En el ámbito de estas últimas, esta sublínea persigue conclusiones mecanísticas significativas desde el punto de vista de la ciencia básica que también sirvan como guía para la mejora y el desarrollo de catalizadores. Para ello se someten a estudio reacciones organometálicas y procesos catalíticos que encierren incógnitas mecanísticas básicas y simultáneamente constituyan retos desde un punto de vista socioeconómico. Como ejemplo importante, la sublínea trabaja bajo la hipótesis de que las dificultades prácticas inherentes a la activación de enlaces C-H y su posterior funcionalización se pueden superar a través de la comprensión de sus mecanismos y, en consecuencia, el desarrollo de funcionalizaciones C-H económicamente viables es un objetivo final en el horizonte de la sublínea.

Departamentos

Departamento 1. Compuestos Organometálicos y de Coordinación

La investigación que se lleva a cabo en el Departamento 1 se centra en la síntesis, estructura y estudio de compuestos organometálicos y de coordinación. Se pretende que los compuestos preparados tengan interés, tanto desde el punto de vista científico, como del de su posible aplicación. Por ejemplo se aborda la síntesis de complejos en los que el centro metálico posea modos de coordinación inusuales, se encuentre en estados de oxidación poco frecuentes, o muestre interacciones poco habituales. También se diseñan complejos que puedan presentar estructuras supramoleculares de interés. La preparación de nuevos ligandos es una parte esencial en esta línea de investigación, ya que éstos son diseñados con el propósito de conferir a los compuestos preparados las nuevas propiedades que se buscan. Se estudian especialmente las propiedades ópticas, que podrían llevar a la utilización de estos complejos como pigmentos cerámicos, luminiscentes o sensores, propiedades catálicas o posible actividad biológica. Aunque no de forma exclusiva, una gran parte del trabajo se centra en la síntesis de compuestos metálicos cuyo centro pertenezca al grupo del platino o del grupo 11 y se ha comenzado una nueva línea en lantánidos. Las propiedades de algunos de estos compuestos han permitido iniciar colaboraciones con empresas.



Departamento 2. Catálisis y Procesos Catalíticos

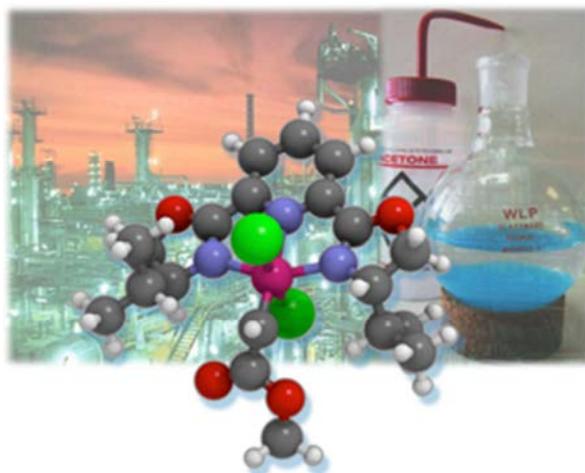
La catálisis constituye una de las bases de la Química Sostenible y es clave para el desarrollo de procesos químicos más limpios y sostenibles. El departamento de Catálisis y Procesos Catalíticos desarrolla su actividad investigadora en la síntesis de compuestos de coordinación de metales de transición, compuestos organometálicos y compuestos orgánicos y en su aplicación a la transformación catalítica de sustratos orgánicos en productos funcionalizados de interés industrial, encuadrados en los grupos de “fine chemicals”, “commodities” y “specialties”.

Esta actividad es desarrollada desde diferentes perspectivas por los cuatro grupos de investigación pertenecientes al departamento. En conjunto, esto supone un tratamiento exhaustivo del fenómeno catalítico, desde los aspectos más básicos hasta la aplicación del catalizador a un proceso de interés industrial. Esto supone realizar diseño y síntesis de ligandos, síntesis y caracterización de los catalizadores, y estudios mecanísticos de las reacciones y los ciclos catalíticos (experimentales y computacionales), todo ello dirigido a la obtención de nuevos sistemas catalíticos y a la optimización de los ya conocidos.

Los catalizadores preparados se aplican a procesos tales como la hidrogenación, la fijación y valorización de CO₂ o las reacciones de formación de enlaces carbono-carbono, en muchos casos de forma enantioselectiva. En general se prefieren los procesos que posean una elevada economía atómica. Además, los aspectos económicos y medioambientales de los procesos catalíticos pueden mejorarse si el catalizador puede separarse fácilmente de los productos de la reacción y reutilizarse en sucesivos ciclos.

Las actividades del departamento de Catálisis y Procesos Catalíticos pueden resumirse, pues, en tres grandes bloques:

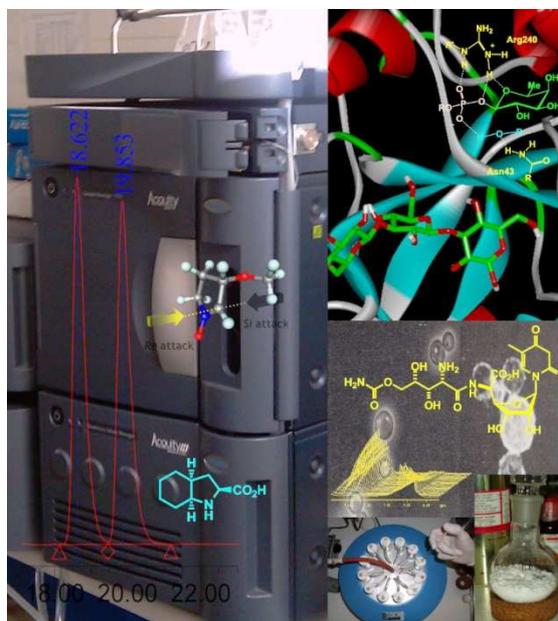
1. Diseño y síntesis. Nuevos ligandos (no quirales y quirales), nuevos complejos de dichos ligandos con metales de transición y nuevos organocatalizadores.
2. Aspectos mecanísticos. Investigación de los mecanismos de reacción, detección de intermedios, estudios cinéticos y espectroscópicos (incluyendo monitorización de las reacciones *in situ*), y estudios mecanísticos computacionales.
3. Desarrollo y optimización de procesos catalíticos. Hidrogenación y transferencia de hidrógeno, activación de hidrocarburos y de CO₂, hidroxilación, aminación e hidrosililación de alquenos, reacciones de formación de enlaces C–C, activación de enlaces C–H, etc.



Departamento 3. Síntesis y Estructura de Biomoléculas

El Departamento de Síntesis y Estructura de Biomoléculas centra su actividad en el campo de la Química Orgánica y Química Biológica en áreas relacionados con la química de carbohidratos, aminoácidos y péptidos, y análogos de nucleósidos. Dentro del Departamento se realizan investigaciones dirigidas hacia la síntesis de compuestos enantioméricamente puros de importancia biológica. Para ello se utilizan técnicas avanzadas que permiten una mayor innovación en el control de la estereoquímica de transformaciones químicas complejas. Entre dichas técnicas se encuentran procesos de síntesis asimétrica catalítica -utilizando tanto catálisis metálica como organocatálisis-, separación avanzada de enantiómeros (HPLC quiral) y reconocimiento de los mismos, y procesos biomiméticos.

El estudio estructural de biomoléculas comprende el diseño y obtención de aminoácidos no naturales, análogos de los residuos proteínogénicos, y su incorporación a pequeños péptidos modelo. De acuerdo con el comportamiento estructural de estos aminoácidos, algunos de ellos son seleccionados para su incorporación en sistemas más grandes de péptidos de interés estructural y / o biológico. Esto permite el diseño de péptidos con propiedades bien definidas en su conformación, con aplicaciones en diversos campos. También se aborda la caracterización de carbohidratos y análogos que pueden actuar como glicomiméticos, a su vez inhibidores y/o moduladores de actividades enzimáticas relacionadas con diversas patologías que comprenden infecciones fúngicas, bacterianas, cáncer o enfermedades autoinmunes. El estudio de los mecanismos de acción de las biomoléculas ya sean carbohidratos, aminoácidos o nucleósidos, sobre los enzimas objetivo se aborda a través del análisis de las interacciones proteína-ligando (biomolécula) mediante estudios computacionales (docking) y espectroscópicos (NMR).



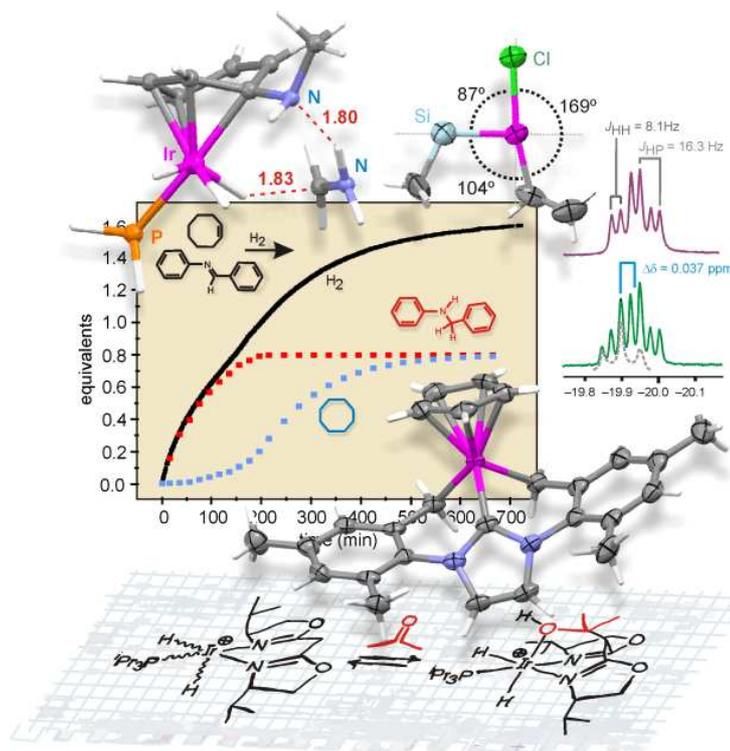
Departamento 4. Activación de Enlaces por Complejos Metálicos

Este Departamento diseña y prepara nuevos complejos de metales de transición y estudia reacciones y secuencias de reacciones en su esfera de coordinación con el objetivo final de desarrollar nuevos y procedimientos catalíticos más eficaces de síntesis de moléculas orgánicas funcionalizadas, o para la producción y el almacenamiento de energía. Las líneas del Departamento comparten buena parte de su metodología de investigación más habitual, que se inicia a partir de nuevos complejos insaturados de metales del final de las series de transición: Ru, Os, Rh, Ir, Pd, Pt y Au, principalmente.

Las moléculas de partida pueden ser unidades básicas de hidrocarburos (incluyendo sustratos muy inertes como alcanos, o más reactivos como alquenos y alquinos), sustratos aromáticos, heterociclos, etc.

En particular, el tipo de procesos bajo estudio involucra la entrada de la molécula orgánica a modificar en la esfera de coordinación de un complejo metálico para, mediante activación selectiva y dirigida de enlaces C-H, dar lugar a un complejo organometálico. Este es el intermedio clave que posibilita el proceso global, y es objeto de estudio detallado. Su reactividad posterior con una función orgánica da lugar a la molécula orgánica funcionalizada mediante procesos de acoplamiento carbono-carbono y carbono-heteroátomo. Igualmente la activación de hidrógeno y oxígeno molecular, a través de complejos de metales de transición, y la subsiguiente reacción con moléculas orgánicas, además del estudio de formación de enlaces metal-metal, se encuentran entre los principales puntos de interés de este departamento.

Esta metodología se complementa con el estudio detallado de los mecanismos de ruptura y formación de enlaces sobre complejos metálicos, ya que éstos proporcionan conclusiones que inspiran el diseño racional de nuevos catalizadores mejorados y/o mejores secuencias catalíticas de síntesis. La actividad más reciente en este aspecto se centra en caracterizar y explotar contribuciones funcionales (no estereoelectrónicas) para distintos tipos de ligandos.



Grupos de Investigación

A continuación se recoge las actividades y líneas de trabajo de los distintos grupos de investigación que componen el ISQCH, con indicación del investigador principal. En aquellos casos que el grupo se encuentra reconocido por el Gobierno de Aragón, se constata el correspondiente código. Los Grupos de Investigación actualmente existentes en el ISQCH son:

- Activación Molecular a través de Organometálicos
- Aminoácidos y Péptidos
- Arquitectura Molecular Inorgánica y Aplicaciones
- Catálisis Heterogénea en Síntesis Orgánicas Selectivas
- Catálisis Homogénea Enantioselectiva
- Catálisis Homogénea por Compuestos Organometálicos
- Catalizadores y Mecanismos
- Compuestos Enantiopuros y Procesos Sostenibles – CEPS
- Diseño de Compuestos de Coordinación con propiedades de interés
- Organometálicos y Catálisis
- Química Bioorgánica
- Química Inorgánica y de los Compuestos Organometálicos
- Química Organometálica Aplicada

Activación Molecular a través de Organometálicos (IP: Esteban Urriolabeitia; Grupo Consolidado E97)

Este grupo, integrado en el departamento 4 del ISQCH, desarrolla dos líneas de investigación bien diferenciadas con respecto a su temática.

Línea de trabajo 1: Funcionalización de moléculas orgánicas usando organometálicos de metales de transición

Esta línea estudia los procesos de formación de nuevos enlaces C-X en moléculas orgánicas, donde X puede ser un carbono o un heteroátomo, estando estas reacciones inducidas por complejos organometálicos. El proceso se puede considerar integrado por dos etapas.

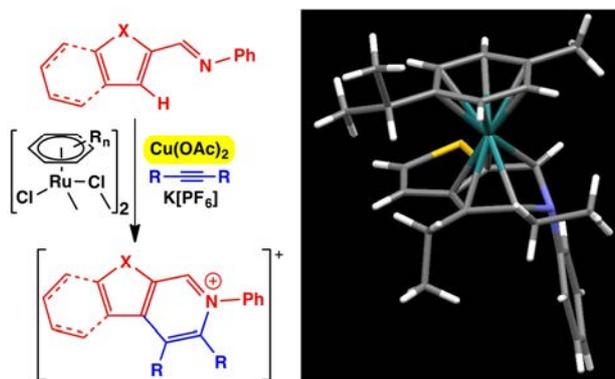
- En la primera se estudia la formación del complejo organometálico, es decir, el que contiene el enlace metal-carbono (M-C) o la posición reactiva, por reacción de nuestra molécula orgánica con el precursor metálico. En la segunda se ha de producir la ruptura del enlace M-C y la formación de los nuevos enlaces C-C y/o C-X en nuestro sustrato original. En la formación del complejo organometálico se presta especial atención a que la reacción tenga lugar mediante activación de enlaces CH, pues de esta forma se parte de sustratos más sencillos. Además se persigue el desarrollo de procesos regioselectivos, que discriminen una de las posiciones activables, lo que se consigue mediante la introducción de grupos directores.

- En la segunda etapa la formación de enlaces C-C y C-X se produce de forma selectiva en la posición que contiene el enlace metal-carbono (M-C). Este proceso de funcionalización se puede dar a través de procesos de acoplamiento oxidativo o de reacciones de inserción de moléculas insaturadas en el enlace metal-carbono.

Evidentemente, no todos los metales tienen la misma reactividad, y en función del tipo de proceso se utiliza un metal u otro. Los metales que actualmente se usan para estos procesos son Pd, Pt, Au, Ru y Cu. Se llevan a cabo procesos tanto estequiométricos como catalíticos, pero se presta especial atención a estos últimos, pues son más eficaces, generan menos residuos y permiten un ahorro energético y de recursos.

Las moléculas que se pretende funcionalizar responden en todos los casos a sustancias de alto valor añadido, es decir, sustancias que presentan interés *per se* debido a su implicación en sustancias naturales, productos con actividad biológica y/o farmacológica o intermedios clave en síntesis orgánica: α -aminoácidos (material básico en la síntesis de péptidos y moléculas biológicas de más alta complejidad), aminoalcoholes y oxazolonas (precursores y/o derivados de aminoácidos que han dado lugar a moléculas sin precedentes, como derivados del ácido truxílico), heterociclos (piezas fundamentales para la construcción de moléculas más complejas con propiedades biológicas, eléctricas, magnéticas y ópticas de alto interés).

El desarrollo de todos estos objetivos sintéticos precisa de la consideración de sub-objetivos metodológicos adicionales. El más importante de ellos es la modelización a nivel teórico (mediante cálculos DFT) de los sistemas de reacción. De la cuantificación de las barreras de activación y las estabilidades termodinámicas de los productos e intermedios es posible determinar cuáles son los parámetros que influyen en la reacción y modificarlos en busca de una determinada selectividad.



Funcionalización de heterociclos mediante activación de enlaces CH

Línea de trabajo 2: Diseño de compuestos con potenciales aplicaciones en catálisis, síntesis de nanopartículas, electrolitos sólidos, luminiscencia o en cristales líquidos

Estamos interesados en la síntesis de compuestos con metales como oro, plata, paladio o platino con los ligandos adecuados (acetiluro, imidazol, pirazol, otros), encaminados a la búsqueda de sus potenciales aplicaciones en catálisis, síntesis de nanopartículas, luminiscencia o en el campo de los cristales líquidos. Muchas de estas propiedades se pueden modular modificando el metal, su geometría, la naturaleza del ligando o mediante la presencia de interacciones metal-metal. Así, pretendemos abordar estos objetivos sintetizando en primer lugar los ligandos apropiados: (a) con la estructura promesógena adecuada para generar nuevas propiedades mesomorfas, (b) con los átomos dadores y el diseño adecuado para estabilizar nanopartículas metálicas y (c) que favorezcan la presencia de interacciones metal-metal, que generalmente dan lugar a propiedades luminiscentes.

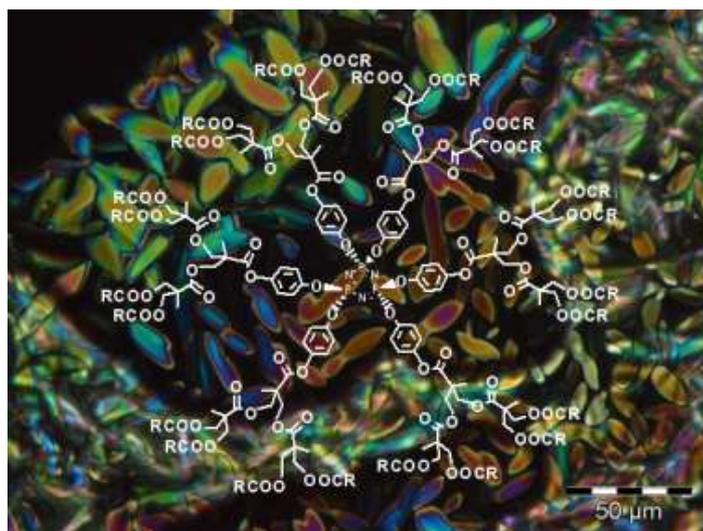
Nuestro objetivo de atención preferente en esta línea se centra en el uso de fosfazenos cíclicos y polímeros, $[NPR_2]_n$, que los utilizaremos como materiales propiamente dichos o para generar ligandos o soportes adecuados para su coordinación a metales y obtener así, las propiedades mencionadas anteriormente. Una de sus características más importantes de los fosfazenos es su gran versatilidad sintética, que permite introducir casi cualquier grupo lateral en el fósforo y prediseñar materiales con propiedades específicas, sin más que elegir adecuadamente dichos grupos. Así, es posible modificar la flexibilidad y cristalinidad del material, su solubilidad, su carácter hidrófobo o hidrófilo, su estabilidad química general e incluso es posible diseñar materiales con propiedades especiales como conductividad eléctrica, propiedades catalíticas o biomédicas, entre otras. Otras propiedades como la transparencia óptica del esqueleto

fosfazeno, su alta flexibilidad, su alta estabilidad térmica y su baja inflamabilidad, hacen que estos compuestos sean de gran interés en la investigación de nuevos materiales, no sólo desde una perspectiva de investigación básica, sino también aplicada. La gran versatilidad sintética de este sistema fosfazeno, ya sea en los ciclos o en los polímeros, permite también el diseño de una gran variedad de ligandos capaces de coordinarse a complejos metálicos para obtener así materiales con propiedades que son difíciles de conseguir con otros polímeros más convencionales.

Actualmente, nuestro interés se centra fundamentalmente en:

- (1) **Diseño de fosfazenos con los grupos laterales adecuados para obtener nuevas propiedades como cristal líquido y/o materiales luminiscentes.** Se trata de fundamentalmente de obtener, en el primer caso, ciclo- o polifosfazenos con grupos laterales promesógenos y en el segundo, con propiedades luminiscentes.
- (2) **Diseño de nuevos ligandos fosfazeno, cíclicos o polímeros, y su coordinación a metales,** encaminados a conseguir materiales con propiedades de interés. Se trata fundamentalmente de obtener: (a) ciclo- o poli-fosfazenos con grupos potencialmente dadores capaces de coordinarse a complejos metálicos con actividad catalítica, de utilidad como electrolitos sólidos o para la obtención de materiales nanoestructurados o nanopartículas, (b) fosfazenos de oro, plata o platino solubles en agua, mediante la introducción de los sustituyentes adecuados en la cadena o ciclo fosfazeno, con objeto de estudiar sus aplicaciones potenciales en medicina.

En ambos casos, como continuación al trabajo que venimos realizando, las aproximaciones a través de las que pretendemos acercarnos al diseño de estos materiales son: (a) a partir de las moléculas trímeras cíclicas (ciclotrifosfazenos), (b) a partir de los polímeros (polifosfazenos) y (c) a partir de nuevas estructuras dendrímeras. En este sentido, el anillo hexaclorociclotrifosfazeno, ($N_3P_3Cl_6$) es un excelente candidato para ser utilizado como "core" de nuevas estructuras dendríticas. La incorporación de grupos promesógenos en ellas permitirá obtener nuevos dendrímeros no convencionales con propiedades mesomorfas. La obtención de nuevas estructuras dendríticas no convencionales, basadas en ciclofosfazenos, con grupos terminales luminiscentes y con grupos dadores son otros objetivos concretos encaminados a conseguir complejos metálicos con las propiedades mencionadas.



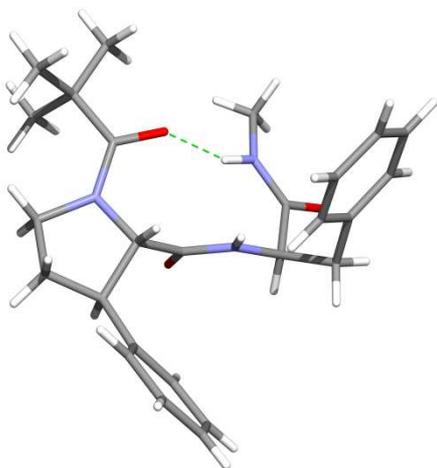
Nuevos materiales cristal-líquido basados en dendrímeros con un núcleo ciclotrifosfazeno

Aminoácidos y Péptidos (IP: Carlos Cativiela; Grupo Consolidado E40)

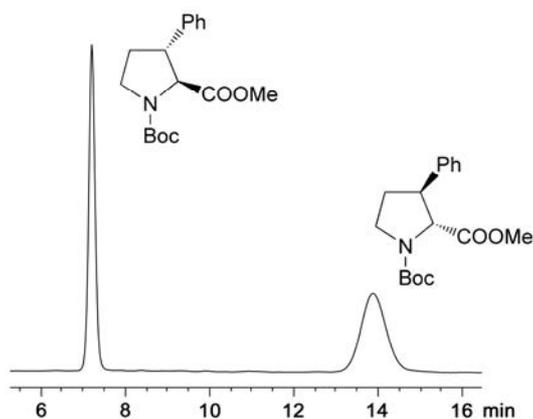
La investigación desarrollada por el grupo Aminoácidos y Péptidos se centra en la síntesis de aminoácidos no proteicos con diferentes tipos de modificaciones estructurales y funcionales y su posterior aplicación en el desarrollo de compuestos bioactivos de utilidad en el campo de la biomedicina o la agroquímica. Entre estos compuestos destacan los de carácter peptídico.

La estructura de los nuevos aminoácidos se diseña de acuerdo con el fin específico a que van destinados. Así, se lleva a cabo la introducción de elementos que limitan la flexibilidad conformacional, aumentando la rigidez de la molécula, o bien la incorporación de nuevos grupos funcionales. Un objetivo importante en todos los casos es la obtención de estos aminoácidos no proteicos en forma enantioméricamente pura y en cantidades significativas para que puedan ser utilizados en diversas aplicaciones. Para ello, se utilizan procedimientos de síntesis estereoselectivas o se llevan a cabo procesos de resolución empleando cromatografía líquida de alta resolución sobre soportes quirales.

Las preferencias conformacionales de los nuevos aminoácidos sintetizados se determinan mediante el estudio estructural de pequeños péptidos modelo que los contengan. Sobre la base de sus propiedades conformacionales, algunos de estos aminoácidos son seleccionados para su incorporación en péptidos de interés biológico o estructural, con el fin de estabilizar un tipo particular de estructura secundaria y/o mejorar su comportamiento biológico, lo que permite establecer relaciones estructura-actividad. Así, algunos de los aminoácidos no proteicos diseñados en el grupo van destinados a la preparación de péptidos de interés en la detección y el tratamiento del cáncer, o en la prevención de la demencia senil, así como al desarrollo de agentes antioxidantes de gran interés en la industria agroquímica. Muchos de los estudios que implican aplicaciones de estos aminoácidos y péptidos se realizan en colaboración con otros grupos de investigación o con industrias de los sectores farmacéutico y agroalimentario. Todo ello permite la explotación del gran potencial que los aminoácidos no naturales poseen en una gran variedad de campos y confiere un carácter multidisciplinar a la investigación desarrollada en el grupo.



Estructura de un dipéptido que contiene un análogo de prolina



Separación de los enantiómeros de un análogo de prolina utilizando HPLC quiral

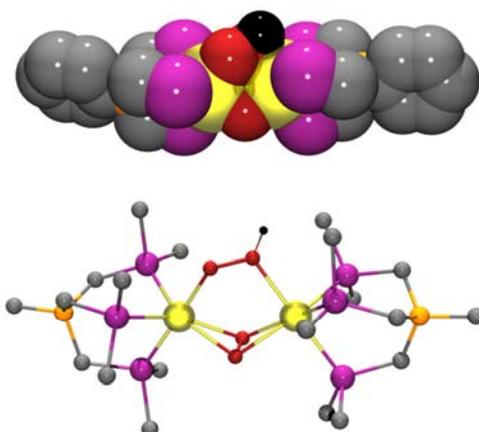
Arquitectura Molecular Inorgánica y Aplicaciones (IP: Cristina Tejel; Grupo Consolidado E70)



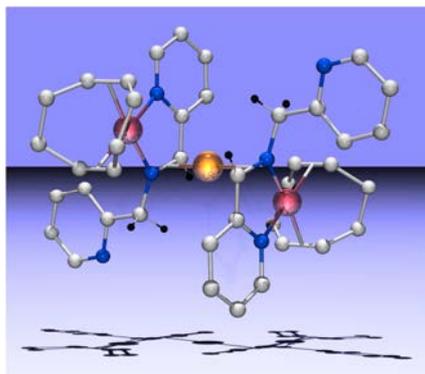
La temática del grupo es la síntesis y el estudio de la reactividad de nuevos complejos mononucleares y agregados moleculares de metales de transición dirigida a aplicaciones en catálisis homogénea y nuevos materiales.

Línea de trabajo 1: De interés particular es el desarrollo de sistemas que conducen a la activación de oxígeno por complejos metálicos, la elucidación de sus mecanismos y el fundamento de su posterior transferencia a compuestos orgánicos (hidrocarburos saturados e insaturados) que dan lugar a su funcionalización como compuestos oxigenados.

Se pretende estudiar las primeras etapas para la funcionalización de olefinas y compuestos aromáticos basándose en reacciones originales que se inician con intermedios valiosos como 2-metalaoxetanos, metal-peroxo y otros aductos de oxígeno. El objetivo final es la síntesis de precursores de catalizador para procesos de oxidación amigables con el medio ambiente (que evitan la generación de residuos, o el uso de contaminantes) para la síntesis de compuestos de alto valor añadido.



Línea de trabajo 2: Una segunda línea de investigación es la síntesis de complejos con ligandos 'no-inocentes' y de sus especies oxidadas o reducidas, en los que el carácter radicalario del ligando debe cooperar con el metal en procesos de transferencia multielectrónica o en la activación de sustratos mediante reacciones de transferencia protón-electrón. La reactividad química y las aplicaciones de complejos de este tipo en catálisis está en su infancia en contraposición con la química desarrollada hasta ahora generalmente con complejos de capa cerrada.

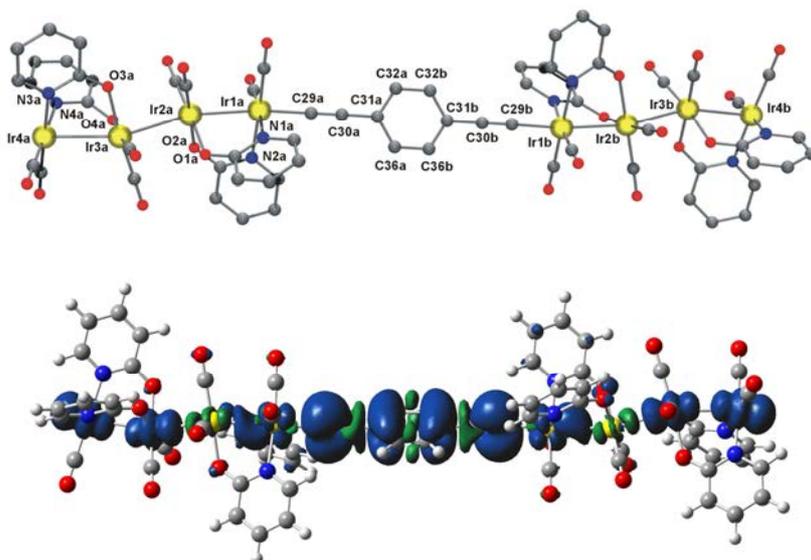


De especial relevancia en este contexto es el estudio de reacciones del dióxido de carbono dirigidas a su transformación en especies reducidas, ya sea por reacciones de inserción en enlaces del tipo M-X (X = H, C), o su reducción a ácido fórmico. El objetivo es encontrar nuevos modos de reactividad de compuestos organometálicos que puedan conducir a ciclos catalíticos de interés actual.

Línea de trabajo 3: En compuestos polinucleares nuestra actividad se centra en la síntesis de:

- a) compuestos con cadenas metálicas de valencia mixta y deslocalización electrónica.
- b) complejos con núcleos discoidales que generen fases columnares discóticas con propiedades de cristal líquido.

Compuestos que contienen metales unidos por enlaces metal-metal con disposición lineal (“metal strings” o “metal-wires”) son de extraordinario interés por sus previsible propiedades eléctricas y por su uso como precursores de materiales de baja dimensionalidad del tipo “molecular metal wires” y de nuevos dispositivos nanoelectrónicos. A pesar de su gran potencialidad, la síntesis de los compuestos que presentan más de tres átomos metálicos unidos en línea se encuentra en estado embrionario. En los objetivos de esta línea se encuentran propuestas de síntesis basadas en polimerización de enlaces múltiples metal-metal, condensaciones asistidas por ligandos, reacciones de comproporciónación redox y procesos de oxidación o reducción que abren una puerta esperanzadora a este tipo de compuestos unidimensionales.



Catálisis Heterogénea en Síntesis Orgánicas Selectivas (IP: José Antonio Mayoral; Grupo Consolidado E11)

El objetivo principal del grupo es aplicar la catálisis heterogénea, en un amplio sentido del término, a reacciones orgánicas donde la selectividad de cualquier tipo (químico, regio o estereo) sea fundamental. Dentro de este objetivo general, la preparación de catalizadores quirales inmovilizados ha sido uno de los temas clave de investigación en los últimos años, dado el interés de los productos enantioméricamente puros en la industria farmacéutica y de "specialties". Una línea más reciente del grupo intenta encontrar "valores añadidos" a este tipo de catalizadores, como la obtención de nuevas selectividades o la posibilidad de llevar a cabo en un solo paso reacciones consecutivas con catalizadores incompatibles en fase homogénea. En la actualidad, el grupo desarrolla una activa labor en el desarrollo de procesos químicos más sostenibles mediante el uso de la catálisis, con especial interés en los aspectos de biorrefinería integrada y aprovechamiento de residuos.

Línea de trabajo 1: Catálisis heterogénea en reacciones orgánicas

Esta línea ha venido siendo desarrollada en el grupo desde su comienzo en el año 1990, y consiste en el empleo de catalizadores heterogéneos en distintas reacciones orgánicas, primando la facilidad de separación y recuperación, así como la limpieza de los procesos. Como segundo objetivo se busca que los catalizadores heterogéneos ofrezcan algún plus sobre sus contrapartidas homogéneas, tales como distinta selectividad, mejor actividad o productividad, aplicaciones a procesos tándem, etc.

Los catalizadores heterogéneos estudiados hasta la fecha en el grupo comprenden sólidos ácidos de Lewis y de Brønsted, sólidos básicos, catalizadores de oxidación, complejos de coordinación soportados y nanopartículas metálicas soportadas.

Sólidos ácidos de Lewis. Comprenden ácidos de Lewis soportados sobre sílice, intercambiados catiónicamente en arcillas y fosfato de aluminio. Estos catalizadores se han utilizado en reacciones de formación de enlaces C-C, tales como la Diels-Alder y la Friedel-Crafts. Algunos de los catalizadores preparados han sido capaces de llevar a cabo reacciones que no tenían lugar en fase homogénea con los ácidos de Lewis análogos. Además, los ácidos de Lewis soportados se pueden utilizar fácilmente en procesos activados por microondas en ausencia de disolvente, lo que resulta más limpio, eficiente y sostenible.

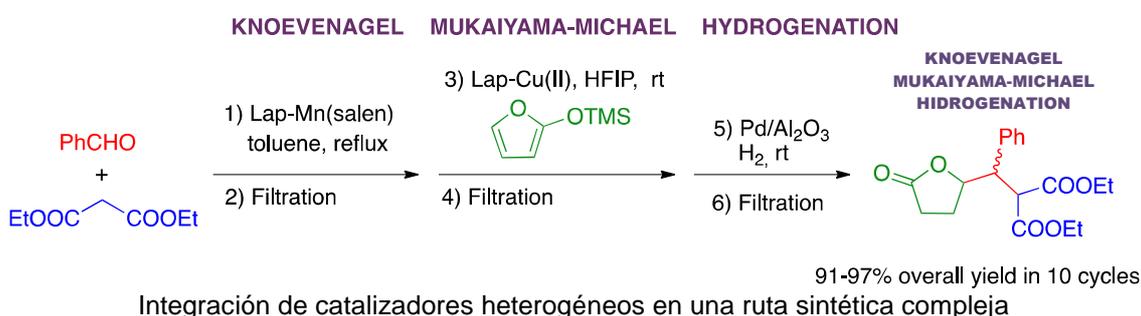
Sólidos ácidos de Brønsted. Entre ellos pueden citarse las zeolitas, los polímeros sulfonados (como la amberlita), los polímeros fluorosulfonados (como el nafiión), así como algunos materiales compuestos (composites nafiión-sílice). Recientemente, se ha comenzado a trabajar con carbones hidrotermales sulfonados que han demostrado ser excelentes catalizadores para reacciones como la transesterificación.

Sólidos básicos. Entre ellos están las hidrotalcitas y los fosfatos naturales tratados con sales potásicas. Estos catalizadores se han empleado en procesos de condensación clásicos, como la reacción de Knoevenagel, así como en reacciones de epoxidación de alquenos deficientes en electrones con agua oxigenada.

Catalizadores de oxidación. En esta categoría podemos citar los catalizadores de Ti soportados sobre sílices, que han demostrado ser buenos catalizadores de oxidación con peróxido de hidrógeno en concentraciones entre el 30% y el 60% en agua. Estos catalizadores se han empleado en epoxidación de alquenos ricos en electrones, así como en reacciones de oxidación alílica.

Nanopartículas metálicas soportadas. En nuestro grupo se han preparado nanopartículas de Pd(0) soportadas sobre laponita, una arcilla sintética. Estos sistemas se han aplicado en reacciones de acoplamiento C-C como las reacciones de Heck, Suzuki, Shonogasira, Negishi, etc. Algunos de los catalizadores preparados se han utilizado durante 50 ciclos de reacción, manteniendo una buena actividad y selectividad, lo que es prueba de su estabilidad y fácil manipulación.

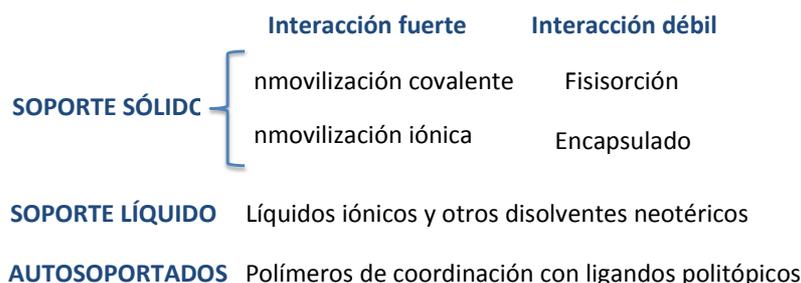
Finalmente, el empleo de sistemas catalíticos heterogéneos permite diseñar procesos multietapa en los que los catalizadores pueden ser fácilmente separados y reutilizados. Por ejemplo recientemente hemos descrito un proceso secuencial Knoevenagel/Mukaiyama-Michael/Hidrogenación que ha sido utilizado en 10 ciclos con rendimientos globales entre el 91% y el 97% (ver figura).



Línea de trabajo 2: Catálisis enantioselectiva soportada y bifásica

Esta línea ha venido siendo desarrollada en el grupo durante los últimos 15 años, durante los cuales se han explorado virtualmente todas las estrategias para inmovilizar el catalizador quiral en una fase que sea fácilmente separable de los productos de reacción e, idealmente, recuperable y reutilizable.

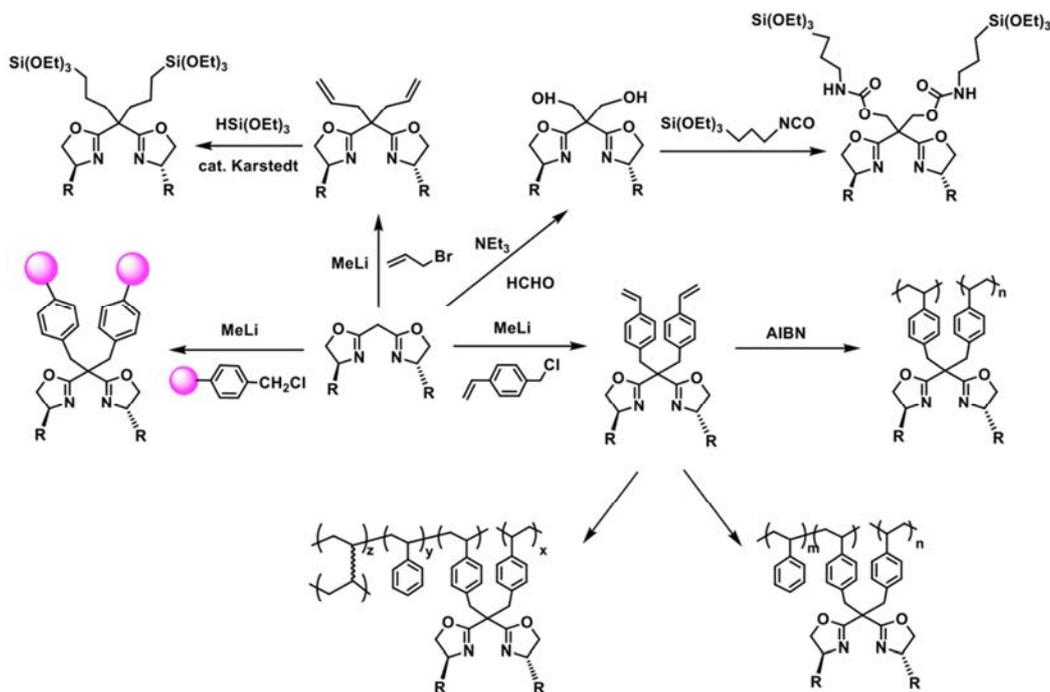
Podemos clasificar estas estrategias de acuerdo al siguiente diagrama:



Los soportes sólidos pueden ser polímeros orgánicos o sólidos inorgánicos (sílices, arcillas). Asimismo, el soporte puede ser preformado, y entonces el catalizador se une al mismo mediante anclaje o intercambio iónico, o bien puede generarse a la vez que se incorpora el ligando quiral (polimerización o procesos sol-gel). Un ejemplo de aplicación realizado en nuestro grupo es el referente a los ligandos bis(oxazolona) quirales, que han sido inmovilizados utilizando prácticamente todas estas estrategias (ver la imagen). Esto ha permitido comparar las capacidades catalíticas de todos los sistemas inmovilizados y comprender mejor el papel del soporte, que a veces puede cambiar completamente el curso estereoquímico de las reacciones.

Los soportes líquidos permiten llevar a cabo el proceso catalítico en una fase, para luego extraer los productos en otra fase líquida inmiscible con la primera. El catalizador permanece disuelto en la fase inicial, pudiendo ser reutilizado. Esta estrategia se ha ensayado con éxito empleando líquidos iónicos. También se han obtenido buenos resultados con un derivado del glicerol parcialmente fluorado, preparado en nuestro grupo. Las especiales características de este disolvente han permitido preparar fases catalíticas recuperables.

Finalmente, una nueva familia de ligandos politópicos, preparada por primera vez en nuestro grupo, ha permitido utilizar la estrategia de “liberación y captura”, que aúna las ventajas de la catálisis homogénea y la heterogénea. Así, los complejos de estos ligandos son solubles en el medio de reacción, teniendo lugar la catálisis en fase homogénea. Tras la reacción, un cambio de disolvente provoca la precipitación de un polímero de coordinación insoluble, que puede ser fácilmente separado del medio de reacción y reutilizado en sucesivos ciclos. Esta estrategia ha demostrado ser muy eficaz en varias reacciones, para algunas de las cuales (oxidación alílica de Kharasch-Sosnovsky, condensación nitroaldólica de Henry) no es fácil utilizar sistemas catalíticos recuperables.



Distintas estrategias de inmovilización covalente de ligandos bis(oxazolina)

Línea de trabajo 3: Catálisis heterogénea en procesos de biorrefinería

Esta línea es la de más reciente creación habiendo comenzado a desarrollarse a mediados de los 2000. La actividad en esta línea responde a las demandas de una sociedad más sostenible, menos dependiente de los productos derivados del petróleo, y donde las transformaciones de la biomasa, tanto en combustibles como en productos químicos de gran consumo toma cada vez un mayor protagonismo.

En nuestro grupo tratamos de aprovechar toda nuestra experiencia previa en procesos catalíticos para abordar procesos que puedan integrarse en el concepto de biorrefinería. Uno de los temas en los que hemos trabajado y continuamos trabajando es el del aprovechamiento del glicerol para obtener sustancias de interés. El glicerol aparece como un producto

concomitante en la obtención de biodiesel a partir de aceites y grasas, en cantidades de alrededor de un 10% en peso. En la actualidad esto supone una producción mundial por encima de los 2 millones de toneladas anuales.

En nuestro grupo trabajamos sobre la síntesis de derivados de glicerol, tanto conocidos previamente como totalmente nuevos, susceptibles de ser empleados como disolventes. Un aspecto en el que también hemos trabajado es la integración de la síntesis del derivado de glicerol en el propio proceso de fabricación de biodiesel, disminuyendo la necesidad de emplear grandes excesos de metanol.

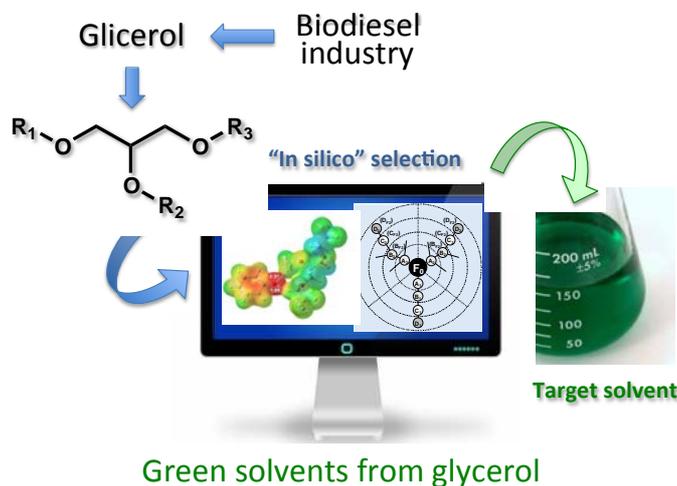
Asimismo, hemos descrito algunos nuevos derivados del glicerol que han demostrado poseer interesantes propiedades como disolventes, ya que son a la vez muy polares, hidrofóbicos y lipofóbicos. Esto ha permitido emplearlos en procesos catalíticos bifásicos con muy buenos resultados, superiores en algunos casos a los obtenidos con líquidos iónicos.

También se ha investigado el empleo de glicerol para preparar derivados (tales como acetales y cetales cíclicos) que pueden utilizarse como aditivos del biodiesel para mejorar sus propiedades, tanto de comportamiento en frío como de combustión.

Por otra parte, se ha trabajado en las transformaciones químicas de los ésteres de ácidos grasos insaturados, presentes el biodiesel para preparar tanto aditivos para el mismo, como productos que puedan tener aplicaciones con un mayor valor añadido, tales como lubricantes, disolventes para recubrimientos o tensioactivos.

También se está trabajando actualmente en procesos de esterificación selectiva del glicerol con ácidos de cadena corta, que conducen a productos de gran interés como disolventes, plastificantes, humectantes, etc.

Para estos procesos utilizamos los catalizadores heterogéneos en los que el grupo ha adquirido una gran experiencia por su actividad previa, tales como los sólidos ácidos.



Nuevos biodisolventes a partir de glicerol: síntesis, propiedades y aplicaciones.

Catálisis Homogénea Enantioselectiva (IP: Daniel Carmona; Grupo consolidado E63)

La síntesis de compuestos quirales enantiopuros es una tarea fundamental en la química actual. La catálisis asimétrica es el método ideal para sintetizar compuestos ópticamente activos, y el empleo de compuestos metálicos como catalizadores moleculares homogéneos es actualmente la estrategia más general que dispone el químico para obtener moléculas quirales enantioenriquecidas. En esta línea de investigación, se desarrollan nuevos sistemas catalíticos enantioselectivos basados en compuestos quirales de metales de transición, para diferentes procesos orgánicos en los que, de forma general, tiene lugar la conversión de carbonos sp^2 , en centros quirales. Entre las reacciones más estudiadas, se encuentran las reacciones de hidrogenación, de cicloadición de Diels-Alder y 1,3-dipolar, y de Friedel-Crafts. Se dedica especial atención al estudio de los compuestos organometálicos implicados en los procesos catalíticos para establecer los mecanismos de reacción y optimizar los resultados.

Catálisis Homogénea por Compuestos Organometálicos (IP: Luis A. Oro. Grupo Consolidado E07)

El objetivo general de la actividad de investigación del grupo es la preparación de nuevos catalizadores homogéneos de metales de transición y su aplicación a procesos de funcionalización de sustratos orgánicos. El diseño y optimización de nuevos catalizadores mono- y bimetálicos se basa en el diseño de ligandos, en estudios mecanísticos tanto en reacciones estequiométricas como catalíticas y en la determinación de las relaciones estructura-actividad utilizando modelos teóricos.

Las aplicaciones catalíticas que en el grupo de investigación reciben una atención preferente en la actualidad son: (a) funcionalización de hidrocarburos a través de reacciones de activación C-H, (b) activación y funcionalización de CO_2 y NH_3 , (c) hidrogenación y transferencia de hidrógeno, (d) funcionalización de sustratos insaturados: hidroaminación, hidrosililación, hidrotiolación, y (e) polimerización de alquinos y olefinas. La mayor parte de las aplicaciones objeto de estudio tienen un elevado potencial desde el punto de vista industrial y además, permiten abordar problemas conceptuales o mecanísticos de gran interés en ciencia básica. La actividad del grupo se articula en las siguientes líneas de investigación.

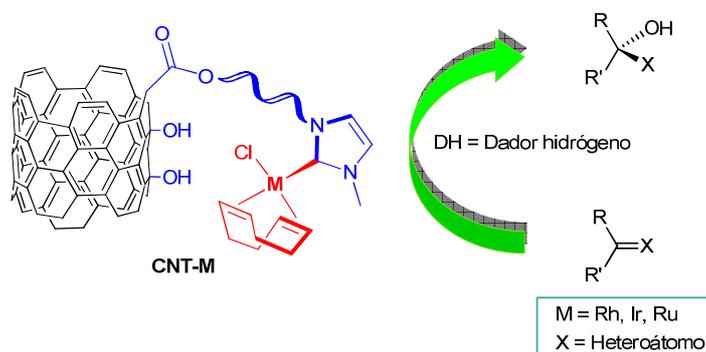
- 1.- Complejos organometálicos con ligandos heteroditópicos
- 2.- Hidrosilanos como fuente de hidrógeno en procesos catalíticos
- 3.- Adición regioselectiva de enlaces X-H a enlaces carbono-carbono insaturados
- 4.- Ligandos NHC en catálisis homogénea
- 5.- Activación y funcionalización catalítica de amoníaco
- 6.- Metalaboranos en catálisis homogénea
- 7.- Funcionalización de hidrocarburos a través de reacciones de activación C-H
- 8.- Biomoléculas modificadas: propiedades y aplicaciones en catálisis

Línea de trabajo 1: Complejos organometálicos con ligandos heteroditópicos. Soporte de catalizadores en superficies de carbono

Investigadora responsable: Dra. M. Victoria Jiménez

La investigación está enfocada a la síntesis de ligandos de naturaleza heteroditópica con potencial comportamiento hemilábil así como a la preparación de complejos de rodio/iridio/rutenio y al estudio de sus posibles aplicaciones en la catálisis homogénea. En este contexto, se están desarrollando sistemas catalíticos organometálicos basados en ligandos fosfina/carbeno N-heterocíclico funcionalizados. Algunos de los procesos catalíticos estudiados

como hidroaminación, polimerización, transferencia de hidrógeno ó hidrosililación permiten preparar productos de valor añadido como enaminas, polímeros o vinilsilanos, entre otros, como consecuencia de la formación de nuevos enlaces C-N, C-C ó C-Si. Por otro lado, la reutilización de los catalizadores, sin pérdida de actividad y selectividad, permite la separación de los mismos del medio de reacción reduciendo al mínimo los costes y residuos. Un puente de la catálisis homogénea a la catálisis heterogénea, que en parte resuelve el hándicap de la imposibilidad de la recuperación en los primeros, es la heterogeneización de los catalizadores en nuevos materiales que además de solucionar el problema del reciclado tal vez se refuerce la actividad y selectividad del sistema catalítico. Además, se están realizando estudios mecanicistas para determinar el papel de los ligandos hemilábiles en las transformaciones catalíticas.

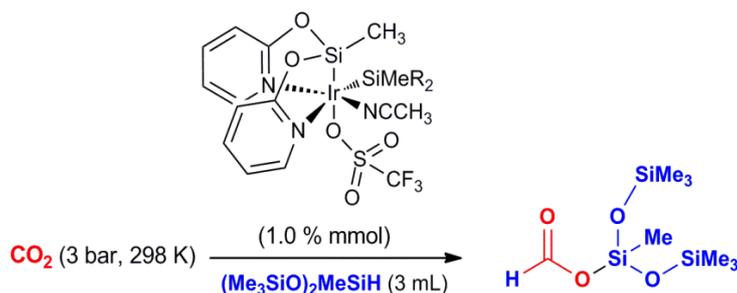


Catalizadores soportados en transferencia de hidrógeno

Línea de trabajo 2: Hidrosilanos como fuente de hidrógeno en procesos catalíticos

Investigador responsable: Dr. Francisco José Fernández

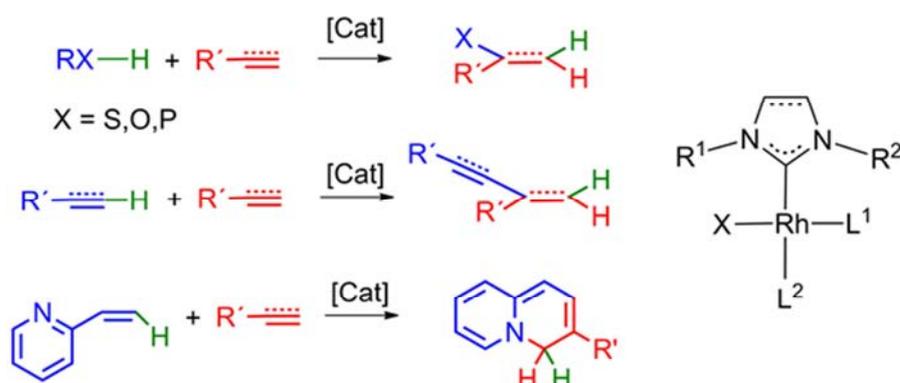
El almacenamiento de energía renovable en enlaces químicos E-H para su posterior activación y producción de hidrógeno cuando sea necesario se está convirtiendo en una metodología prometedora para el almacenamiento sostenible/liberación de hidrógeno. Se conocen diversas sustancias como, por ejemplo, amoníaco y productos químicos relacionados, organosilanos, ácido fórmico y heterociclos orgánicos que han sido explorados como almacenes moleculares de hidrógeno. Los hidrosilanos destacan entre todos ellos por varias razones, como por ejemplo, son de fácil almacenamiento, son estables, suelen ser líquidos de fácil manipulación y los procesos de activación de enlaces Si-H son termodinámicamente favorables. Esta línea de investigación pretende el estudio de la aplicación de complejos de metales de transición de los grupos 8 y 9 en procesos catalíticos que empleen hidrosilanos como fuente de hidrógeno. Los procesos catalíticos objeto de estudio son: i) hidrosililación de aldehídos, cetonas y CO₂ y sus posibles aplicaciones, ii) generación de hidrogeno y silanoles mediante hidrolisis de enlaces Si-H, iii) dehalogenación de moléculas orgánicas.



Línea de trabajo 3: Adición regioselectiva de enlaces X-H a enlaces carbono-carbono insaturados mediante catalizadores organometálicos

Investigador responsable: Dr. Ricardo Castarlenas

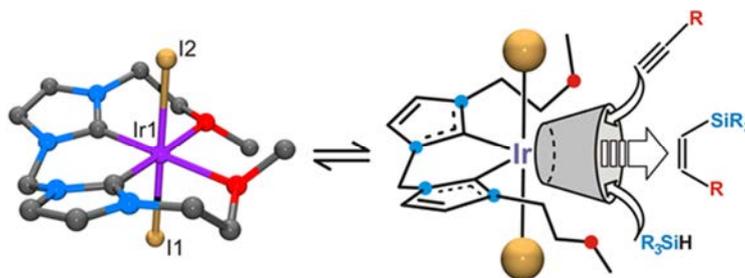
La línea de investigación pretende controlar la funcionalización de moléculas orgánicas de forma selectiva utilizando catalizadores de rodio con ligandos carbeno N-heterocíclicos (NHC). El estudio en profundidad de los mecanismos de reacción implicados orienta la modificación controlada de los ligandos NHC que en definitiva son los que permiten la estabilización de especies intermedias organometálicas fundamentales en dichos procesos catalíticos. Las reacciones catalíticas objeto de estudio son la hidrotiolación, hidrofosfinación y dimerización de alquinos, y la síntesis de N-heterocíclos mediante reacciones de acoplamiento carbono-carbono y carbono-heteroátomo.



Línea de trabajo 4: Ligandos NHC en catálisis homogénea

Investigador responsable: Dr Manuel Iglesias

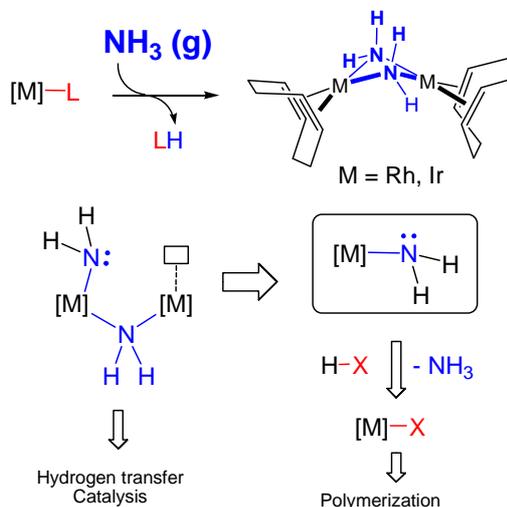
El objetivo de la investigación es explotar el potencial de ligandos tipo carbeno N-heterocíclico (NHC) en catálisis homogénea. Más concretamente, la estrategia se basa en tres etapas: (i) el desarrollo de nuevas arquitecturas moleculares basadas en ligandos NHC, (ii) la síntesis y caracterización de sus complejos de coordinación, (iii) la aplicación de estos en la funcionalización de moléculas orgánicas sencillas. En este contexto se está trabajando en la aplicación de complejos de Ir(III) y Rh(III) con ligandos quelato bis-NHC en la hidrosililación selectiva de alquinos terminales.



Línea de trabajo 5: Activación y funcionalización catalítica de amoníaco: Reactividad de *parent-amido* complejos

Investigador responsable: Dr. Miguel Angel Casado

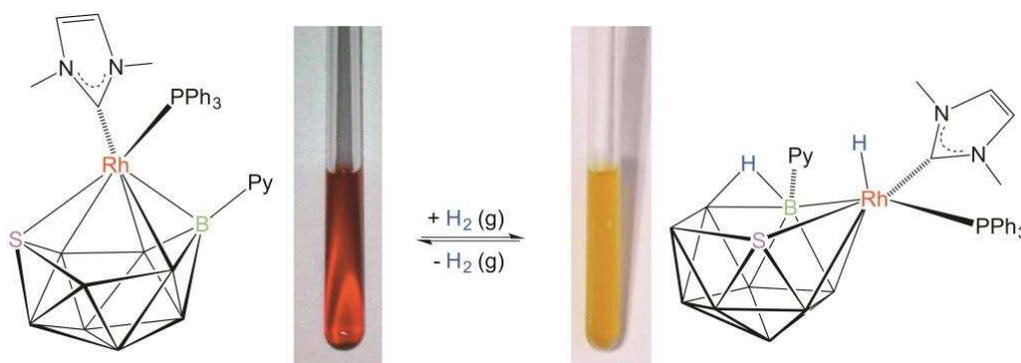
La meta final de esta nueva línea de investigación es el desarrollo de nuevos precursores organometálicos del grupo 8 capaces de utilizar amoníaco (NH_3) como sustrato en transformaciones catalíticas (hidroaminación, acoplamiento C–N, aminación de alcoholes, adiciones de Michael, etc.) que generen productos orgánicos de valor añadido. La estrategia elegida se basa en la formación de especies *parent-amido* (M–NH_2) por reacción directa con NH_3 a través de un protocolo de activación N–H bien establecido en nuestros laboratorios. Esta nueva vía de reactividad de NH_3 está permitiendo estudiar tanto su reactividad (en gran parte desconocida debido a la dificultad para preparar este tipo de complejos) como su actividad catalítica, en la que pueden ser operativos mecanismos de esfera externa debido a la no-inocencia de los fragmentos $-\text{NH}_2$.



Línea de trabajo 6: Metalaboranos en catálisis homogénea

Investigador responsable: Dr. Ramón Macías

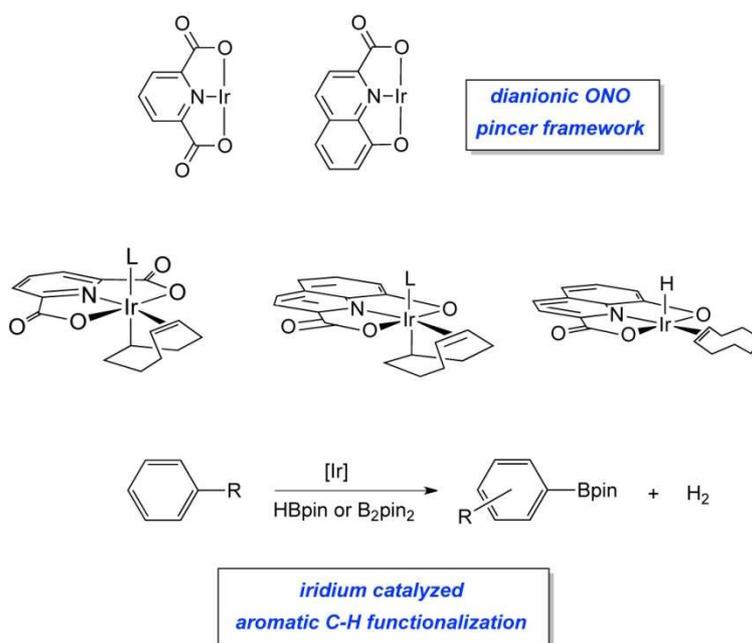
El objetivo general dentro de esta línea de investigación está relacionado con el potencial de compuestos poliédricos de elementos de las series de transición para actuar como catalizadores en una variedad de procesos homogéneos. Para la consecución de esta meta es preciso el diseño de clústers que incorporen diferentes centros metálicos con ligandos lábiles que faciliten la coordinación y activación de moléculas pequeñas, como por ejemplo, H_2 , CO , C_2H_4 y CO_2 . En concreto, se están realizando estudios de modificación sistemática de ligandos en el hidruro de rodatioborano $[(\text{PPh}_3)_2(\text{H})\text{-nido-RhSB}_9\text{H}_9(\text{NC}_5\text{H}_5)]$. Protonación de los clusters y utilización de ligandos carbeno han permitido optimizar la actividad de estos sistemas en activación de hidrógeno e hidrogenación de olefinas.



Línea de trabajo 7: Funcionalización de hidrocarburos a través de reacciones de activación C-H

Investigador responsable: Dr. Jesús J. Pérez-Torrente

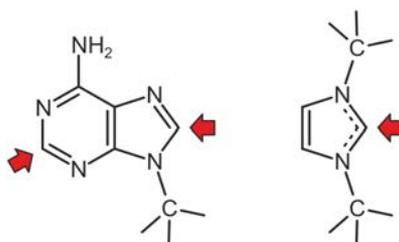
Los ligandos polidentados permiten controlar la geometría y estereoquímica de compuestos de coordinación y organometálicos de metales de transición. En este sentido, los ligandos tridentados de tipo pincer proporcionan a los complejos un adecuado balance de estabilidad y reactividad que ha permitido el diseño de catalizadores eficientes para un buen número de transformaciones. Los ligandos pincer de tipo ONO han sido relativamente poco estudiados en comparación con otras combinaciones de átomos dadores. Hemos establecido una metodología sintética que permite la preparación de compuestos de iridio(III) insaturados con este tipo de ligandos. Una primera aplicación de estos compuestos es la funcionalización de compuestos aromáticos mediante activación C-H (borilación). Adicionalmente, se están desarrollando la preparación de precursores con ligandos relacionados de tipo escorpionato.



Línea de trabajo 8: Biomoléculas modificadas: propiedades y aplicaciones en catálisis

Investigador responsable: Investigador: Dr. Pablo Sanz

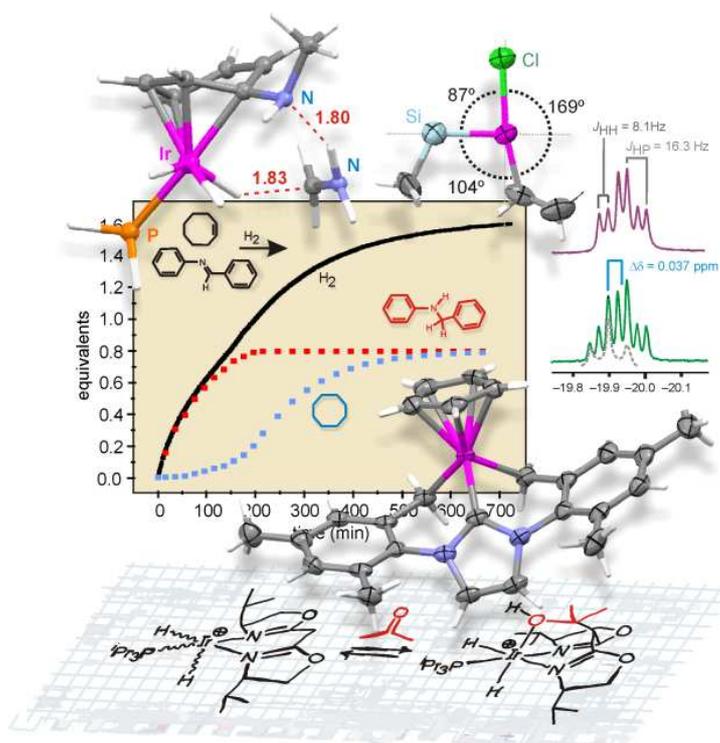
La línea de trabajo persigue estudiar propiedades generales de algunas moléculas biológicas. Pretendemos demostrar que estas pueden ser utilizadas como ligandos metálicos en procesos catalíticos tanto en medios biológicos como fuera de ellos. Desarrollamos varias aproximaciones bioinspiradas para mejorar rendimientos en transformaciones conocidas y en el diseño de otras novedosas. Actualmente exploramos las nucleobases funcionalizadas y otros ligandos simplificados del tipo carbeno N-heterocíclico.



Catalizadores y Mecanismos (IP: Eduardo Sola)

El grupo trabaja bajo la hipótesis de que la investigación detallada de los mecanismos de ruptura y formación de enlaces sobre complejos metálicos puede aportar observaciones y conclusiones que inspiren el diseño racional de mejores catalizadores y/o mejores secuencias catalíticas de síntesis.

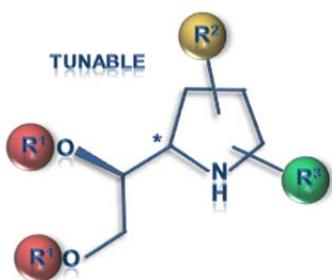
El grupo realiza minuciosos estudios estructurales, termodinámicos y cinéticos en el ámbito de la reactividad de complejos de coordinación insaturados y pequeñas moléculas potencialmente relevantes en procesos catalíticos. Los procesos catalíticos objetivo de los proyectos actuales son la funcionalización de enlaces C-H y la oxidación de agua. El grupo también dedica parte de su actividad al diseño y síntesis de nuevos complejos, preferentemente de rutenio e iridio. Por lo general, esta actividad sintética intenta involucrar ligandos que puedan aportar a la reactividad contribuciones funcionales más allá de la mera contribución estéreo-electrónica.



Compuestos Enantiopuros y Procesos Sostenibles – CEPS (IP: M^a Dolores Díaz de Villegas; Grupo emergente E102)

La importancia que la quiralidad tiene en muchos y variados aspectos de nuestro entorno es algo que hoy en día no tiene discusión. La catálisis es una de las estrategias más efectivas para la síntesis de compuestos enantioméricamente puros en gran cantidad y dado que cada vez se está prestando una mayor atención a la protección del entorno y del ser humano, el diseño de nuevos procesos dirigidos a reducir o eliminar el uso y generación de sustancias nocivas posee un especial interés. El grupo de investigación centra su actividad en la preparación de compuestos enantioméricamente puros utilizando para ello estrategias que tengan el menor impacto posible sobre el medioambiente. Para lograrlo se incide fundamentalmente en el desarrollo de nuevos catalizadores quirales respetuosos con el medio ambiente y la aplicación de este tipo de catalizadores en la síntesis de compuestos enantioméricamente puros con una estructura definida concretándose nuestros intereses en los siguientes puntos:

Línea de trabajo 1: Síntesis de nuevos organocatalizadores con estructura de pirrolidina



La prolina es un aminoácido natural que ha demostrado sobradamente su tremenda eficacia como organocatalizador. No obstante en algunos casos es posible mejorar los resultados obtenidos con este aminoácido utilizando compuestos adecuadamente modificados. La utilización de derivados de tipo pirrolidina con grupos voluminosos en posición alfa ha resultado ser muy efectiva en reacciones que van desde la simple formación del enlace C-C a procesos en cascada, lográndose mejores resultados con este tipo de sistemas. Por ello uno de los objetivos del grupo de investigación es la preparación de nuevos organocatalizadores con estructura de pirrolidina

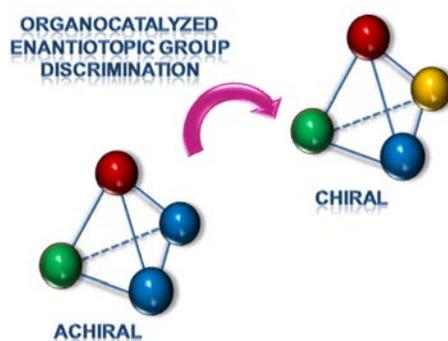
adecuadamente modificados en la posición 2 o en las posiciones 2 y 5 de modo que proporcionen entornos con una elevada diferencia estérica en la aproximación del electrófilo o el nucleófilo por una u otra cara proquiral del intermedio enamina o iminio. Así mismo se pretende que posean una estructura adecuada para ser utilizados en procesos que transcurran en agua como medio de reacción.

Línea de trabajo 2: Síntesis de nuevos organocatalizadores para la α -heterofuncionalización de compuestos carbonílicos

La introducción de un heteroátomo en posición alfa de un compuesto carbonílico de modo enantioselectivo es un proceso que posee sumo valor sintético ya que proporciona acceso a intermedios tremendamente versátiles que pueden utilizarse como precursores de productos farmacéuticos. En este contexto la utilización de la organocatálisis asimétrica como estrategia para llevar a cabo esta reacción está adquiriendo una gran relevancia y aunque se han logrado éxitos destacables con algunos sustratos y electrófilos aún existen algunas limitaciones relacionadas con la falta de reactividad y enantioselectividad para otros sustratos y electrófilos. Otro de los objetivos que se persiguen es la preparación de nuevos organocatalizadores modulares capaces de promover la α -heterofuncionalización de compuestos carbonílicos y cuya estructura pueda modificarse adecuadamente para lograr buenos resultados utilizando una menor carga de catalizador y favoreciendo la recuperabilidad del mismo.

Línea de trabajo 3: Aplicación de la organocatálisis en la desimetrización de compuestos *meso*

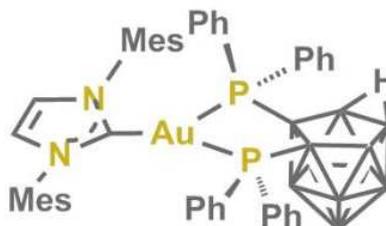
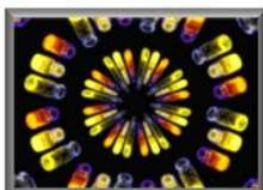
La utilización de la organocatálisis en reacciones enantioselectivas basadas en la discriminación entre grupos (grupos enantiotópicos) como alternativa a los tradicionales procesos enzimáticos es un área de investigación apenas explorada que últimamente ha comenzado a desarrollarse. Esta alternativa ofrece interesantes ventajas en diferentes aspectos entre los que cabe destacar que los organocatalizadores poseen una mayor estabilidad, permiten ampliar el tipo de sustratos a desimetrizar e introducir modificaciones en los mismos, y permiten acceder a compuestos de configuraciones opuestas. En este contexto como objetivo de investigación se pretenden poner a punto nuevos procesos organocatalizados para la desimetrización de compuestos *meso* prestando una especial atención a aquellos que den lugar a intermedios versátiles para la síntesis de productos quirales de alto valor añadido (anhídridos, dioles, epóxidos o aziridinas).



Química de Oro y Plata (IP: Antonio Laguna; Grupo Consolidado E77)



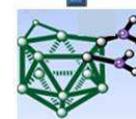
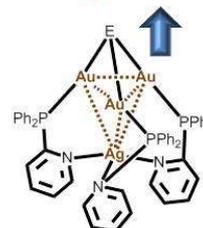
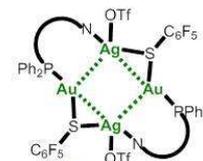
El interés del grupo se centra en el diseño y estudio de las propiedades luminiscentes y/o biológicas de nuevos compuestos metálicos del grupo 11 con el objetivo de obtener novedosos sensores, OLEDs, marcadores biológicos, agentes de contraste y/o compuestos con posible actividad bactericida, antitumoral o anti-VIH.



Para ello llevamos a cabo una investigación coordinada basada en las siguientes líneas:

Línea de trabajo 1: Compuestos emisores de luz

La búsqueda de interacciones metálicas: La presencia de interacciones metálicas favorece transiciones que dan lugar a emisiones de luz. La aurofilia es un fenómeno conocido y estudiado desde hace ya tiempo que provoca que derivados mononucleares de oro den lugar a agregados bi- y tri-dimensionales a través de interacciones intermoleculares no soportadas. El uso de ligandos homo- o hetero-polidentados puede forzar o favorecer la presencia de interacciones soportadas. Por todo esto, uno de nuestros objetivos es la síntesis de derivados polinucleares de oro o de oro con otros metales que puedan presentar interacciones homo- y/o hetero-metálicas. Esto significaría una manera de modular las propiedades emisoras de estos compuestos. En ocasiones las interacciones metálicas son el origen de la emisión, pero otras veces la elección de los ligandos resulta ser clave ya que las transiciones de carga entre dichos ligandos y orbitales centrados en varios centros metálicos pueden ser el origen de la luminiscencia.

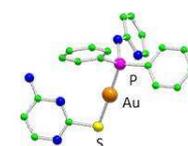
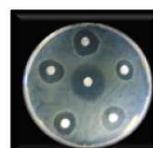
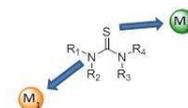
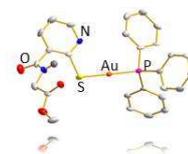


El uso de fluoróforos: La funcionalización y coordinación de metales a diferentes especies emisoras (fluoróforos), como especies aromáticas, que incluyen carboranos, de los que se ha mencionado su "aromaticidad en tres dimensiones" permiten modificar la energía e intensidad de las emisiones propias de dichos fluoróforos. De esta forma se construyen sistemas modulables en los que cambios en los sustituyentes o en el metal llevan al color deseado.

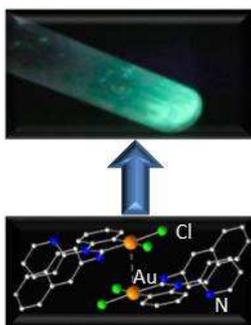
Línea de trabajo 2: Compuestos con propiedades biológicas

Aminoácidos y péptidos: Es conocido el efecto antiartrítico del Auranofin, un derivado tiolato de Au(I), y de muchos otros derivados tiolatos de bases de DNA con actividad antitumoral como la tiopurina y la tioguanina. Por otro lado es interesante señalar la importancia que poseen los aminoácidos a la hora del transporte de fármacos en células cancerígenas, al poseer éstas un porcentaje de receptores de aminoácidos superior a las células sanas. Por todo ello, el desarrollo de compuestos tiolatos de oro conteniendo aminoácidos o péptidos resulta muy atractivo para profundizar tanto en el campo de agentes antitumorales como en el área de transportadores de fármacos en células cancerígenas.

Tioureas: Los derivados de tioureas son ligandos muy versátiles que poseen una gran capacidad de coordinarse a distintos metales (Ni, Fe, Cu, Zn, Co, Cd, Pb) como ligandos neutros, mono-aniónicos o di-aniónicos. Esta capacidad coordinadora es clave para que puedan ser utilizados como captadores de metales pesados y así contribuir a minimizar la contaminación ambiental de muchos procesos industriales. En un campo más biológico se ha demostrado que tanto este tipo de ligandos como algunos de sus complejos derivados son biológicamente activos como bactericidas, fungicidas, herbicidas, etc. Además, su gran afinidad por metales esenciales abre una puerta para intentar elucidar el papel que juegan estos metales en los sistemas biológicos.



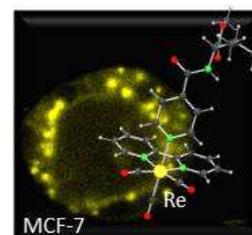
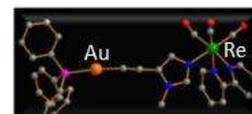
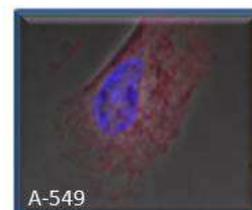
Línea de trabajo 3: Compuestos de Au(III) ortometalados y funcionalizados



El gran interés despertado por la química de los ciclotmetalados de Au(III) es en gran parte debido a la variedad de sus potenciales aplicaciones. Entre sus propiedades podemos encontrar que algunos compuestos poseen actividad citotóxica, otros tienen unas propiedades ópticas formidables e incluso pueden presentar actividad catalítica en diversos procesos, con lo que su importancia en el campo de medicina, materiales y catálisis es evidente. Por ello, ahondar en su estudio es una tarea necesaria en la sociedad actual.

Línea de trabajo 4: Compuestos con aplicaciones en imagen

Dentro del campo de diagnóstico en medicina, los compuestos luminiscentes de metales de transición d^6 , Re(I), Ru(II) e Ir(III) han surgido como los grandes competidores de los tradicionales tintes en visualización celular. Además de poseer unas propiedades luminiscentes admirables tiene la versatilidad de ser fácilmente modificables gracias a la conjugación de biomoléculas y así lograr una localización celular específica. Del mismo modo, estudios realizados también ponen de manifiesto el poder antitumoral de este tipo de especies metálicas, como es el caso del NAMI-A y KP1019, e invita a continuar su desarrollo para conseguir fármacos que sean más activos, selectivos y que posean menos efectos secundarios que los que se utilizan hoy en día.



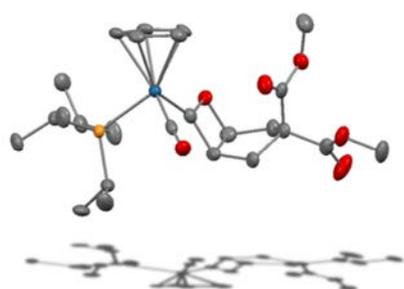
Organometálicos y Catálisis (IP: Miguel Angel Esteruelas; Grupo Consolidado E35)

El grupo Organometálicos y Catálisis pretende diseñar unidades metálicas, catalizadores, para el desarrollo de tecnologías basadas en el hidrógeno -incluyendo producción y almacenamiento- así como para procesos de síntesis orgánica más eficientes.

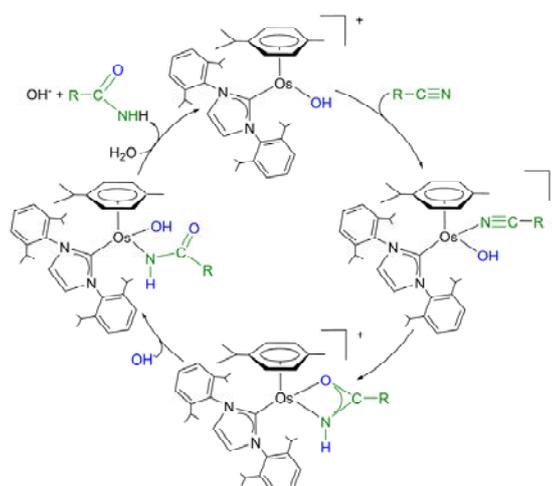
Los objetivos específicos del grupo Organometálicos y Catálisis son:

- i) Diseñar complejos de metales de transición eficientes en la ruptura inducida por la luz solar de la molécula de H_2O , para dar H_2 y O_2 .
- ii) Diseñar catalizadores eficientes en la hidrogenación de compuestos aromáticos.
- iii) Diseñar catalizadores eficientes en la deshidrogenación de hidrocarburos cíclicos bajo condiciones suaves.
- iv) Diseñar catalizadores eficientes en la deshidrogenación de aminoboranos a temperatura ambiente.
- v) Diseñar procesos y catalizadores eficientes en la funcionalización selectiva de moléculas orgánicas.

El diseño se lleva a cabo mediante un procedimiento sincronizado de múltiples etapas simultáneas. Las etapas implican trabajo tanto en programas estequiométricos como catalíticos. Entre los estudios estequiométricos se incluye la preparación de nuevos ligandos, que son utilizados para la síntesis de nuevos complejos. Las reacciones clave para cada proceso de interés se estudian con los nuevos complejos metálicos. Así, se llevan a cabo reacciones de activación de enlaces H-OH, H-H, H-C y H-B, entre otros, y de acoplamiento C-C y C-heteroátomo. De acuerdo con los resultados de las reacciones de activación de enlaces se evalúa la actividad catalítica de especies metálicas seleccionadas en la ruptura inducida por luz de la molécula de agua en hidrógeno y oxígeno, la hidrogenación de compuestos aromáticos, la deshidrogenación de hidrocarburos cíclicos y la deshidrogenación de aminoboranos. Aquellos compuestos candidatos a ser utilizados como catalizadores en la funcionalización de moléculas orgánicas se seleccionan de entre los complejos capaces de promover tanto reacciones de activación como de formación de enlaces. Sobre la base de estudios cinéticos, espectroscópicos y cálculos teóricos se establecen ciclos catalíticos. Los precursores metálicos con mejores perspectivas se ensayan en procesos que implican sustancias químicas relevantes, con el fin de obtener productos de alto valor añadido de forma práctica y rápida.



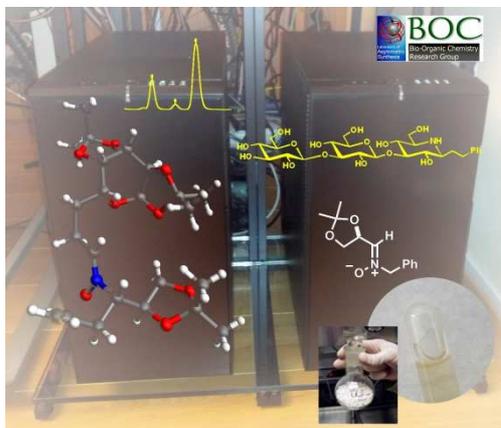
Primer complejo oxetilideno de metales de transición



Mecanismo de la reacción de hidratación de nitrilos catalizada por el complejo $[Os(OH)(\eta^6\text{-}p\text{-cimeno})(IPr)]OTf$

Química Bioorgánica (IP: Pedro Merino; Grupo Consolidado E10)

El grupo de Química BioOrgánica (<http://www.bioorganica.es>) centra su actividad investigadora, desde hace veinte años, en el desarrollo de nuevas metodologías de producción a escala de laboratorio de compuestos biológicamente activos que permitan resolver problemas de interés biomédico.



El objetivo preferente de nuestro grupo consiste, por lo tanto, en la preparación eficiente y selectiva, mediante procesos de Síntesis Química, de diversas biomoléculas para su posterior evaluación biológica. Las biomoléculas objeto de interés en nuestro grupo son nucleósidos, carbohidratos y aminoácidos, así como nuevas estructuras moleculares análogas, diseñadas en nuestro laboratorio.

Para llevar a cabo la síntesis de las moléculas objetivo mencionadas anteriormente, nuestro grupo basa gran parte de su actividad en el estudio de diversas reacciones orgánicas sobre grupos funcionales que permitan determinadas elaboraciones posteriores. En concreto, se estudian procesos de adición nucleófila a sistemas insaturados de tipo $C=X$, entre los que se pueden incluir carbonilos, nitronas, hidrazonas e iminas. También se estudian procesos de cicloadición que por sus particulares características son enormemente útiles en la creación de determinados tipos de compuestos cíclicos. En todos estos procesos se estudia no sólo la selectividad y eficiencia de los mismos sino la pureza enantiomérica con la que se pueden obtener, ya que en todos los casos se trata de moléculas ópticamente activas con conocida o potencial actividad biológica.

La metodología empleada en el estudio de dichas reacciones químicas implica la utilización y puesta a punto de nuevos métodos de síntesis que, además de aumentar la eficiencia de los procesos, contribuyan al empleo de condiciones no contaminantes y que pueden incluirse dentro de la denominada Química Verde. En particular, el trabajo sintético se centra principalmente en procesos catalíticos que permitan aumentar la eficiencia de las metodologías disponibles. Estos trabajos se dirigen a la búsqueda tanto de nuevos procesos catalíticos como de nuevos catalizadores más efectivos. En este contexto, se estudia la aplicabilidad tanto de catalizadores basados en metales como de organocatalizadores, en ambos casos dirigidos hacia procesos de catálisis asimétrica.

La investigación del grupo comprende también el estudio estructural de las biomoléculas sintetizadas y sus interacciones con el sistema biológico sobre el que se pretende actuar. Esta investigación comprende tanto el estudio de la actividad biológica como el análisis de interacciones proteína-ligando, en el caso de querer actuar sobre enzimas relacionados con determinadas patologías tales como cáncer, infecciones fúngicas o procesos autoinmunes.

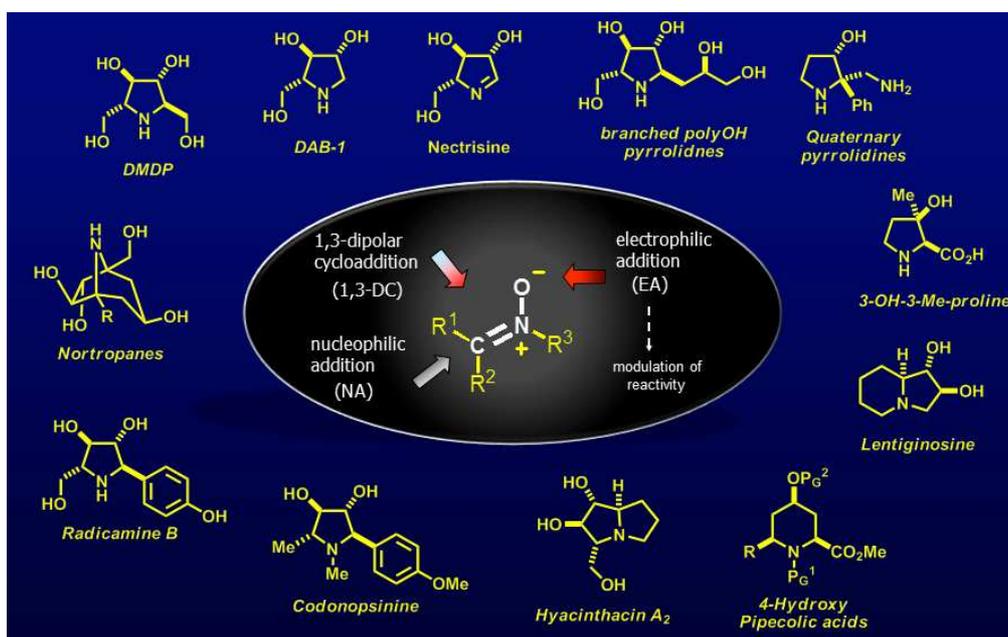
Línea de trabajo 1: Síntesis asimétrica de compuestos de interés biológico

La adición de sistemas nucleófilos a sistemas insaturados es un método excelente de crear enlaces carbono-carbono, una operación fundamental en cualquier proceso de síntesis. En particular, cuando la adición se hace sobre un sistema $C=N$ y se consigue realizar induciendo asimetría en la reacción, se consigue la instalación estereoselectiva de una función nitrogenada sobre un centro de carbono saturado. Dado que la introducción selectiva de un átomo de nitrógeno es a menudo una etapa clave en la síntesis de moléculas bioactivas tales como aminoácidos, aminoazúcares, o alcaloides el desarrollo de estas metodologías de adición adquiere una gran importancia ya que representa el paso clave, en muchos casos, en la síntesis de intermedios clave para la obtención final de moléculas bioactivas. Mediante esta

línea nuestro grupo pretende desarrollar procesos de síntesis altamente eficientes que permitan la preparación de nuevos compuestos como aminoácidos, carbohidratos y principalmente análogos de nucleósidos que puedan emplearse para posteriores ensayos biológicos.

Para lograr la síntesis de las moléculas propuestas se estudian, por una parte, estrategias que utilizan sustratos quirales fácilmente accesibles como materiales de partida y, por otra, aquellas que permitan el empleo de sistemas catalíticos quirales que incluyan organocatalizadores y catalizadores metálicos.

Las diversas técnicas de síntesis se aplican a la síntesis de pequeñas moléculas que puedan actuar como glicomiméticos frente a determinados enzimas tales como glicosidasas, transglicosilasas y glicosiltransferasas.

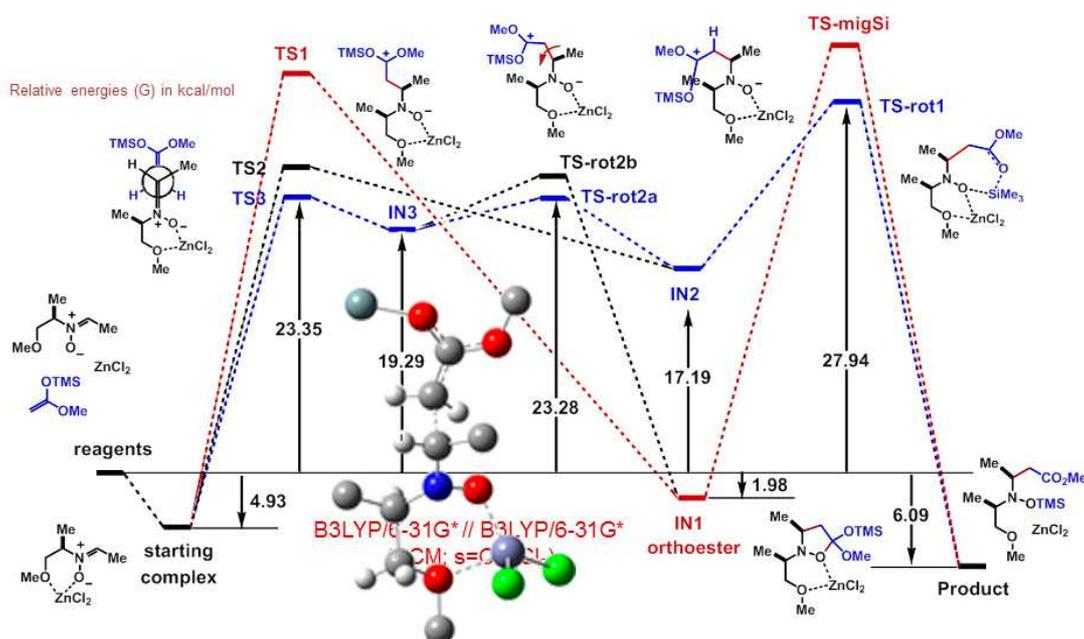


Línea de trabajo 2. Estudio teórico de reacciones orgánicas

Las reacciones empleadas en cualquier proceso de síntesis transcurren a través de mecanismos cuyo conocimiento en profundidad podría permitir la predicción de los productos a obtener o, cuando menos, aproximarse hacia la viabilidad del proceso en cuestión.

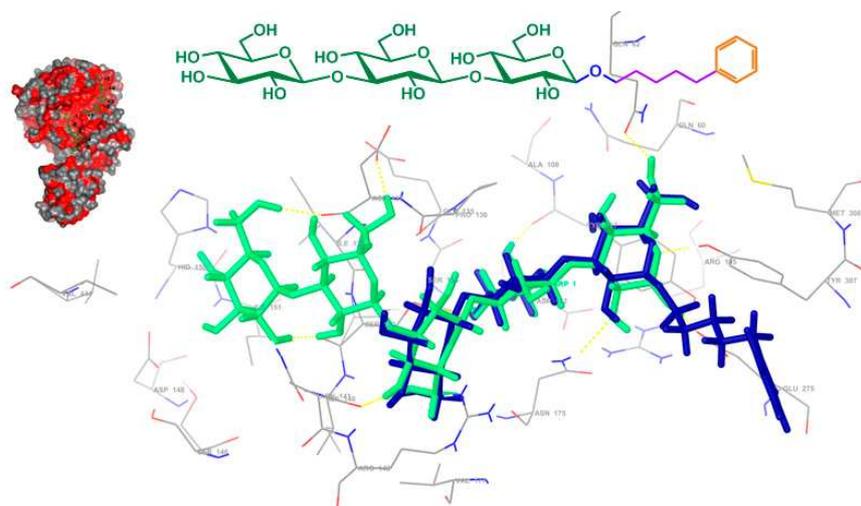
El grupo de investigación tiene acceso a potentes herramientas de cálculo a las que someter los problemas del laboratorio y evaluar computacionalmente los resultados obtenidos. Mediante esta línea de investigación nuestro grupo pretende, de una parte, modelizar las reacciones selectivas que llevamos a cabo para la síntesis de compuestos ópticamente activos y determinar cuáles son los factores que inducen una u otra selectividad diastereofacial. De otra parte, el estudio de la estructura de los productos finales podrá permitir valorar su adecuación como fármacos o agentes terapéuticos, mediante su comparación con otras estructuras ya conocidas, sean o no naturales.

Asimismo, cuando se estudian procesos catalíticos, la modelización por ordenador de los mismos permitirá establecer las estructuras más adecuadas de los diversos catalizadores. En cualquiera de los procesos estudiados resulta crucial establecer el mecanismo real de la reacción. Mediante técnicas computacionales, es posible analizar las diversas rutas y establecer la más favorecida energéticamente para el transcurso de la reacción.



Línea de trabajo 3: Estudio de interacciones proteína – ligando

Un gran número de los compuestos estudiados en el Grupo de Química Bioorgánica se pretende que actúen como inhibidores y/o moduladores de enzimas relacionados con determinadas patologías que incluyen enfermedades autoinmunes, cáncer o infecciones fúngicas. Para establecer los modelos que operan en las interacciones con los enzimas objetivo es necesario analizar las interacciones proteína-ligando entre dicho enzima y el inhibidor/modulador. El estudio de dichas interacciones se lleva a cabo de forma computacional, a través de estudios de docking y dinámica molecular, y mediante técnicas espectroscópicas entre las que se incluyen estudios STD-NMR y cristalografía de rayos X.



Química Inorgánica y de los Compuestos Organometálicos (IP: José María Casas; Grupo Consolidado E21)

El objetivo principal del grupo de Química Inorgánica y de los Compuestos Organometálicos es ahondar en el conocimiento básico en Química Inorgánica y Organometálica, a través de la síntesis de nuevos complejos mono y polinucleares, cuya caracterización pueda presentar nuevas situaciones estructurales y/o de enlace que están ligadas a determinadas propiedades. Ese objetivo de crear Ciencia Básica durante más de veinte años, persiguiendo la creación de nuevo conocimiento, ha dado lugar a la publicación de más de 350 artículos en revistas del máximo prestigio internacional. Además, la pertenencia al grupo de especialistas tanto en tareas de síntesis como en el manejo de grandes infraestructuras para la caracterización estructural nos confiere una amplia capacidad para la formación de científicos ya que consideramos que la realización de ciencia de excelencia es el mejor modo de formar científicos y técnicos de calidad. El conocimiento adquirido por el grupo a través de la experimentación nos ha permitido orientar el desarrollo de su trabajo hacia zonas en las que la síntesis de compuestos suponga un valor añadido por su posible utilidad. Así, algunas líneas de investigación están encaminadas a la preparación de compuestos con propiedades ópticas y eléctricas interesantes; especies polinucleares con propiedades cooperativas acentuadas por los centros metálicos o por otras interacciones débiles, aplicaciones catalíticas de algunos de los compuestos, o posibles aplicaciones terapéuticas, etc.

Las líneas de investigación definidas actualmente por el Grupo son las siguientes:

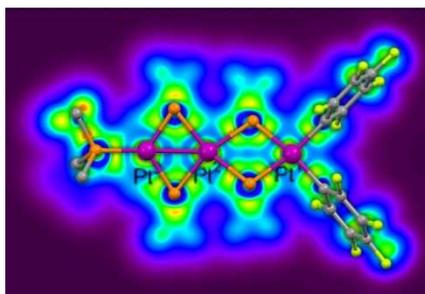
Línea de trabajo 1: Síntesis, caracterización y estudio de las propiedades fotofísicas de compuestos de platino(II) y/o paladio(II) luminiscentes. Estudio de las posibles aplicaciones.

Línea de trabajo 2: Preparación de trifluorometil derivados homolépticos de Ni, Pd y Pt y estudio de su reactividad.

Línea de trabajo 3: Preparación de complejos polinucleares de platino y o paladio en estado de oxidación II y en altos estados de oxidación, con ligandos E-dadores (E= N, P). Caracterización estructural y estudio de sus propiedades luminiscentes y redox.

Línea de trabajo 4: Síntesis de complejos de metales de los grupos 7-10 con actividad antitumoral y/o de interés en procesos biológicos o industriales.

Además, el Grupo de Química Inorgánica y de los Compuestos Organometálicos ha potenciado el acercamiento de nuestra investigación a empresas interesadas, del mismo modo que hemos sido receptivos a sus necesidades de asesoramiento y colaboración lo que se ha traducido en la realización de proyectos conjuntos con sociedades como: Industrias Químicas del Ebro (IQE) o Modisprem en Aragón, con NovoGenio en Cartagena, e incluso a nivel internacional con Promerus L.L.C. (Cleveland, Ohio) que es una filial en U.S.A de Sumitomo Bakelite en Japón, dando como resultado la publicación conjunta de resultados en revistas científicas internacionales, la solicitud de patentes y una importante transferencia de conocimiento hacia las empresas citadas.



Química Organometálica Aplicada (IP: Mariano Laguna; Grupo emergente E101)

El objetivo general del grupo es la síntesis y aplicaciones de elementos del grupo 11 y de los lantánidos. Diversas son las áreas en las que se buscan las aplicaciones de estos complejos metálicos:

1. Compuestos solubles en agua: se persigue la preparación de compuestos de coordinación solubles en agua que puedan tener distintas aplicaciones en el campo de propiedades biológicas, como anticancerígenos, incluyendo compuestos luminiscentes que permitan hacer un seguimiento del posible mecanismo de actuación. Otra característica importante es la posible actividad catalítica en agua de algunos de los complejos obtenidos.

2. Fabricación de materiales híbridos funcionales: la ablación laser de compuestos organometálicos adecuados del grupo 11 permite la obtención de espumas nanocompuestas de carbono/metal de gran interés en nanociencia y pueden tener interesantes implicaciones tecnológicas.

3. Estudio de complejos de lantánidos con terpiridinas: los complejos de lantánidos tienen unas propiedades luminiscentes singulares, como emisiones en frecuencias muy definidas y largos tiempos de vida media. El objetivo es la preparación de compuestos con polipiridinas y ligandos similares para estudiar las posibles aplicaciones de los compuestos obtenidos como sensores o para dispositivos electrónicos.



Apartado 3. Estructura de financiación

Ingresos 2012

Gobierno de Aragón

La financiación del Instituto para gasto corriente y de personal viene, por un lado, determinada por la subvención formulada al amparo del Decreto 160/2009, de 9 de septiembre, del Gobierno de Aragón por el que se establecen las bases reguladoras para la concesión de subvenciones a los **Institutos Universitarios de Investigación Mixtos** de la Universidad de Zaragoza.

La financiación basal proporcionada por el **Gobierno de Aragón** en 2012 para el IUCH (Instituto Universitario de Catálisis Homogénea) ascendió a **76.095,00 €**.

Universidad de Zaragoza

La financiación basal proporcionada por la **Universidad de Zaragoza**, mediante la retribución de personal propio, ascendió a **1.471.133,30 €**. Esta cantidad corresponde a las retribuciones básicas del personal docente-investigador de la Universidad de Zaragoza.

Además, los gastos de mantenimiento de los edificios son satisfechos por la Universidad de Zaragoza, y ello en cuanto la sede del ISQCH radica en la Facultad de Ciencias, sin que cuente en estos momentos con instalaciones propias.

Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

La financiación basal proporcionada por el **CSIC**, mediante la retribución del personal propio del **ISQCH**, ascendió a **1.231.900 €**.

Aquí también es preciso puntualizar que el **CEQMA** recibe del CSIC un importe para gastos de funcionamiento que en 2012 ascendió a **29.859,17 euros**. Este importe sostiene la gestión administrativa del ICMA y del ISQCH, así como los servicios científico-técnicos comunes a ambos Institutos.

La financiación basal correspondiente al personal de administración y técnico del CSIC destinado en el CEQMA asciende a **346.173,06 €**

Proyectos, convenios y contratos

Financiación obtenida en convocatorias de carácter público (concedidas en 2012):

Tipo de Proyecto	Gestión CSIC	Gestión UZ	Importe Total
Nacional	534.820,00 €	783.593,48 €	1.318.413,48 €
Regional	15.395,00 €	152.984,14 €	168.379,14 €
Otros proyectos	19.000,00 €	8.534,00 €	27.534,00 €

Financiación obtenida de contratos y convenios. El importe de cada uno de los proyectos con empresa es confidencial. En esta memoria se detalla sólo el importe global de los mismos.

Contrato / Convenio	Gestión CSIC	Gestión UZ	Importe Total
Contr. / Conv. empresas	4.401 €	509.306,82 €	513.707,82 €

Gastos 2012

El ISQCH es un Instituto Mixto y es preciso distinguir entre los gastos del Instituto gestionados por UZ y por CSIC.

Respecto de los gastos ejecutados a través de **UZ**, la distribución del gasto estimada es la siguiente:

Personal Contratado.....	745.969,63 €
Fungible	237.154,85 €
Viajes y Dietas	49.348,15 €
Gastos generales	1.014.482,19* €
Inventariable (equipos lab., informát., mobiliario, libros...)	171.947,95 €
Total	2.218.902,77 €

* Esta cantidad incluye los costes estimados por la UZ del funcionamiento del Instituto.

Y por lo que se refiere al gasto del ISQCH ejecutado por el **CSIC** (a través del Centro de Química y Materiales de Aragón, CEQMA, que es el Centro encargado de la gestión administrativa y económica del Instituto), responde al siguiente resumen:

Personal Contratado.....	327.217,91 €
Fungible	92.534,51 €
Viajes y Dietas	55.787,78 €
Gastos generales	57.893,14 €
Inventariable	88.702,66 €
Total	622.136,00 €



Apartado 4. Actividad Científica, Innovadora y Tecnológica

4.1. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Proyectos Europeos



Proyecto: Homogeneous supported catalysts technologies: the sustainable approach to highly-selective, fine chemicals production (NANO-HOST)

I.P.: Dr. Pierlugi Bárbaro (Dr. José María Fraile Dolado en el ISQCH)

Entidad financiadora: Marie Curie Initial Training Network (FP7-PEOPLE-2007-1-1-ITN, number 215193-2)

Fecha de inicio: 01/10/2008 **Fecha de fin:** 30/09/2012

Importe: 274.572 €

Proyecto: LIFE11 ENV/ES/560 CERAMGLASS

I.P.: Laguna Castrillo, Mariano

Entidad/es financiadora/s: Comunidad Económica Europea

Fecha de inicio: 01/06/2012 **Fecha de fin:** 31/06/2015

Importe: 180.000 €

Proyectos Nacionales



Proyecto: CSD2009-00050. Proyecto Consolider "Desarrollo de catalizadores más eficientes para el diseño de procesos químicos sostenibles y producción limpia de energía"

I.P.: Oro Giral, Luis Antonio

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 25/01/2010 **Fecha de fin:** 24/01/2015

Importe: 357.777,00 €

Proyecto: IPT-2011-1273-420000. Desarrollo estructuras multilámina de altas prestaciones mediante la combinación de láminas poliméricas técnicas y vítreas para transporte, seguridad y defensa

I.P.: Pelayo Zueco, Francisco Javier (Dr. Jose María Casas del Pozo en el ISQCH)

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/09/2011 **Fecha de fin:** 31/12/2014

Importe: 1.671.808,30 €

Proyecto: CTQ2011-22589. Organometálicos de metales de transición en la funcionalización de moléculas orgánicas de alto valor añadido y el diseño de nuevos materiales con propiedades de interés

I.P.: Urriolabeitia Arrondo, Esteban

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2014

Importe: 140.360,00 €

Proyecto: CTQ2011-22516. Estudios fundamentales sobre sistemas que involucran oxígeno, ligandos no-inocentes y materiales

I.P.: Tejel Altarriba, María Cristina

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2014

Importe: 238.370,00 €

Proyecto: CTQ2011-23459. Diseño de catalizadores para procesos medioambientalmente sostenibles

I.P.: Esteruelas Rodrigo, Miguel Angel

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2014

Importe: 353.000,00 €

Proyecto: CTQ2011-27593. Catálisis bio-inspirada basada en fragmentos de M-DNA y complejos soportados de M-HNcarbeno

I.P.: Sanz Miguel, Pablo José

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2014

Importe: 121.000,00 €

Proyecto: IPT-2011-0860-060000. Síntesis de derivados de cisteína de interés biológico y su nanoencapsulación mediante polímeros inteligentes

Entidad de realización: UZ / Axeb Biotech SL

I.P.: Cativiela Marín, Carlos (UZ) / Casals, Ricard (Axeb Biotech SL)

Entidad/es financiadora/s: MICINN (proyecto INNPACTO)

Fecha de inicio: 01/07/2011 **Fecha de fin:** 31/12/2014

Importe: 1.037.818 € (223.889 € para ISQCH)

Proyecto: CTQ2011-28124-C02-01. Mejora de actividad catalítica. Y selectividades mediante inmovilización y formación de estructuras metal-orgánicas

I.P.: Fraile Dolado, José María

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2014

Importe: 156.090,00 €

Proyecto: MAT2011-27233-C02-01. Preparación y caracterización de materiales moleculares magnéticos multi-funcionales con interés en espintrónica y energía

I.P.: Falvello, Lawrence Rocco (Dra. Milagros Tomás Lisbona en el ISQCH)

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2014

Importe: 140.496,00 €

Proyecto: PIE 201280E109. Reacciones de inserción de pequeñas moléculas en enlaces metal-silicio

I.P.: Sola Larraya, Eduardo

Entidad/es financiadora/s: CSIC

Fecha de inicio: 01/08/2012 **Fecha de fin:** 31/07/2014

Importe: 19.000,00 €

Proyecto: CTQ2008-06669-C02-01/BQU. Subproyecto.: Diseño de sistemas moleculares y supramoleculares de metales de transición. Estudio de sus propiedades y potenciales aplicaciones

I.P.: Forniés Gracia, Juan Octavio

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2009 **Fecha de fin:** 31/12/2013

Importe: 475.800,00 €

Proyecto: CTQ2010-15221. Síntesis. Reactividad y aplicación en catálisis de complejos de metales de transición con ligandos polidentados

I.P.: Pérez Torrente, Jesús Julián

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2011 **Fecha de fin:** 31/12/2013

Importe: 143.000,00 €

Proyecto: INNPACTO, IPT-310000-2010-21. Desarrollo de productos innovadores basados en peróxidos para aplicaciones medioambientales de alto valor añadido

I.P.: Mayoral Murillo, José Antonio

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/07/2010 **Fecha de fin:** 31/12/2013

Importe: 274.525,64 €

Proyecto: CTQ2010-19606-C02-01. Nuevas metodologías para la síntesis asimétrica de heterociclos nitrogenados enantiopuros con aplicación en la preparación de sistemas de interés biológico

I.P.: Merino Filella, Pedro

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2011 **Fecha de fin:** 31/12/2013

Importe: 139.000,00 €

Proyecto: CTQ2010-17436. Aminoácidos no proteicos destinados a estudios estructurales y aplicaciones biomédicas

I.P.: Cativiela Marín, Carlos

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2011 **Fecha de fin:** 31/12/2013

Importe: 198.440,00 €

Proyecto: CTQ2010-20500-C02-01. Diseño de compuestos del grupo 11 para aplicaciones ópticas, biológicas y catalíticas

I.P.: Gimeno Floría, M^a Concepción

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2011 **Fecha de fin:** 31/12/2013

Importe: 217.000,00 €

Proyecto: FCT-12-5402. Proyecto de divulgación científica CSI Zaragoza

I.P.: Angurel Lamban, Luis Alberto (Dr. Jose Ignacio García Laureiro en el ISQCH)

Entidad/es financiadora/s: Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología

Fecha de inicio: 01/09/2012 **Fecha de fin:** 31/03/2013

Importe: 7.000,00 €

Proyecto: PIE 201180E093. Catalizadores de oxidación de agua para la producción de hidrógeno

I.P.: Sola Larraya, Eduardo

Entidad/es financiadora/s: CSIC

Fecha de inicio: 01/09/2011 **Fecha de fin:** 31/08/2013

Importe: 47.087,00 €

Proyecto: CSD2007-00006 – ORFEO. Desarrollo de entidades organometálicas para reacciones de funcionalización selectiva en moléculas orgánicas

I.P.: Esteruelas Rodrigo, Miguel Angel

Entidad/es financiadora/s: MEC

Fecha de inicio: 01/10/2007 **Fecha de fin:** 31/07/2013

Importe: 4.350.000,00 €

Proyecto: CTQ2009-10303. Desarrollo y aplicación de nuevos compuestos quirales de metales de transición en catálisis asimétrica

I.P.: Carmona Gascón, José Daniel

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2010 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 215.000,00 €

Proyecto: CTQ2009-10132. Complejos iminosfosfonamido y modelos dinucleares en proliferación catalítica

I.P.: Macías Maza, Ramón

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/04/2010 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 100.000,00 €

Proyecto: CTQ2011-15889. E.V. International school on organometallic chemistry Marcial Moreno Mañas

I.P.: Esteruelas Rodrigo, Miguel Angel

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 3.000,00 €

Proyecto: 36-0735-09. Diseño, síntesis y estudio anti-HIV-1 de dominios peptídicos del GB virus C

I.P.: Haro Villar, Isabel (Dra. M.C. Gimeno Floría en ISQCH)

Entidad/es financiadora/s: Fundación FIPSE. ICMA. IQAC

Fecha de inicio: 01/01/2010 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 113.905 €

Proyecto: CTQ2009-08023. Ligandos y entornos de coordinación para la funcionalización de enlaces CH

I.P.: Sola Larraya, Eduardo

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/01/2010 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 75.000,00 €

Proyecto: CSIC10-4E-432. Adquisición sondas RMN (Proyectos de infraestructura científica y tecnológica. FEDER)

I.P.: Díaz de Villegas Soláns, María Dolores

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 01/01/2010 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 50.631 €+ (50.631 € cofinanciación)

Proyecto: CSD2006-00015. CONSOLIDER Factoría de cristalización

I.P.: García Ruiz, Juan Manuel (Dr. Fernando Lahoz Díaz en el ISQCH)

Entidad financiadora: MEC

Fecha de inicio: 07/12/2006 **Fecha de fin:** 06/12/2013

Importe subvención: 167.370,00 € en el ISQCH

Proyecto: RAMON Y CAJAL 2009. Dotación puesta en marcha

I.P.: Sanz Miguel, Pablo José

Entidad/es financiadora/s: MICINN

Fecha de inicio: 01/10/2010 **Fecha de fin:** 30/09/2012

Importe: 15.000,00 €

Proyecto: FCT-11-2698. Actividades de divulgación científica 2011-ucc-i

I.P.: Investigación, Vicerrectorado

Entidad/es financiadora/s: Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología

Fecha de inicio: 01/06/2011 **Fecha de fin:** 31/07/2012

Importe: 20.000,00 €

Proyecto: PIE 201080E110. Catalizadores de metátesis de olefinas basados en ligandos silicio dadores

I.P.: Sola Larraya, Eduardo

Entidad/es financiadora/s: CSIC

Fecha de inicio: 01/07/2010 **Fecha de fin:** 30/06/2012

Importe: 43.848,00 €

Proyecto: TRA2009-0125. Resoluciones cromatográficas y enzimáticas aplicadas a la síntesis de compuestos enantiopuros de interés farmacéutico

I.P.: Cativiela Marín, Carlos

Entidad/es financiadora/s: MICINN (proyecto TRACE)

Fecha de inicio: 01/03/2010 **Fecha de fin:** 29/02/2012

Importe: 117.370,00 €

Proyectos Autonómicos



Proyectos de Investigación

Proyecto: 2012/GA LC 057. Diseño de sistemas para la captura y transformación de dióxido de carbono

I.P.: Tejel Altarriba, María Cristina

Entidad/es financiadora/s: DGA-LA CAIXA

Fecha de inicio: 01/05/2012 **Fecha de fin:** 30/09/2013

Importe: 48.132,14 €

Proyecto: Síntesis, Caracterización y evaluación de nuevos acelerantes de fraguado para el hormigón proyectado libres de álcali. (Conv. Caixa 2010)

Ámbito del proyecto: Autonómico

I.P.: Elduque Palomo, Ana Isabel

Entidad/es financiadora/s: DGA

Fecha de inicio: 01/05/2010 **Fecha de fin:** 30/04/2012

Importe: 37.000,00 €

Proyecto: Diseño de nuevos catalizadores organometálicos basados en complejos de rodio con ligandos carbeno n-heterocíclico para la metátesis de olefinas y de alquín

I.P.: Castarlenas Chela, Ricardo

Entidad financiadora: DGA

Fecha de inicio: 01/01/2011 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe subvención: 30.000,00 €

Grupos Investigación DGA

Proyecto: Activación molecular a través de organometálicos. Grupo Consolidado E97

I.P.: Urriolabeitia Arrondo, Esteban P.

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 5.652,00 €

Proyecto: Aminoácidos y péptidos. Grupo Consolidado E40

I.P.: Cativiela Marín, Carlos

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 10.712,00 €

Proyecto: Arquitectura molecular inorgánica y aplicaciones (ARMOIN). Grupo Consolidado E70

I.P.: Tejel Altarriba, María Cristina

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 9.078,00 €

Proyecto: Catálisis heterogénea en síntesis orgánicas selectivas. Grupo Consolidado E11

I.P.: Mayoral Murillo, José Antonio

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 12.504,00 €

Proyecto: Catálisis homogénea enantioselectiva. Grupo Consolidado E63

I.P.: Carmona Gascón, José Daniel

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 8.486,00 €

Proyecto: Catálisis homogénea por compuestos organometálicos. Grupo Consolidado E07

I.P.: Oro Giral, Luis Antonio

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 21.988,00 €

Proyecto: Compuestos enantiopuros y procesos sostenibles. Grupo Emergente E102

I.P.: Díaz de Villegas Soláns, María Dolores

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 1.257,00 €

Proyecto: Organometálicos y catálisis. Grupo Consolidado E35

I.P.: Esteruelas Rodrigo, Miguel Angel

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 15.936,00 €

Proyecto: Química bioorgánica. Grupo Consolidado E10

I.P.: Merino Filella, Pedro

Entidad/es financiadora/s: D.G.A.

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 8.782,00 €

Proyecto: Química inorgánica y de los compuestos organometálicos. Grupo Consolidado E21

I.P.: Casas del Pozo, José María

Número de investigadores/as: 16

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 14.107,00 €

Proyecto: Química de oro y plata. Grupo Consolidado E77

I.P.: Laguna Castrillo, Antonio

Entidad/es financiadora/s: D.G.A.

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 8.624,00 €

Proyecto: Química organometálica aplicada. Grupo Emergente E101

I.P.: Laguna Castrillo, Mariano

Entidad/es financiadora/s: D.G.A.

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Importe: 3.121,00 €

Otros proyectos

Proyecto: 5ª Jornada de jóvenes investigadores (química y física) de Aragón

I.P.: Gimeno Floría, M^a Concepción

Entidad/es financiadora/s: Vicerrectorado de Investigación - Congresos

Fecha de inicio: 04/12/2012 **Fecha de fin:** 04/12/2013

Importe: 817,00 €

Proyecto: IX Simposio de investigadores jóvenes. RSEQ -SIGMA-ALDRICH

I.P.: Pérez Herrera, Raquel

Entidad/es financiadora/s: Vicerrectorado de Investigación - Congresos

Fecha de inicio: 07/11/2012 **Fecha de fin:** 10/11/2013

Importe: 817,00 €

Proyecto: V Edición Marcial Moreno Mañas: Fronteras en química organometálica

I.P.: Esteruelas Rodrigo, Miguel Angel

Entidad/es financiadora/s: Vicerrectorado de Investigación - Congresos

Fecha de inicio: 02/07/2011 **Fecha de fin:** 04/07/2012

Importe: 1.560,00 €

Proyectos Empresas

Proyecto: Nuevos procesos catalíticos aplicados a la obtención de peróxido de hidrógeno

I.P.: Mayoral Murillo, José Antonio

Entidad/es financiadora/s: FMC FORET, S.A.

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2014

Proyecto: Filtros inteligentes, con indicador de saturación basado en la utilización de sustancias vaporcromicas

I.P.: Laguna Castrillo, Mariano

Entidad/es financiadora/s: MEDOP INNOVATION, A.I.E.

Fecha de inicio: 01/09/2012 **Fecha de fin:** 31/08/2014

Proyecto: (2012/0116) Research project in the area of osmium-based phosphorescent emitter oled materials

I.P.: Esteruelas Rodrigo, Miguel Ángel

Entidad/es financiadora/s: UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION

Fecha de inicio: 01/04/2012 **Fecha de fin:** 31/03/2014

Proyecto: Estrategias sintética, generación de librerías y relación estructura-actividad de derivados de tiazolidinas

I.P.: Cativiela Marín, Carlos

Entidad/es financiadora/s: AXEB BIOTECH, S.L.

Fecha de inicio: 01/06/2010 **Fecha de fin:** 31/12/2013

Proyecto: Investigación en tecnologías de líquidos iónicos para aplicaciones industriales (centit - liquion)

I.P.: Laguna Castrillo, Mariano

Entidad/es financiadora/s: IMPLASER 99, S.L.L.

Fecha de inicio: 01/06/2010 **Fecha de fin:** 31/12/2013

Proyecto: Detección, cuantificación y separación de polímeros naturales solubles en agua de interés industrial

I.P.: Laguna Castrillo, Mariano

Entidad/es financiadora/s: PPS, S.A.

Fecha de inicio: 12/12/2011 **Fecha de fin:** 12/06/2013

Proyecto: (OTRI 2012/0232) Trabajos de investigación en química orgánica

I.P.: Cativiela Marín, Carlos

Entidad/es financiadora/s: ROLABO OUTSOURCING, S.L.

Fecha de inicio: 01/03/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Proyecto: (2012/1094) Desarrollo de instrumentación para el seguimiento cinético de reacciones

Entidad de realización: OTRI

I.P.: Sola Larraya, Eduardo

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Proyecto: Proyecto tintométrica: análisis de materiales poliméricos de muestras comprendidas entre la m-701 y m-751

I.P.: Mayoral Murillo, José Antonio

Entidad/es financiadora/s: DECOROIL, S.L.

Fecha de inicio: 01/01/2012 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Proyecto: CENIT 2009 - SEILA - Nuevas tecnologías para un sistema ecológico, eficiente e inteligente de lavado de los textiles del futuro

I.P.: Coronas Ceresuela, Joaquín

Entidad/es financiadora/s: INDUSTRIAS QUIMICAS DEL EBRO

Fecha de inicio: 20/11/2009 **Fecha de fin:** 31/12/2012

Proyecto: Estudio de compuestos químicos orgánicos

I.P.: Cativiela Marín, Carlos

Entidad/es financiadora/s: ARACOMPOS I, S.L.

Fecha de inicio: 01/09/2012 **Fecha de fin:** 31/10/2012

Proyecto: Diseño y desarrollo de biodisolventes y otros productos para aplicaciones industriales

I.P.: Pires Ezquerro, María Elisabet

Entidad/es financiadora/s: ENERGÍAS LIMPIAS ALTERNATIVAS, S.L.

Fecha de inicio: 15/11/2010 **Fecha de fin:** 30/06/2012

Proyecto: OTRI (2012/0071) Análisis y determinación de stickies industriales

I.P.: Merino Filella, Pedro

Entidad/es financiadora/s: ICT IBERICA S.L.

Fecha de inicio: 2011 **Fecha de fin:** 2012

Proyecto: (OTRI 2010/0165) Resoluciones cromatográficas y enzimáticas aplicadas a la síntesis de compuestos... (cofinanciación TRACE TRA2009_0125)

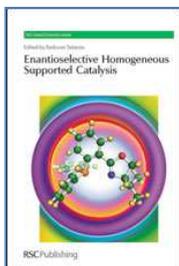
I.P.: Cativiela Marín, Carlos

Entidad/es financiadora/s: ROLABO OUTSOURCING, S.L.

Fecha de inicio: 01/03/2010 **Fecha de fin:** 29/02/2012

4.2. PUBLICACIONES

Capítulo de libro



Autores: José. M. Fraile, José I. García, Clara I. Herrerías, José A. Mayoral, Elísabet Pires
Capítulo: Non-covalent immobilization. (pp 237–277)
Libro: Enantioselective Homogeneous Supported Catalysis
Colección: RSC Green Chemistry Series (vol. 15)
Editor: R. Šebesta
Editorial: RSC Publishing, Cambridge, 2012.
ISBN: 978-1-84973-176-8

Autores: Clara I. Herrerías, José A. Mayoral

Capítulo: Immobilization and recycling of enantioselective catalysts (pp. 81-101) CL

Libro: Recent Advances and New Trends in Catalysis (EFCATS Summer School)

Editores: C. Evangelisti, F. Zaccheria

Editorial: CNR-ISTM,

ISBN: 978-8-890-75690-0

2012



Autores: Eugenia Marqués-López, Raquel P. Herrera

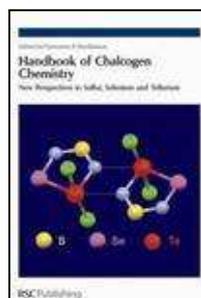
Capítulo: Hydrogen Bonds as an Alternative Activation (pp. 175-199)

Libro: New Strategies in Chemical Synthesis and Catalysis

Editor: Bruno Pignataro

Editorial: John Wiley & sons, 2012

ISBN: 978-3-527-33090-4



Autores: M^a Concepción Gimeno

Capítulo: Thiolates, selenolates and tellurolates (pp. 33-80)

Libro: Handbook on chalcogen chemistry, new perspectives in sulfur, selenium and tellurium

Editor: Francesco A. Devillanova

Editorial: Royal Society of Chemistry, 2012

ISBN: 9780854043668

Autores: Mariano Laguna , Asunción Luquín

Capítulo: Ciencia con Materiales caseros. (pp. 239-246)

Libro: Enseñanza y Divulgación de la Química y la Física

Editores: G. Pinto, M. Martin

Editorial: Garceta 2012

ISBN: 978-84-1545-224-9



Resumen Artículos

Artículos publicados en revistas científicas de carácter internacional.

Índice Impacto	Nº Art.
≥ 10	9
6 - 10	5
5-6	17
4-5	36
3-4	26
2-3	21
1-2	13
≤1	2
Sin Índice	2
Nº Artículos	131

F. Impacto 2012	Revista	Nº Art.
13,734	ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION*	7
10,677	JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*	2
6,828	GREEN CHEMISTRY*	1
6,378	CHEMICAL COMMUNICATIONS*	2
6,142	ORGANIC LETTERS*	1
6,101	JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY*	1
5,868	CARBON*	1
5,831	CHEMISTRY - A EUROPEAN JOURNAL*	12
5,787	JOURNAL OF CATALYSIS*	1
5,265	ACS CATALYSIS	2
5,181	CHEMCATCHEM*	1
4,593	INORGANIC CHEMISTRY*	8
4,572	CHEMISTRY - AN ASIAN JOURNAL*	1
4,564	JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*	1
4,187	LANGMUIR*	2
4,145	ORGANOMETALLICS*	24
3,909	SOFT MATTER*	2
3,879	CRYSTENGCOMM*	2
3,829	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*	1
3,806	DALTON TRANSACTIONS*	10
3,753	CATALYSIS, SCIENCE & TECHNOLOGY*	1
3,740	CHEMBIOCHEM*	1
3,568	ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY*	2
3,535	SENSORS AND ACTUATORS B-CHEMICAL*	1
3,410	APPLIED CATALYSIS A-GENERAL*	1

3,357	FUEL*	1
3,120	EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY*	3
3,039	CURRENT ORGANIC CHEMISTRY*	1
2,980	CATALYSIS TODAY*	1
2,966	NEW JOURNAL OF CHEMISTRY	1
2,879	BIOPOLYMERS*	1
2,865	MINI-REVIEWS IN MEDICINAL CHEMISTRY	1
2,835	CHEMMEDCHEM	1
2,803	TETRAHEDRON	4
2,801	BEILSTEIN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY	1
2,732	JOURNAL OF SUPERCRITICAL FLUIDS	1
2,722	MEDCHEMCOMM	1
2,655	SYNLETT	2
2,397	TETRAHEDRON LETTERS	1
2,319	RESOURCES CONSERVATION AND RECYCLING	1
2,016	INORGANIC CHEMISTRY COMMUNICATIONS	1
2,000	JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY	4
1,920	COMPTES RENDUS CHIMIE	2
1,813	POLYHEDRON	1
1,801	JOURNAL OF COORDINATION CHEMISTRY	1
1,718	CHIRALITY	1
1,643	COMMENTS ON INORGANIC CHEMISTRY	1
1,475	IEEE SENSORS JOURNAL	1
1,404	JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE	1
1,184	TRANSITION METAL CHEMISTRY	1
1,163	ZEITSCHRIFT FUR ANORGANISCHE UND ALLGEMEINE CHEMIE	1
1,077	HETEROCYCLES	2
1,060	SYNTHETIC COMMUNICATIONS	1
0,492	ACTA CRYSTALLOGRAPHICA SECTION C-CRYSTAL STRUCTURE COMMUNICATIONS	1
0,280	JOURNAL OF THE MEXICAN CHEMICAL SOCIETY	1
	Nº Total Artículos Indexados 2012	129

* Revistas incluidas en el primer cuartil de su campo científico

Sin factor de impacto	Revista	Nº Art.
	NANOSCIENCE AND NANOTECHNOLOGY - ASIA	1
	MOLBANK	1
	Nº Total Artículos no Indexados 2012	2

Artículos**Effective Fixation of CO₂ by Iridium-catalysed hydrosilylation**

Lalrempuia, R.; Iglesias, M.; Polo, V.; Sanz Miguel, P. J.; Fernández-Álvarez, F. J.; Pérez-Torrente, J. J.; Oro, L. A.

Angew. Chem. Int. Ed., 2012, 51, 12824-12827. F. I.: 13,734

β-Lactones through catalytic asymmetric heterodimerization of ketenes

Marqués-López, E.; Christmann, M.

Angew. Chem. Int. Ed., 2012, 51, 8696-8698. F. I.: 13,734

An organotransition-metal complex with pentagonal-pyramidal structure

García-Monforte, M. A.; Baya, M.; Falvello, L. R.; Martín, A.; Menjón, B.

Angew. Chem. Int. Ed., 2012, 51, 8046-8049. F. I.: 13,734

Solid-state and solution structure of a hypervalent AX₅ compound: Sb(C₆F₅)₅

García-Monforte, M. A.; Alonso, P. J.; Ara, I.; Menjón, B.; Romero, P.

Angew. Chem. Int. Ed., 2012, 51, 2754-2757. F. I.: 13,734

Stereospecific carbene polymerization with oxygenated Rh(diene) species

Walters, A. J. C.; Troepfner, O.; Ivanovic-Burmazovic.; Tejel, C.; del Río, M. P.; Reek, J. N. H.; De Bruin, B.

Angew. Chem. Int. Ed., 2012, 51, 5157-5161. F. I.: 13,734

Synthesis of gold-silver luminescent honeycomb aggregates by both solvent-based and solvent-free methods

Blanco, M. C.; Cámara, J.; Gimeno, M. C.; Laguna, A.; James, S. L.; Lagunas, M. C.; Villacampa, M. D.

Angew. Chem. Int. Ed., 2012, 51, 9777-9779. F. I.: 13,734

The dehydrogenation of alcohols through a concerted bimetallic mechanism involving

Mena, I.; Casado, M. A.; Polo, V.; García-Orduña, P.; Lahoz, F. J.; Oro, L. A.

an Amido-Bridged Diiridium Complex

Angew. Chem. Int. Ed., 2012, 51, 8259-8263. F. I.: 13,734

Ligand-controlled regioselectivity in the hydrothiolation of alkynes by Rhodium N-heterocyclic carbene catalysts

Di Giuseppe, A.; Castarlenas, R.; Pérez-Torrente, J.; Crucianelli, M.; Polo, V.; Sancho, R.; Lahoz, F. J.; Oro, L. A.

Heterocyclic Carbene Catalysts

J. Am. Chem. Soc., 2012, 134, 8171-8183. F. I.: 10,677

Re-mediated C-C coupling of pyridines and imidazoles

Espinal, M.; Huertos, M. A.; Pérez, J.; Riera, L.; Ara I.

J. Am. Chem. Soc., 2012, 134, 20326-20329. F. I.: 10,677

Critical assessment of the efficiency of chitosan biohydrogel beads as recyclable and heterogeneous organocatalyst for C-C bond formation

Kühbeck, D.; Saidulu, G.; Reddy, K. R.; Díaz, D. D.

Green Chem., 2012, 14, 378-392. F. I.: 6,828

A synthon for a 14-electron Ir(III) species: Catalyst for highly selective β -(Z) hydrosilylation of terminal alkynes

Iglesias, M.; Pérez-Nicolás, M.; Sanz Miguel, P. J.; Polo, V.; Fernández-Alvarez, F. J.; Pérez-Torrente, J. J.; Oro, L. A.
Chem. Comm., 2012, 48, 9480-9482. F. I.: 6,378

Synthesis and characterisation of [6]-azaosmahelicenes: The first d^4 -heterometallic helices

Crespo, O.; Eguillor, B.; Esteruelas, M. A.; Fernández, I.; García-Raboso, J.; Gómez-Gallego, M.; Martín-Ortiz, M.; Oliván, M.; Sierra, M. A.
Chem. Comm., 2012, 48, 5328-5330. F. I.: 6,378

Dynamic kinetic resolution of 1,3-dihydro-2 H-isoindole-1-carboxylic acid methyl ester: Asymmetric transformations toward isoindoline carbamates

Morán-Ramallal, R.; Gotor-Fernández, V.; Laborda, P.; Sayago, F. J.; Cativiela, C.; Gotor, V.
Org. Lett., 2012, 7, 1696-1699. F. I.: 6,142

Fine-tuning the balance between crystallization and gelation and enhancement of CO₂ uptake on functionalized calcium based MOFs and metallogels

Mallick, A.; Schön, E. M.; Panda, T.; Sreenivas, K.; Díaz, D. D.; Banerjee, R.
J. Mater. Chem., 2012, 22, 14951-14963. F. I.: 6,101

The formation of a hydrothermal carbon coating on graphite microfiber felts for using as structured acid catalyst

Roldán, L.; Santos, I.; Armenise, S.; Fraile, J. M.; García-Bordejé, E.
Carbon, 2012, 50, 1363-1372. F. I.: 5,868

Aerobic Oxidation of Carbon Monoxide in a Tetrametallic Complex

Tejel, C.; Sancho, S.; López, J. A.; Ciriano, M. A.
Chem.-Eur. J., 2012, 18, 15250-15253. F. I.: 5,831

Cycloruthenated Complexes from Imine-based Heterocycles. Synthesis, Characterization and Reactivity Towards Alkynes

Cuesta, L.; Soler, T.; Urriolabeitia, E.
Chem.-Eur. J., 2012, 18, 15178-15189. F. I.: 5,831

DFT studies on cobalt-catalyzed cyclotrimerization reactions: The mechanism and origin of reaction improvement under microwave irradiation

Rodríguez, A. M.; Cebrián, C.; Prieto, P.; García, J. I.; Hoz, de la, A.; Díaz-Ortiz, A.
Chem.-Eur. J., 2012, 18, 6217-6224. F. I.: 5,831

Double activation of an N-alkylimidazole

Huertos, M. A.; Pérez, J.; Riera, L.
Chem.-Eur. J., 2012, 18, 9530-9533. F. I.: 5,831

Luminescent di- and polynuclear organometallic gold(I)-metal (Au₂, {Au₂Ag}_n and {Au₂Cu}_n) compounds containing bidentate phosphanes as active antimicrobial agents

Frik, M.; Jiménez, J.; Gracia, I.; Falvello, L. R.; Abi-Habib, S.; Surliel, K.; Muth, T. R.; Contel, M.
Chem.-Eur. J., 2012, 18, 3659-3674. F. I.: 5,831

New liquid crystalline materials based on two generations of dendronized cyclophosphazenes

Jiménez, J.; Laguna, A.; Gascón, E.; Sanz, J. A.; Serrano, J. L.; Barberá, J.; Oriol, L.
Chem.-Eur. J., 2012, 18, 16801-16814. F. I.: 5,831

Organocatalyzed enantioselective desymmetrization of diols in the preparation of chiral building blocks

Díaz-de-Villegas, M. D.; Gálvez, J. A.; Badorrey, R.; López-Ram-De-Viú, M. P.
Chem.-Eur. J., 2012, 18, 13920-13935. F. I.: 5,831

Predicting the enantioselectivity of the copper-catalysed cyclopropanation of alkenes by using quantitative quadrant-diagram representations of the catalysts

Aguado-Ullate, S.; Urbano-Cuadrado, M.; Villalba, I.; Pires, E.; García, J. I.; Bo, C.; Carbó, J. J.
Chem.-Eur. J., 2012, 18, 14026-14036. F. I.: 5,831

Supramolecular assembly of diplatinum species through weak PtlI...PtlI intermolecular interactions: A combined experimental and computational study

Pérez, A.; Espinosa L. A.; Azani, Mohammad-Reza; Guijarro, A.; Sanz Miguel, P. J.; Givaja, G.; Castillo, O.; Mas-Ballesté, R. Zamora, F.; Rubio, A.
Chem.-Eur. J., 2012, 18, 13787-13799. F. I.: 5,831

The structural diversity triggered by intermolecular interactions between Au(I)S₂ groups: Auophilia and beyond

Azani, M. R.; Castillo, O.; Gallego, M. L.; Parella, T.; Aullón, G.; Crespo, O.; Laguna, A.; Alvarez, S.; Mas-Ballesté, R.; Zamora, F.
Chem.-Eur. J., 2012, 18, 9965-9976. F. I.: 5,831

Synthesis of complexes containing an anionic NHC ligand with an unsubstituted ring-nitrogen atom

Kösterke, T.; Kösters, J.; Würthwein, E. U; Mück-Lichtenfeld, C.; Brinke, Schulte T.; Lahoz, F.; Hahn, F. E.
Chem.-Eur. J., 2012, 18, 14594-14598. F. I.: 5,831

Stepwise degradation of trifluoromethyl-platinum(II) compounds

Martínez-Salvador, S.; Forniés, J.; Martín, A.; Menjón, B.; Usón, I.
Chem.-Eur. J., 2012, 19, 324-337. F. I.: 5,831

Deactivation of sulfonated hydrothermal carbons in the presence of alcohols: Evidences for sulfonic esters formation

Fraile, J. M.; García-Bordejé, E.; Roldán, L.
J. Catat., 2012, 289, 73 - 79. F. I.: 5,787

Heterogeneous catalysis for tandem mukaiyamichael and hydrogenation reactions: One-pot vs sequential processes

Fraile, J. M.; García, N.; Herrerías, C. I.; Martín, M.; Mayoral, J. A.
ACS. Catal., 2012, 2, 56-64. F. I.: 5,265

Rh-mediated C1-polymerization: copolymers from diazoesters and sulfoxonium ylides

Olivos Suarez, A. I.; del Río, M. P.; Remerie, K.; Reek, J. N. H.; de Bruin, B.
ACS. Catal., 2012, 2, 2046-2059. F. I.: 5,265

Rhodium(I) Complexes with hemilabile phosphines: Rational design for efficient oxidative amination catalysts

Jiménez, M. V.; Bartolomé, M. I.; Pérez-Torrente, J. J.; Lahoz, F. J.; Oro, L. A.
Chemcatchem., 2012, 4, 1298-1310. F. I.: 5,181

Decaborane thiols as building blocks for self-assembled monolayers on metal surfaces

Bould, J.; Macháček, J.; Londesborough, M. G. S.; Macías, R.; Kennedy, J. D.; Bastl, Z.; Rupper, P.; Baše, T.
Inorg. Chem., 2012, 51, 1685-1694. F. I.: 4,593

Different rotamer states of cytosine nucleobases in heteronuclear Pt,Pd-, PtPd₂, and Pt₂Pd₂Ag Complexes Derived from [Pt(2,2'-bpy)(1-MeC-N3)₂]²⁺ (1-MeC = 1-Methylcytosine): First Examples of Species with head-head Oriented 1-MeC⁻ Ligands

Yin, L.; Sanz Miguel, P. J.; Hiller, W.; Lippert, B.
Inorg. Chem., 2012, 51, 6784-6793. F. I.: 4,593

Formation of P-C bond through reductive coupling between bridging phosphido and inorganic chemistry benzoquinolate groups. Isolation of complexes of the Pt(II)/Pt(IV)/Pt(II) sequence

Arias, A; Forniés, J.; Fortuño, C.; Martín, A.; Latronico, M.; Mastrorilli, P.; Todisco, S.; Gallo, V.
Inorg. Chem., 2012, 51, 12682-12696. F. I.: 4,593

Highly luminescent half-lantern cyclometalated platinum(II) complex: Synthesis, structure, luminescence studies, and reactivity

Sicilia, V.; Forniés, J.; Casas, J. M.; Martín, A.; López, J. A.; Larraz, C.; Borja, P.; Ovejero, C.; Tordera, D.; Bolink, H.
Inorg. Chem., 2012, 51, 3427-3435. F. I.: 4,593

Multiple metal binding to the 9-Methyladenine model nucleobase Involving N1, N6, and N7: Discrete Di- and Trinuclear species with different combinations of monofunctional Pd^I and Pt^{II} Entities

Mihály, T.; Garijo, M.; Albertí, F. M.; Sanz Miguel, P. J.; Lippert, B.
Inorg. Chem., 2012, 51, 10437-10446. F. I.: 4,593

N-H and N-C bond activation of pyrimidinic nucleobases and nucleosides promoted by an osmium polyhydride

Esteruelas, M. A.; García-Raboso, J.; Oliván, M.; Oñate, E.
Inorg. Chem., 2012, 51, 5975-5984. F. I.: 4,593

New dicyano cyclometalated compounds containing Pd(II)-Ti(I) bonds as building blocks in 2D extended structures: Synthesis, structure, and luminescence studies

Sicilia, V.; Forniés, J.; Fuertes, S.; Martín, A.
Inorg. Chem., 2012, 51, 10581-10589. F. I.: 4,593

Reactions of an osmium-hexahydride complex with cytosine, deoxycytidine, and cytidine: The importance of the minor tautomers

Esteruelas, M. A.; García-Raboso, J.; Oliván, M.
Inorg. Chem., 2012, 51, 9522-9528. F. I.: 4,593

Luminescent Benzoquinolate-Isocyanide Platinum(II) complexes: Effect of Pt...Pt and/or pi...pi interactions on their photophysical properties

Forniés, J.; Sicilia, V.; Borja, P.; Casas, J. M.; Díez, A.; Lalinde, E.; Larraz, C.; Martín, A.; Moreno, M. T.
Chem.-Asian J., 2012, 7, 2813-2823. F. I.: 4,572

Bis(oxazoline)-based coordination polymers: A recoverable system for enantioselective Henry reactions

Angulo, B.; García, J. I.; Herrerías, C. I.; Mayoral, J. A.; Miñana, A. C.
J. Org. Chem., 2012, 77, 5525-5532. F. I.: 4,564

L - And D-proline adsorption by chiral ordered mesoporous silica

Casado, C.; Castán, J.; Gracia, I.; Yus, M.; Mayoral, A.; Sebastián, V.; López-Ram-de-Viu, P.; Uriel, S.; Coronas, J.
Langmuir, 2012, 28, 6638-6644. F. I.: 4,187

Structure and dynamics of 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate phases on silica and laponite clay: From liquid to solid behavior

Castillo, M. R.; Fraile, J. M.; Mayoral, J. A.
Langmuir, 2012, 28, 11364-11375. F. I.: 4,187

Alkenylation of 2-Methylpyridine via Pyridylidene-Osmium complexes

Bajo, S.; Esteruelas, M. A.; López, A. M.; Oñate, E.
Organometallics, 2012, 24 - 31, 8618-8626. F. I.: 4,145

Anti-Markovnikov 1,3-CH addition of allenes to allenes: A straightforward method to prepare osmium-dienylcarbene complexes

Castro-Rodrigo, R.; Esteruelas, M. A.; López, A. M.; Oñate, E.
Organometallics, 2012, 5 - 31, 1991-2000. F. I.: 4,145

Bioconjugated Rhenium(I) complexes with amino acid derivatives: Synthesis, photophysical properties, and cell imaging studies

Fernández-Moreira, V.; Ortego, M. L.; Williams, C. F.; Coogan, M. P.; Villacampa, M. D.; Gimeno, M. C.
Organometallics, 2012, 16 - 31, 5950-5957. F. I.: 4,145

Brønsted acid/base driven chemistry with rhodathiaboranes: A labile {SB9H9}-thiadecaborane fragment system

Calvo, B.; Macías, R.; Cunchillos, C.; Lahoz, F. J.; Oro, L. A.
Organometallics, 2012, 31, 2526-2529. F. I.: 4,145

Coupling of aromatic aldehydes with CO₂ Me-substituted Tp^{Me2}Ir(III) metallacyclopentadienes

Roa, A. E.; Salazar, V.; López-Serrano, J.; Oñate, E.; Alvarado-Rodríguez, J. G.; Paneque, M.; Poveda, M. L.
Organometallics, 2012, 31, 3185-3198. F. I.: 4,145

Decarbonylation of aliphatic aldehydes by a Tp^{Me2}Ir(III) metallacyclopentadiene

Roa, A. E.; Salazar, V.; López-Serrano, J.; Oñate, E.; Paneque, M.; Poveda, M. L.
Organometallics, 2012, 31, 716-721. F. I.: 4,145

Easy access to hydride chemistry on a tripodal P-based Rhodium scaffold

Tejel, C.; Geer, A. M.; Jiménez, S.; López, J. A.; Ciriano, M. A.
Organometallics, 2012, 31, 2895-2906. F. I.: 4,145

Luminescent homo- and heteropolynuclear gold complexes stabilized by a unique acetylide fragment

Blanco, M. C.; Cámara, J.; Gimeno, M. C.; Jones, P. G.; Laguna, A.; López-De-Luzuriaga, J. M.; Olmos, M. E.; Villacampa, M. D.
Organometallics, 2012, 31, 2597-2605. F. I.: 4,145

Formation of osmium-allylphosphinomethanide complexes by coupling of an Isopropenyldiisopropylphosphine and monosubstituted allenes

Esteruelas, M. A.; López, A. M.; Mozo, S.; Oñate, E.
Organometallics, 2012, 31, 440-444. F. I.: 4,145

Half-sandwich complexes of osmium (II) with I- α -amino carboxylate ligands as asymmetric transfer hydrogenation catalysts. on the origin of the enantioselectivity

Carmona, D.; Lahoz, F. J.; García-Orduña, P.; Oro, L. A.; Lamata, M. P.; Viguri, F.
Organometallics, 2012, 31, 3333-3345. F. I.: 4,145

Enantioselective catalytic diels-alder reactions with enones as dienophiles

Carmona, D.; Viguri, F.; Asenjo, A.; Lahoz, F. J.; García-Orduña, P.; Oro, L. A.
Organometallics, 2012, 31, 4551-4557. F. I.: 4,145

Facile synthesis of gold(III) aryl-carbene metallacycles

Crespo, O.; Gimeno, M. C.; Laguna, A.; Montanel-Pérez, S.; Villacampa, M. D.
Organometallics, 2012, 31, 5520-5526. F. I.: 4,145

Heteropolynuclear Pt(II)-M(I) clusters with a C^NC biscyclometalated ligand

Fuertes, S.; Woodall, C. H.; Raithby, P. R.; Sicilia, V.
Organometallics, 2012, 31, 4228-4240. F. I.: 4,145

Modification of [8,8,8-(H)(PPh₃)₂-9-(Py)-(Py)nido-8,7-RhSB₉H₉], Py = NC₅H₅, with monodentate phosphines: Reactivity and mechanistic insights

Calvo, B.; Álvarez, A.; Macías, R.; García-Orduña, P.; Lahoz, F. J.; Oro, L. A.
Organometallics, 2012, 31, 2986-2995. F. I.: 4,145

N-heterocyclic carbene coinage metal complexes as intense blue-green emitters

Gimeno, M. C.; Laguna, A.; Visbal, R.
Organometallics, 2012, 31, 7146-7157. F. I.: 4,145

Osmium-centered oxetylidene: Formation and cleavage

Batuecas, M.; Esteruelas, M. A.; García-Yebra, C.; Oñate, E.
Organometallics, 2012, 31, 8079-8081. F. I.: 4,145

Preparation, hydrogen bonds, and catalytic activity in metal-promoted addition of arylboronic acids to enones of a rhodium complex containing an NHC ligand with an alcohol function

Peñafiel, I.; Pastor, I. M.; Yus, M.; Esteruelas, M. A.; Oliván, M.
Organometallics, 2012, 31, 6154-6161. F. I.: 4,145

Preparation, structure, bonding, and preliminary reactivity of a six-coordinate d⁴ osmium-boryl complex

Esteruelas, M. A.; Fernández, I.; López, A. M.; Mora, M.; Oñate, E.
Organometallics, 2012, 31, 4646-4649. F. I.: 4,145

Reactions of an osmium(IV) complex with allenedienes: Coordination and intramolecular cycloadditions

Collado, A.; Esteruelas, M. A.; Gulías, M.; Mascareñas, J. L.; Oñate, E.
Organometallics, 2012, 31, 4450-4458. F. I.: 4,145

Reactions of osmium-pinacolboryl complexes: Preparation of the first vinylideneboronate esters

Esteruelas, M. A.; López, A. M.; Mora, M.; Oñate, E.
Organometallics, 2012, 31, 2965-2970. F. I.: 4,145

Regioselective CH bond activation on stabilized nitrogen ylides promoted by Pd(II) complexes: Scope and limitations

Grande, L.; Serrano, E.; Cuesta, L.; Urriolabeitia, E. P.
Organometallics, 2012, 31, 394-404. F. I.: 4,145

Selective hydration of nitriles to amides promoted by an Os-NHC catalyst: Formation and X-ray characterization of κ^2 -amidate intermediates

Buil, M. L.; Cadierno, V.; Esteruelas, M. A.; Gimeno, J.; Herrero, J.; Izquierdo, S.; Oñate, E.
Organometallics, 2012, 31, 6861-6867. F. I.: 4,145

Steric effects in the oxidative addition of MeI to a sulfido-bridged ZrRh₂ early-late heterobimetallic compound

Nguyen, D. H.; Modrego, F. J.; Cetina-Casas, J.; Bardají-Bautista, D.; Jiménez, M. V.; Castarlenas, R.; Lahoz, F. J.; Oro, L. A.; Pérez-Torrente, J. J. *Organometallics*, 2012, 31, 6395-6407. F. I.: 4,145

Synthesis and characterization of the double salts [Pt(bzq)(CNR)₂][Pt(bzq)(CN)₂] with significant Pt...Pt and π ... π interactions. Mechanistic insights into the ligand exchange process from joint experimental and dft study

Forniés, J.; Fuertes, S.; Larraz, C.; Martín, A.; Sicilia, V.; Tsipis, A. C. *Organometallics*, 2012, 31, 2729-2740. F. I.: 4,145

Competition between gelation and crystallisation of a peculiar multicomponent liquid system based on ammonium salts

Kapoor, I.; Schön, E. M.; Bachl, J.; Kühbeck, D.; Cativiela, C.; Saha, S.; Banerjee, R.; Roelens, S.; Marrero-Tellado, J.; Díaz, D. D. *Soft Matter*, 2012, 8, 3446-3456. F. I.: 3,909

Self-assembly and luminescence of pyrazole supergelators

Moyano, S.; Serrano, J. L.; Elduque, A.; Giménez, R. *Soft Matter*, 2012, 8, 2799-2806. F. I.: 3,909

A novel hydrate of α -cyclodextrin crystallised under high-pressure conditions

Granero-García, R.; Lahoz, F. J.; Paulmann, C.; Saouane, S.; Fabbiani, F. P. A. *Crystengcomm.*, 2012, 14, 8664-8670. F. I.: 3,879

Unsupported single-walled water cluster nanotube: A novel hydrogen bonding pattern for water organization

Albertí, F. M.; Mihály, T.; Lippert, B.; Sanz Miguel, P. J. *Crystengcomm.*, 2012, 14, 6178-6181. F. I.: 3,879

Control of nitrogen insertion during the growth of nitrogen-containing carbon nanofibers on cordierite monoliths walls

Roldán, L.; Armenise, S.; Marco, Y.; García-Bordejé, E. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2012, 14, 3538-3575. F. I.: 3,829

7-Methylguanaine: Protonation, formation of linkage isomers with trans-(NH₃)₂Pt(II), and base pairing properties

Kozma, A.; Ibáñez, S.; Silaghi-Dumitrescu, R.; Sanz Miguel, P. J.; Gupta, D.; Lippert, B. *Dalton Trans.*, 2012, 41, 6094-6103. F. I.: 3,806

A square-pyramidal organochromium(V) compound

García-Monforte, M. A.; Alonso, P. J.; Arauzo, A. B.; Martín, A.; Menjón, B.; Rillo, C. *Dalton Trans.*, 2012, 41, 1297-1303. F. I.: 3,806

Benzoquinolateplatinum(II) complexes as building blocks in the synthesis of Pt-Ag extended structures

Forniés, J.; Ibáñez, S.; Lalinde, E.; Martín, A.; Moreno, M. T.; Tsipis, A. C. *Dalton Trans.*, 2012, 41, 3439-3451. F. I.: 3,806

Facile two-electron reduction of a closo-rhodathiadecaborane

Luaces, S.; Bould, J.; Macías, R.; Sancho, R.; Lahoz, F. J.; Oro, L. A. *Dalton Trans.*, 2012, 41, 11627-11634. F. I.: 3,806

Electronic structure and geometries of o-carborane derived cyclic structures $[\{\mu-1,2-(C_2B_{10}H_{10})_nM_n\}Ag_m]^{z-}$, $M = \{Au, Hg\}$, $n = \{3, 4\}$, $m = \{0, 1, 2\}$, $z = \{n - m, -m\}$

Aullón, G.; Laguna, A.; Oliva, J.M.

Dalton Trans., 2012, 41, 14146-14150. F. I.: 3,806

Emission tuning in dinuclear gold complexes with diphosphanes containing alkyne and/or oligophenylene spacers

Cámara, J.; Crespo, O.; Gimeno, M. C.; Koshevoy, O. I.; Laguna, A.; Ospino, I.; Smirnova, S. E.; Tunik, P. S.

Dalton Trans., 2012, 41, 13891-13898. F. I.: 3,806

Iridium(III) complexes with polypyridine ligands coordinated as N-heterocyclic carbenes. Synthesis, structure and photophysical properties

Conejero, S.; Maya, C.; P., Margarita; P., Ana; P., Manuel L.; Vattier, F.; Álvarez, E.; Carmona, E.; Laguna, A.; Crespo, O.

Dalton Trans., 2012, 41, 14126-14136. F. I.: 3,806

Luminescent heterometallic gold-copper alkynyl complexes stabilized by tridentate phosphine

Shakirova, J. R.; Grachova, E. V.; Gurzhiy, V. V.; Koshevoy, I. O.; Melnikov, A. S.; Sizova, O. V.; Tunik, S. P.; Laguna, A.

Dalton Trans., 2012, 41, 2941-2949. F. I.: 3,806

Multiphase enantioselective Kharasch-Sosnovsky allylic oxidation based on neoteric solvents and copper complexes of ditopic ligands

Aldea, L.; García, J. I.; Mayoral, J. A.

Dalton Trans., 2012, 41, 8285-8289. F. I.: 3,806

Ruthenium amino carboxylate complexes as asymmetric hydrogen transfer catalysts

Carmona, D.; Viguri, F.; Lamata, M. P.; Ferrer, J.; Bardají, E.; Lahoz, F. J.; García-Orduña, P.; Oro, L. A.

Dalton Trans., 2012, 41, 10298-10308. F. I.: 3,806

Synthesis of cyclic carbonates using monometallic, and helical bimetallic, aluminum complexes

Castro_Osma, J.A.; Lara-Sanchez, A.; North, M.; Otero, A.; Villuendas, P.

Catal. Sci. Technol., 2012, 2, 1021-1026. F. I.: 3,753

Stereoselective hydride transfer by aryl-alcohol oxidase, a member of the GMC superfamily

Hernández-Ortega, A.; Ferreira, P.; Merino, P.; Medina, M.; Guallar, V.; Martínez, A.T.

ChemBiochem, 2012, 13, 427-435. F. I.: 3,740

Stereoselective synthesis and biological evaluation of D-fagomine, D-3-epi-fagomine and D-3,4-epi-fagomine analogs from D-glyceraldehyde acetonide as a common building block

Díez, J. A.; Gálvez, J.A.; Díaz-de-Villegas, M.D.; Badorrey, R.; Bartholomew, B.; Nash, R.J.

Org. Biomol. Chem., 2012, 10, 9278-9286. F. I.: 3,568

β -Phenylproline: The high β -turn forming propensity of proline combined with an aromatic side chain

Fatás, P.; Jiménez, A. I.; Calaza, M. I.; Cativiela, C.

Org. Biomol. Chem., 2012, 10, 640-651. F. I.: 3,568

Volatile organic compounds optical fiber sensors based on Lossy mode resonances

Elosua, C.; Arregui, F. J.; Zamarreño, C. R.; Barriain, C.; Luquín, A.; Laguna, M.; Matias, I. R. *Sens. Actu. B-Chem.*, 2012, 173, 523-529. F. I.: 3,535

A highly efficient, green and recoverable catalytic system for the epoxidation of fatty esters and biodiesel with H₂O₂

De Torres, M.; Arends, I. W. C. E.; Mayoral, J. A.; Pires, E.; Jiménez-Osés, G. *Appl. Catal. A-Gen.*, 2012, 425 - 426, 91-96. F. I.: 3,410

Glycerol ketals: Synthesis and profits in biodiesel blends

De Torres, M.; Jiménez-Osés, G.; Mayoral, J. A.; Pires, E.; De, Los Santos, M. *Fuel*, 2012, 94, 614-616. F. I.: 3,357

Expected and unconventional Ag⁺ binding modes in heteronuclear Pt, Ag coordination polymers derived from trans-[Pt(methylamine)₂(pyrazole)₂]²⁺

Brandi-Blanco, P.; Sanz Miguel, P. J.; Lippert, B. *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2012, 7, 1122-1129. F. I.: 3,120

Snapshots of a reversible metal-ligand two-electron transfer step involving compounds related by multiple types of isomerism

Tejel, C.; Asensio, L.; del Río, P.; De Bruin, B.; López, J. A.; Ciriano, M. A. *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2012, 7, 512-519. F. I.: 3,120

The trifluoromethyl group in transition metal chemistry

García-Monforte, M. A.; Martínez-Salvador, S.; Menjón, B. *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2012, 31, 4945-4966. F. I.: 3,120

Stereoselective synthesis of α -aminophosphonic acids analogs of the 20 proteinogenic α -amino acids

Ordóñez, M.; Viveros-Ceballos, J. L.; Cativiela, C.; Arizpe, A. *Curr. Organic Chem.*, 2012, 9, 310-341. F. I.: 3,039

Evaluation of several catalytic systems for the epoxidation of methyl oleate using H₂O₂ as oxidant

De Torres, M.; Jiménez-Osés, G.; Mayoral, J.A.; Pires, E.; Blanco, RM; Fernández, O. *Catal. Today*, 2012, 196, 76-82. F. I.: 2,980

³¹P NMR spectroscopy and pattern-recognition techniques as tools for the identification and enantiodiscrimination of α -amino acids

Nieto, S.; Cativiela, C.; Urriolabeitia, E. P. *New J. Chem.*, 2012, 36, 566-569. F. I.: 2,966

Effects of ring contraction on the conformational preferences of α -substituted proline analogues

Revilla-López, G.; Warren, J.G.; Torras, J.; Jiménez, A.I.; Cativiela, C.; Alemán, C. *Biopolymers.*, 2012, 98, 98-110. F. I.: 2,879

Recent progress on fucosyltransferase inhibitors

Merino, P.; Tejero, T.; Delso, I.; Hurtado-Guerrero, R.; Gomez-San Juan, A.; Sadaba, D. *Mini-Review. Med. Chem.*, 2012, 12, 1455-1464. F. I.: 2,865

Truncated reverse isoxazolidinyl nucleosides: A new class of allosteric HIV-1 reverse transcriptase inhibitors

Romeo, R.; Giofrè, S. V.; Macchi, B.; Balestrieri, E.; Mastino, A.; Merino, P.; Carnovale, C.; Romeo, G.; Chiacchio, U.

Chemmedchem., 2012, 7, 565-569. F. I.: 2,835

A reusable enantioselective catalytic system for the Kharasch-Sosnovsky allylic oxidation of alkenes based on a ditopic azabis(oxazoline) ligand

Aldea, L.; Delso, I.; Hager, M.; Glos, M.; García, J. I.; Mayoral, J. A.; Reiser, O.
Tetrahedron, 2012, 68, 3417-3422. F. I.: 2,803

Highly stereoselective synthesis of imino-C-di- and trisaccharides as hydrolytically stable glycomimetics

Marca, E.; Delso, I.; Tejero, T.; Merino, P.
Tetrahedron, 2012, 68, 6674-6687. F. I.: 2,803

Stereoselective multigram-scale synthesis of cis- and trans- β -phenylproline derivatives

Rodríguez, I.; Calaza, M. I.; Jiménez, A. I.; Cativiela, C.
Tetrahedron, 2012, 68, 9578-9582. F. I.: 2,803

Synthesis of quaternary α -aminophosphonic acids

Ordóñez, M.; Sayago, F. J.; Cativiela, C.
Tetrahedron, 2012, 68, 6369-6412. F. I.: 2,803

Synthesis of conformationally restricted glutamate and glutamine derivatives from carbonylation of orthopalladated phenylglycine derivatives

Urriolabeitia, E. P.; Laga, E.; Cativiela, C.
Beilstein J. Org. Chem., 2012, 8, 1569-1575. F. I.: 2,801

Experimental determination of the critical loci for $\{n\text{-C}_6\text{H}_{14}$ or CO_2 +alkan-1-ol} mixtures. Evaluation of their critical and subcritical behavior using PC-SAFT EoS

Gil, L.; Blanco, S.; Rivas, C.; Laga, E.; Fernández, J.; Artal, M.; Velasco, I.
J. Supercrit. Fluid., 2012, 71, 26-44. F. I.: 2,732

DNA binding and cytotoxicity of fluorescent curcumin-based Zn(II) complexes

Pucci, D.; Bellini, T.; Crispini, A.; D'agnano, I.; Liguori, P. F.; Garcia-Orduña, P.; Pirillo, S.; Valentini, A.; Zanchetta, G.
Medchemcomm., 2012, 3, 462-468. F. I.: 2,722

Phenylboronic acid as efficient and eco-friendly catalyst for the one-pot, three-component synthesis of α -aminophosphonates under solvent-free conditions

Tibhe, G. D.; Bedolla-Medrano, M.; Cativiela, C.; Ordóñez, M.
Synlett., 2012, 23, 1931-1936. F. I.: 2,655

Studies on the synthesis of 2-alkyl-5-aryl-1,3,4-oxadiazolines from N-acylhydrazones

Marqués-López, E.; Díez, E.; Martín-Zamora, E.; Álvarez, E.; Fernández, R.; Lassaletta, J. M.
Synlett., 2012, 23, 885-888. F. I.: 2,655

Inter- and intramolecular phosphonium salt cocatalysis in cyclic carbonate synthesis catalysed by a bimetallic aluminium(salen) complex

North, M.; Villuendas, P.; Young, C.
Tetrahedron Lett., 2012, 53, 2736-2740. F. I.: 2,397

Meat and bone meal and coal co-gasification: Environmental advantages

Cascarosa, E.; Gasco, L.; García, G.; Gea, G.; Arauzo, J.
Resour. Conserv. Recy., 2012, 59, 32-37. F. I.: 2,319

P-C bond cleavage in dppm derivatives: X-ray structure of [Pd₂(μ₂-P,C-PPh₂CHPOPh₂)(μ₂-dppm)Cl(PPh₂Me)]

Miranda, S.; Cerrada, E.; Mendía, A.; Laguna, M.
Inorg. Chem Comm., 2012, 21, 151-154. F. I.: 2,016

Heterometallic complexes with the mono and disubstituted [(4-pyridylamino)carbonyl]ferrocene ligands

Ceamanos, C.; Gimeno, M. C.; Jayaswal, M. N.; Laguna, A.
J. Organomet. Chem., 2012, 713, 169-177. F. I.: 2,000

Dual reactivity of O-α-allyl esters under palladium(0) catalysis: From carbopalladation/allylic alkylation domino sequence to decarboxylative allenylation

Kammerer-Pentier, C.; Diez Martínez, A.; Oble, J.; Prestat, G.; Merino, P.; Poli, G.
J. Organomet. Chem., 2012, 714, 53-59. F. I.: 2,000

Half-sandwich organometallic complexes with stereogenic metal centres: Synthesis and characterization of diastereomeric [ηⁿ-ring)M(Aa)X] (Aa=α-amino carboxylate) compounds

Carmona, D.; Lamata, M. P.; Viguri, F.; San José, E.; Mendoza, A.; Lahoz, F. J.; García-Orduña, P.; Atencio, R.; Oro, L. A.
J. Organomet. Chem., 2012, 717, 152-163. F. I.: 2,000

Synthesis and Characterization of New 10- and 12-vertex CO-ligated Metallathiaboranes

Luaces, S.; Bould, J.; Macías, R.; Sancho, R.; García-Orduña, P.; Lahoz, F. J.; Oro, L. A.
J. Organomet. Chem., 2012, 721 - 722, 23-30. F. I.: 2,000

Coinage metal complexes with N'NN' and SeNSe ligands - Pincer vs bridging coordination pattern

Ilie, A.; Laguna, A.; Silvestru, C.
C. R. Chimie, 2012, 15, 895-903. F. I.: 1,920

Synthesis, structural analysis, and thermal and spectroscopic studies of methylmalonate-containing zinc(II) complexes

Déniz, M.; Pasán, J.; Fabelo, O.; Cañadillas-Delgado, L.; Lorenzo-Luis, P.; Lahoz, F. J.; López, D.; Yuste, C.; Julve, M.; Ruiz-Pérez, C.
C. R. Chimie, 2012, 15, 911-923. F. I.: 1,920

Palladium and platinum pyrimidine-2-thionate complexes with diphosphines

Miranda, S.; Cerrada, E.; Luquín, A.; Mendía, A.; Laguna, M.
Polyhedron, 2012, 43, 15-21. F. I.: 1,813

Synthesis, structure, and kinetic studies on [RuCl₂(NCCH₃)₂(cod)]

Pérez-Torrente, J. J.; Cunchillos, C.; Gómez-Bautista, D.; Jiménez, M. V.; Castarlenas, R.; Lahoz, F. J.; Oro, L. A.
J. Coord. Chem., 2012, 65, 2981-2991. F. I.: 1,801

Access to enantiomerically pure cis- and trans-β-phenylproline by HPLC resolution

Fatás, P.; Gil, A. M.; Calaza, M. I.; Jiménez, A. I.; Cativiela, C.
Chirality, 2012, 24, 1082-1091. F. I.: 1,718

Cyclometallation of Heterocycles. A Reliable Strategy for Selective Functionalization

Cuesta, L.; Urriolabeitia, E. P.
Comments Inorg Chem., 2012, 33, 55-85. F. I.: 1,643

Optical fiber sensors array to identify beverages by their odor

Elosua, C.; Bariain, C.; Luquín, A.; Laguna, M.; Matias, I. R.
IEEE Sensors Journal, 2012, 12, 3156-3162. F. I.: 1,475

Construction of preorganized uracil based polytopic tectons for hydrogen-bonded supramolecular architectures

Chakraborty, S.; Sanz Miguel, P. J.; Albertí, F. M.; Das, N.
J. Mol. Struct., 2012, 1015, 99-105. F. I.: 1,404

Cu(bapen)M(CN)₄·H₂O complexes exhibiting chain-like structures (bapen = N,N'-bis(3-aminopropyl)-1,2-diaminoethane, M=Ni, Pd): preparations, crystal structures, spectroscopic and magnetic properties

Cernak, J.; Stolarova, M.; Cizmar, E.; Tomás, M.; Falvello, L. R.
Transit. Metal Chem., 2012, 4, 321-329. F. I.: 1,184

Flat vs. folded chelate rings in cis-PtIIa₂ (a = NH₃, a₂ = en, a₂ = 2, 2'-bpy) complexes of twofold substituted diazine ligands

Von Grebe, P.; Sanz Miguel, P. J.; Lippert, B.
Z. Anorg. Allg. Chem., 2012, 638, 1691-1698. F. I.: 1,163

Recent advances on the synthesis of piperidines through ruthenium-catalyzed ring-closing metathesis (RCM) reactions

Merino, P.; Tejero, T.; Greco, G.; Marca, E.; Delso, I.; Gomez-San Juan, A.; Matute, R.
Heterocycles, 2012, 84, 75-100. F. I.: 1,077

Cross-coupling reactions for the synthesis of c-glycosides and related compounds

Merino, P.; Tejero, T.; Marca, E.; Gomollon-Bel, F.; Delso, I.; Matute, R.
Heterocycles, 2012, 86, 791-820. F. I.: 1,077

Reactivity of unsaturated 5(4H)-oxazolones with Hg(II) acetate: Synthesis of methyl N-benzoylamino-3-arylacrylates

Roiban, G. -D.; Soler, T.; Contel, M.; Grosu, I.; Cativiela, C.; Urriolabeitia, E. P.
Synthetic Commun., 2012, 42, 195-203. F. I.: 1,060

Di-μ-methano-lato-bis-[(4-tetra-fluoro-benzobarrelene) rhodium(I)]

García-Orduña, P.; Mena, I.; Casado, M. A.; Lahoz, F. J.
Acta Crystallogr. C, 2012, 68. F. I.: 0,492

Microwave-assisted high diastereoselective synthesis of α-aminophosphonates under solvent and catalyst free-conditions

Tibhe, G. D.; Reyes-González, M. A.; Cativiela, C.; Ordóñez, M.
J. Mex. Chem. Soc., 2012, 56, 183-187. F. I.: 0,280

(Z)-N-(7-Cyano-9,9,15,15-tetramethyl-9,10,11,13,14,15-hexahydro-6H-benzo[4",5"]imidazo[1",2":1',2']pyrido[3',4':5, 6]pyrano[2,3-f]pyrido[3,2,1-ij]quinolin-6-ylidene)pent-4-ynamide

Bachl, J.; Wolbeis, O.; Cativiela, C. Díaz, D.
Molbank, 2012, 4: M783.

Hybrid bioactive hydrogels containing single-walled carbon nanotubes covalently integrated via strain-promoted azide-alkyne cycloaddition

Bachl, J.; Huber, T.; Kühbeck, D.; Schön, E. M; Brunner, G.; Kraus, B.; Heilmann, J.; Codelli, J. A.; Bertozzi, C. R.; Cativiela, C.; Díaz, D. D.
Nanoscience and Nanotechnology – Asia, 2012, 2, 200-209.

4.3. COMUNICACIONES A CONGRESOS

Tipo de Comunicación	Nº Total
Conferencias Invitadas	12
Conferencias Plenarias	1
Comunicaciones Orales	48
Pósters	118

Conferencias Invitadas

Título: Apasionante Viaje a través del Mundo de la Organocatálisis

Congreso: Conferencia Premio Lilly

Autores: Pérez Herrera, Raquel

Lugar: Madrid (España) **Fecha:** 18/12/2012

Título: Chiral catalysis in confined spaces

Congreso: International workshop. Molecules at the mirror. Chirality in Chemistry and Biophysics. Academis Nazionale dei Lincei.

Autores: Mayoral Murillo, José Antonio

Lugar: Roma (Italia) **Fecha:** 29/10/2012

Título: Activación de Amoníaco: Amido- e Imido-complejos de iridio y rodio

Congreso: 30 Congreso Latinoamericano de Química

Autores: Oro Giral, Luis Antonio

Lugar: Cancún (México) **Fecha:** 28/10/2012

Título: Preparation and Antimicrobial Activity of Silver Nanoparticle

Congreso: Current Trends in Nanotechnology

Autores: Laguna Castrillo, Antonio; Fernández, E. J.; López de Luzuriaga, J. M.; Monge, M.

Lugar: Santiago (Chile) **Fecha:** 18/10/2012

Título: Selectivity modulation through immobilization of chiral catalysts on nanostructured supports

Congreso: International Symposium on Catalysis and Speciality Chemicals

Autores: Mayoral Murillo, José Antonio

Lugar: Tlemcen (Argelia) **Fecha:** 23/09/2012

Título: Reversible Carbene Insertions into the Ru-Si Bond of kappa-P,P,Si Pincer Complexes

Congreso: 40 International Conference on Coordination Chemistry

Autores: Sola Larraya, Eduardo; Bernal Fernández, M^a Josefa; Martín Casado, Marta

Lugar: Valencia (España) **Fecha:** 09/09/2012

Título: Immobilization and recycling of enantioselective catalysts

Congreso: EFCATS International Summer School on Catalysis

Autores: Mayoral Murillo, José Antonio

Lugar: Verbania Pallanza (Italia) **Fecha:** 12/09/2012

Título: Iridium Complexes with Binucleating Nitrogen Donor Ligands Showing Intermetallic Catalytic Cooperation

Congreso: XXV International Conference on Organometallic Chemistry

Autores: Oro Giral, Luis Antonio

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 06/09/2012

Título: Exploiting nitrene chemistry for the synthesis of saturated nitrogen heterocycles

Congreso: 3rd Brazil-Spain Workshop on Organic Chemistry (3rd BS-WOC).

Autores: Merino Filella, Pedro

Lugar: Campinas (Brasil) **Fecha:** 03/09/2012

Título: Ammonia Activation Processes Leading to Novel Amido and Imido Iridium and Rhodium Complexes

Congreso: 4th EuCheMS Chemistry Congress

Autores: Oro Giral, Luis Antonio

Lugar: Praga (República Checa) **Fecha:** 29/08/2012

Título: Novel synthetic approaches to enantiomerically pure saturated nitrogen heterocycles

Congreso: European Colloquium on Heterocyclic Chemistry

Autores: Merino Filella, Pedro

Lugar: Reading (UK) **Fecha:** 13/08/2012

Título: A Decade of Asymmetric Organocatalysis

Congreso: XXIV Reunión Bienal de Química Orgánica

Autores: Perez Herrera, Raquel (Premio Lilly)

Lugar: San Sebastián (España) **Fecha:** 11/07/2012

Título: Rational design of glycomimetic inhibitors of glycosyltransferases

Congreso: SISOC-9 Spanish Italian Symposium on Organic Chemistry

Autores: Merino Filella, Pedro

Lugar: Tenerife (España) **Fecha:** 10/02/2012

Conferencias Plenarias

Título: Gold Compounds. From Molecular to Nanometric Level
Congreso: 8th Workshop in Computational Chemistry and Molecular Spectroscopy
Autores: Laguna Castrillo, Antonio; López de Luzuriaga, J. M.; Monge, M.
Lugar: Punta de Tralca (Chile) **Fecha:** 23/10/2012

Comunicaciones Orales

Título: Estudio teórico y experimental de la activación C–H con Pd en α -aminoácidos. Aplicaciones sintéticas
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Laga Lázaro, Eduardo; Sayago García, Fco. Javier; Moncho, Salvador; García-Montero, Ángel; Cativiela Marín, Carlos; Urriolabeitia Arrondo, Esteban Pablo
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Isocianuro complejos luminiscentes de Pt(II) como precursores en la preparación de complejos con enlace Pt-Ag
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Belío Becerril, Ursula; Forniés Gracia, Juan; Martín Tello, Antonio Jesús; Sicilia Martínez, Violeta
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Sensores de mercurio (II) basados en la propiedades fotofísicas de complejos de Pt(II) luminiscentes
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Sicilia Martínez, Violeta; Borja Ustariz, Mª Pilar; Casas del Pozo, José Mª; Martín Tello, Antonio Jesús
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Ligandos NHCs como moduladores de la luminiscencia en complejos tri-coordinados de oro(I)
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Visbal Acevedo, Renso Raúl; Laguna Castrillo, Antonio; Ospino Mendoza, Isaura; Gimeno Floría, Mª Concepción
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Síntesis de complejos de oro(I) con derivados de cisteína. Estudio de su actividad biológica
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Cativiela Marín, Carlos; Gimeno Floría, Mª Concepción; Gutierrez Allueva, Alejandro; Laguna Castrillo, Antonio; Marzo, Isabel
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Reacción organocatalítica de aza-Michael: nueva metodología para la síntesis de β -nitrohidrazidas quirales
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Ana Alcaine, M. Concepción Gimeno, Pedro Merino, Eugenia Marqués-López, Raquel P. Herrera
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012
PREMIO A LA MEJOR COMUNICACIÓN FLASH

Título: Nueva ruta de acceso a 4-H Quinolincinas a partir de vinilpiridina y alquinos, promovida por catalizadores de Rhodio N-Heterocíclicos

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Azpíroz, Ramón; Di Giuseppe, Andrea; Castarlenas, Ricardo; Pérez-Torrente, Jesús J.; Oro, Luis A

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Formación en agua de complejos PtII-Ccarbeno con ligandos imidazol N-monosustituídos

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: Cebollada Muñoz, Andrea; Vellé, Alba; Sanz Miguel, Pablo J.

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Catálisis enantioselectiva en la reacción de Diels-Alder entre metacroleína y ciclopentadieno basado en el fragmento quirál (η^5 -C5Me5)M(PP*) (M = Rh, Ir)

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: Asenjo Orzanco, Ainara; Viguri Rojo, Fernando; García Orduña, Mª Pilar; Lahoz Díaz, Fernando José; Carmona Gascón, Daniel

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Polímeros de coordinación autosoportados: un sistema recuperable para la reacción de Henry enantioselectiva

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: Miñana Segura, Ana Cristina; García Laureiro, José Ignacio; Herrerías Larripa, Clara Isabel; Mayoral Murillo, José Antonio

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Inserción de Olefinas en Enlaces Rh-H

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: Geer Ramos, Ana Mª; López Calvo, José Antonio; Ciriano López, Miguel Ángel; Tejel Altarriba, Cristina

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: El amoníaco como fuente de Rh e Ir Parent Amido y complejos imido

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: Mena, Inmaculada; Casado, Miguel Angel; Polo, Victor; García-Orduña, Mª Pilar; Lahoz, Fernando J.; Oro, Luis A.

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Charge Density Study of the Hetero-Scorpionate Ruthenium Complex [RuCl(k3-N,N,O-bdmpza)(h4-cod)]

Congreso: European Charge Density Meeting

Autores: García Orduña, Mª Pilar; Artigas, Mª José; Cunchillos, Carmen; Lahoz, Fernando José

Lugar: Strbské pleso (Slovakia) **Fecha:** 15/09/2012

Título: Efecto del radical metilo en la estructura de xerogeles híbridos sintetizados a Ph 10 con tetraortosilano (TEOS) y metiltrietoxisilano (MTEOS)

Congreso: XXXVII Reunion Ibérica de Adsorción

Autores: Rios, X.; Moriones, P.; Echeverría, J. C.; García, R.; Khainakov, S.; Luquín Martínez, Mª Asunción; Laguna Castrillo, Mariano; Garrido, J.

Lugar: Sevilla (España) **Fecha:** 12/09/2012

Título: Metal-Carbon Nanohybrid Foams: from Laser Chemistry to Nanochemistry

Congreso: Trends in Nanotechnology International Conference (TNT2012)

Autores: A. Seral-Ascaso, A. Luquín, M. L. Sanjuán, R. Garriga, M. Laguna, G. F. de la Fuente, E. Muñoz

Lugar: Madrid (España) **Fecha:** 10/09/2012

Título: New Gold Thiolates Containing Aminoacid Moieties with Antitumoral Properties

Congreso: 40 Internacional Conference on Coordination Chemistry

Autores: Gimeno Floría, M^a Concepción; Gutierrez Allueva, Alejandro; Bernal, J.; Laguna Castrillo, Antonio; Villacampa Pérez, M^a Dolores; Cativiela Marín, Carlos; Gracia, L.; Isern de Val, Soledad; Marzo, Isabel

Lugar: Valencia **Fecha:** 09/09/2012

Título: From Amido to Imido Iridium and Rhodium Complexes

Congreso: 40 International Conference on Coordination Chemistry

Autores: Oro Giral, Luis Antonio, Casado Lacabra, Miguel A, Mena Pardos, Inmaculada

Lugar: Valencia (España) **Fecha:** 13/09/2012

Título: Nanostructured Carbon Foams: Synthesis, Physicochemical Properties, and Processing

Congreso: Internacional Conference on Diamond and Carbon Materials

Autores: Seral Ascaso, Andrés; Luquín Martínez, M^a Asunción; Fuente Leis, Germán de la; Laguna Castrillo, Mariano; Muñoz de Miguel, Edgar

Lugar: Granada (España) **Fecha:** 03/09/2012

Título: Bioconjugated Re(I) Complexes with Amino Acid Derivatives: Synthesis, Photophysical Properties and Cell Imaging Studies

Congreso: XXV Internacional Conference on Organometallic Chemistry

Autores: Fernández Moreira, Vanesa; Ortego Cañaveras, M^a Lourdes; Williams, C. F.; Coogan, M. P.; Laguna Castrillo, Antonio; Villacampa Pérez, M^a Dolores; Gimeno Floría, M^a Concepción

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Organometallic And Coordination Gold (III), Platinum(II) And Palladium(II) Complexes With Iminophosphorane Ligands As Potential Anticancer Agents

Congreso: XXV International Conference on Organometallic Chemistry

Autores: Carreira, M.; Lease, N.; Vasileuski, V.; Calvo-Sanjuan, R.; Sanaú, M.; Jiménez Villar, Josefina; Casini, A.; Contel, M.

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Reversible Carbene Insertions into the Ru-Si Bond of kappa-P,P,Si Pincer Complexes

Congreso: XXV International Conference on Organometallic Chemistry

Autores: Sola Larraya, Eduardo; Bernal Fernández, M^a Josefa; Martín Casado, Marta

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Metallaoxetane Complexes and their Applications

Congreso: XXV International Conference on Organometallic Chemistry

Autores: Río Varea, María Pilar del; Ciriano López, Miguel Ángel; Tejel Altarriba, Cristina

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: New insight in the C-S bond formation. Regioselective hydrothiolation of alkynes catalyzed by Rhodium(I)-pyridine complexes bearing a NHC ligand.

Congreso: XXV International Conference on Organometallic Chemistry

Autores: Di Giuseppe, Andrea; Castarlenas, Ricardo; Pérez-Torrente, Jesús J.; Crucianelli, Marcello; Polo, Victor; Lahoz, Fernando J.; Oro, Luis A.

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Palladium nanoparticles supported on reduced graphene oxide and multi-walled nanotubes as versatile hydrogenation catalysts

Congreso: NanoteC12

Autores: Cano, M.; Benito, A. M.; Maser, W. K.; Urriolabeitia Arrondo, Esteban Pablo

Lugar: Brighton (UK) **Fecha:** 29/08/2012

Título: Transformation of the Structures and Properties of a Family of Metal Citrate Cubane Polymers

Congreso: American Crystallographic Assn. Annual Meeting

Autores: Falvello Mancuso, Lawrence Rocco; Forcén Vázquez, Elena; Mayoral Asensio, Isabel; Palacio Parada, Fernando; Tomás Lisbona, Milagros

Lugar: Boston, Massachusetts (USA) **Fecha:** 28/07/2012

Título: Ciencia con Materiales Caseros

Congreso: Enseñanza y Divulgación de la Química y la Física. V foro bienal de profesores de física y química de la UPM

Autores: Luquín Martínez, M^a Asunción; Laguna Castrillo, Mariano

Lugar: Madrid (España) **Fecha:** 12/07/2012

Título: β -Phenylproline: effect of the β -phenyl substituent on the β -turn propensity and pyrrolidine puckering

Congreso: XXIV Reunión Bienal de Química Orgánica

Autores: Fatás Fernández, Paola; Calaza Cabanas, Isabel; Cativiela Marín, Carlos; Jiménez Sanz, Ana Isabel

Lugar: San Sebastián (España) **Fecha:** 11/07/2012

Título: Novel thiourea organocatalyzed aza-Michael addition of hydrazides to nitroalkenes

Congreso: XXIV Reunión Bienal de Química Orgánica

Autores: Marqués López, María Eugenia; Alcaine Laborda, Ana; Merino Filella, Pedro; Perez Herrera, Raquel

Lugar: San Sebastián (España) **Fecha:** 11/07/2012

Título: Synthesis of aminophosphonic acids based on the structure of proline

Congreso: XXIV Reunión Bienal de Química Orgánica

Autores: Sayago García, Fco. Javier; Arizpe Santiago, Alicia; Jiménez Sanz, Ana Isabel; Ordóñez Palacios, Mario; Cativiela Marín, Carlos

Lugar: San Sebastián (España) **Fecha:** 11/07/2012

Título: Theoretical and experimental study of the regioselective orthopalladation of α -amino acids through C-H bond activation and its synthetic applications

Congreso: XXIV Reunión Bienal de Química Orgánica

Autores: Urriolabeitia Arrondo, Esteban Pablo; Sayago García, Fco. Javier; Moncho Escrivá, Salvador; García-Montero, Ángel; Cativiela Marín, Carlos; Laga Lázaro, Eduardo

Lugar: San Sebastián (España) **Fecha:** 11/07/2012

Título: Stoichiometric and Catalytic Selective Functionalization of Heterocycles Mediated by Ru and Pd Complexes

Congreso: XXIV Reunión Bienal de Química Orgánica

Autores: Cuesta Orcoyen, Luciano; Villuendas Piqueras, Pedro Ramón; Soler, T.; Urriolabeitia Arrondo, Esteban Pablo

Lugar: San Sebastián (España) **Fecha:** 11/07/2012

Título: Metalated Imidazole Derivatives as a Versatile Synthetic Tool

Congreso: V International School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas

Autores: Peñafiel Andrés, Itziar; Pastor, Isidro M.; Yus, Miguel; Esteruelas Rodrigo, Miguel

Ángel; Oliván Esco, Montserrat
Lugar: Jaca (España) **Fecha:** 02/07/2012

Título: Preparation and Reactivity of Boryl and Silyl-Osmium Complexes Stabilized by an NHC Carbene Ligand

Congreso: V International School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas
Autores: Buil Juan, M^a Luisa; Esteruelas Rodrigo, Miguel Ángel; Izquierdo Ferrer, Susana María; Oñate Rodríguez, Enrique
Lugar: Jaca (España) **Fecha:** 02/07/2012

Título: Y-H (Y = H, B, Si, Cl and C) bond activation with rhodium and iridium POP-pincer systems

Congreso: V International School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas
Autores: Esteruelas Rodrigo, Miguel Ángel; Oliván Esco, Montserrat; Vélez Blasco, Andrea
Lugar: Jaca (España) **Fecha:** 02/07/2012

Título: Reactivity Studies of Complexes [OsHCl(≡CPh)(IPr)(PR₃)]OTf

Congreso: V International School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas
Autores: Buil Juan, M^a Luisa; Esteruelas Rodrigo, Miguel Ángel; Fernández Cardo, Juan José; Oñate Rodríguez, Enrique; Fernández, I.
Lugar: Jaca (España) **Fecha:** 02/07/2012

Título: Preparation of a Pyridylidene Os-Tp Complex and its Reactions with Alkenes and Alkynes

Congreso: V International School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas
Autores: Bajo Velázquez, Sonia; Esteruelas Rodrigo, Miguel Ángel; López de Lama, Ana Margarita; Oñate Rodríguez, Enrique
Lugar: Jaca (España) **Fecha:** 02/07/2012

Título: Preparation of new Os- and Ru-POP pincer systems: selective hydrogenation of an allenylidene ligand

Congreso: V International School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas
Autores: Alós Rando, Joaquín; Bolaño García, Tamara; Esteruelas Rodrigo, Miguel Ángel; Oliván Esco, Montserrat; Oñate Rodríguez, Enrique; Valencia Calvo, Marta
Lugar: Jaca (España) **Fecha:** 02/07/2012

Título: Reactivity of the OsH₃Cl(PiPr₃)₂ Complex towards Allenes

Congreso: V International School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas
Autores: Esteruelas Rodrigo, Miguel Ángel; Larramona Asensio, Carmen; Oñate Rodríguez, Enrique
Lugar: Jaca (España) **Fecha:** 02/07/2012

Título: N-containing CNFs on cordierite monoliths as Ru catalyst support for NH₃ decomposition

Congreso: CARBOCAT-V
Autores: García-Bordejé, E.; Armenise, Sabino; Marco, Yanila; Roldán Muñoz, Laura; Monzón, Antonio
Lugar: Bressanone-Brixen (Italia) **Fecha:** 28/06/2012

Título: Structural Parameters and Catalytic Activity of Half-Sandwich Late Transition Metal Complexes

Congreso: XXII Simposio Grupo Especializado Cristalografía y Crecimiento Cristalino
Autores: García Orduña, M^a Pilar; Lamata Cristóbal, M^a Pilar; Viguri Rojo, Fernando; Carmona Gascón, Daniel; Lahoz Díaz, Fernando José
Lugar: Sevilla (España) **Fecha:** 26/06/2012

Título: Metalaooxetano Complejos y sus Aplicaciones

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Río Varea, María Pilar del; Ciriano López, Miguel Ángel; Tejel Altarriba, Cristina

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Synthesis of porous hybrid materials from siliceous precursors for implementing optical fibre sensors

Congreso: IX Encontro Brasileiro Sobre Adsorção & I Encontro Íbero-Americano de Adsorção EBA 2012 & IBA 2012

Autores: Burusco, K.; Rios, X.; Moriones, P. ; Luquín Martínez, M^a Asunción; Echeverria, J. C.; Laguna Castrillo, Mariano; Garrido, J. J.

Lugar: Recife (Brasil) **Fecha:** 07/05/2012

Título: Anion Hosts: 3D Pd,Pt-Purine Nucleobase Constructs as Anion Hosts

Congreso: 12th Eurasia Conference on Chemical Sciences EuAsC2S-12

Autores: Sanz Miguel, Pablo J.

Lugar: Corfú (Grecia) **Fecha:** 16/04/2012

Título: Synthesis of proline analogues with an octahydroindole core

Congreso: Prolines & Co.: From synthesis to biological activities

Autores: Sayago García, Fco. Javier; Calaza Cabanas, Isabel; Laborda Martínez, Pedro; Pueyo Gracia, María José; Jiménez Sanz, Ana Isabel; Cativiela Marín, Carlos

Lugar: Montpellier (Francia) **Fecha:** 02/04/2012

Título: Influence of a β -phenyl substituent on the β -turn propensity and pyrrolidine puckering of proline

Congreso: Prolines & Co.: From synthesis to biological activities

Autores: Jiménez Sanz, Ana Isabel; Fatás Fernández, Paola; Calaza Cabanas, Isabel; Cativiela Marín, Carlos

Lugar: Montpellier (Francia) **Fecha:** 02/04/2012

Título: Molecular Mechanism of Protein O-Fucosylation

Congreso: First Biennial meeting chemical biology group

Autores: Hurtado-Guerrero, Ramón; Lira-Navarrete, Erandi; Valero-González, Jessika; Tejero López, Tomás; Panjikar, Santosh; Merino Filella, Pedro

Lugar: Santiago de Compostela (España) **Fecha:** 08/03/2012

Título: Orthometallation as an alternative route for the functionalization of organic entities

Congreso: 243rd American Chemical Society National Meeting

Autores: Laga Lázaro, Eduardo; Cuesta Orcoyen, Luciano; Nieto Alonso, Sonia; Cativiela Marín, Carlos; Urriolabeitia Arrondo, Esteban Pablo

Lugar: San Diego, California (USA) **Fecha:** 25/03/2012

Congresos internacionales no UE

Título: A Diamond Interpenetrated 3D Network Based on Cobalt-Citrate Cubanes with SMM behavior

Congreso: 13th International Conference on Molecule-based Magnets

Autores: Campo Ruiz, Jesús Javier; Falvello Mancuso, Lawrence Rocco; Forcén Vázquez, Elena; Palacio Parada, Fernando; Tomás Lisbona, Milagros; Saenz de Pipaón Soba, Cristina

Lugar: Orlando (USA) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Luminescent Iminophosphorane d8 Transition Metal Coordination Complexes as Potential Anticancer Agents

Congreso: 244th ACS National Meeting

Autores: Vasileuski, V.; Carreira, M.; Benoit, F.; Almeida, A. de; Jiménez Villar, Josefina; Gascón Jiménez, Elena; Sanaú, M.; Casini, A.; Contel, M.

Lugar: Philadelphia (USA) **Fecha:** 19/08/2012

Título: Insight into the Dehydration Mechanism of a Non-Porous 1-D Coordination Polymer: A Single Crystal Diffraction Study

Congreso: American Crystallographic Assn. Annual Meeting

Autores: Falvello Mancuso, Lawrence Rocco; Forcén Vázquez, Elena; Tomás Lisbona, Milagros; Dobrinovich, I. T.

Lugar: Boston, Massachusetts (USA) **Fecha:** 28/07/2012

Título: Ordered magnetic arrays of cobalt SMM: properties and the relationship with crystal symmetry and SMM environment

Congreso: The 19th International Conference on Magnetism with Strongly Correlated Electron Systems (SCES)

Autores: Campo Ruiz, Jesús Javier; Falvello Mancuso, Lawrence Rocco; Forcén Vázquez, Elena; Mayoral Asensio, Isabel; Palacio Parada, Fernando; Saenz de Pipaón Soba, Cristina; Tomás Lisbona, Milagros

Lugar: Bexco, Busan (Korea) **Fecha:** 08/07/2012

Congresos internacionales UE

Título: Facile one-pot synthesis and characterization of palladium nanoparticles firmly supported on reduced graphene oxide

Congreso: NanoTP - 3rd Annual Scientific Meeting 2012.

Autores: Manuela Cano; Ana María Benito; Esteban Pablo Urriolabeitia; Raul Arenal; C. Bittencourt; P. Guttman; Wolfgang Karl Maser

Lugar: Berlin, Alemania **Fecha:** 09/12/2012

Título: Formation in Water of the Elusive C–PtII Bond in N-monosubstituted Imidazole Ligands by Direct Binding of PtII Fragments

Congreso: Japanese-German Symposium on Coordination Programming

Autores: Cebollada Muñoz, Andrea; Vellé, Alba; Sanz Miguel, Pablo J.

Lugar: Munster (Alemania) **Fecha:** 25/10/2012

Título: Synthesis of glycerol derivatives solvents

Congreso: Green Solvents for Synthesis. Advanced Concepts for Solution Phase Chemistry and Processes

Autores: Torres Domínguez, Miriam de; Fraile Dolado, José María; García-Bordejé, E.; Jiménez Osés, Gonzalo; Mayoral Murillo, José Antonio; Pires Ezquerro, Elisabet

Lugar: Boppard (Alemania) **Fecha:** 08/10/2012

Título: Multiphase copper-catalyzed enantioselective Kharasch–Sosnovsky allylic oxidation based on neoteric solvents

Congreso: Green Solvents for Synthesis. Advanced Concepts for Solution Phase Chemistry and Processes

Autores: García Laureiro, José Ignacio; Mayoral Murillo, José Antonio; Aldea Álvarez de Lara, Luis

Lugar: Boppard (Alemania) **Fecha:** 08/10/2012

Título: Formation in Water of the Elusive C–PtII Bond in N-monosubstituted Imidazole Ligands by Direct Binding of monodentate PtII Fragments

Congreso: First Whole Action Meeting COST Action CM1105 (Functional Metal Complexes that Bind to Biomolecules)

Autores: Cebollada Muñoz, Andrea; Vellé, Alba; Sanz Miguel, Pablo J.

Lugar: Granada (España) **Fecha:** 17/09/2012

Título: Self-supported coordination polymers: a recoverable system for Henry reactions

Congreso: 1st Italian-Spanish School on Catalysis. “Recent Advances and New Trends in Catalysis”

Autores: Miñana Segura, Ana Cristina; García Laureiro, José Ignacio; Herrerías Larripa, Clara Isabel; Mayoral Murillo, José Antonio

Lugar: Camerino (Italia) **Fecha:** 11/09/2012

Título: Gold Nanoparticle Decoration of Carbon Nanotubes and Graphene: Synthesis, Physical-Chemical Characterization, and Applications

Congreso: Trends in Nanotechnology International Conference (TNT2012)

Autores: A. Seral-Ascaso; A. Luquín; M. Laguna; G. F. de la Fuente; E. Muñoz

Lugar: Madrid (España) **Fecha:** 10/09/2012

Título: Highly Symmetric 3d Network Based On Cobalt-Citrate Cubanes With Smm Behaviour

Congreso: 40th International Conference on Coordination Chemistry

Autores: Forcén Vázquez, Elena; Campo Ruiz, Jesús Javier; Falvello Mancuso, Lawrence Rocco; Palacio Parada, Fernando; Saenz de Pipaón Soba, Cristina; Tomás Lisbona, Milagros

Lugar: Valencia (España) **Fecha:** 09/09/2012

Título: Different Coordination Sites in Pyrazolate-Bridged Iridium(III) Complexes

Congreso: 40th International Conference on Coordination Chemistry

Autores: Martín Casado, Marta; Tejero López, Tomás; Sola Larraya, Eduardo

Lugar: Valencia (España) **Fecha:** 09/09/2012

Título: Photomodulation of physicochemical properties in an amino acid conjugate containing eight azobenzene units

Congreso: 32nd European Peptide Symposium

Autores: Moretto, Alessandro; Fatás Fernández, Paola; Mba, Miriam; Cativiela Marín, Carlos; Jiménez Sanz, Ana Isabel; Toniolo, Claudio

Lugar: Atenas (Grecia) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Imidazole-pyridine C-C cross-coupling on the coordination sphere of rhenium tricarbonyl fragments

Congreso: XV International Conference on Organometallic Chemistry

Autores: Espinal Viguri, Maialen; Huertos, Miguel A.; Pérez, Julio; Riera Menéndez, Lucía

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Imidazole to NHC rearrangements at molybdenum centers

Congreso: XV International Conference on Organometallic Chemistry

Autores: Huertos, Miguel A.; Pérez, Julio; Riera Menéndez, Lucía; Díaz, Jesús; López, Ramón

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Supramolecular nanovesicles formed by self-assembly of a photo-switchable dipeptide

Congreso: 32nd European Peptide Symposium

Autores: Moretto, Alessandro; Fatás Fernández, Paola; Mba, Miriam; Toniolo, Claudio; Cativiela Marín, Carlos; Jiménez Sanz, Ana Isabel

Lugar: Atenas (Grecia) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Hybrid scorpionate ligands: efficient scaffolds for P-H bond activation reactions on late transition metals

Congreso: XXV International Conference on Organometallic Chemistry

Autores: Serrano López, Angel Luis; Casado Lacabra, Miguel Ángel; Tejel Altarriba, Cristina

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: 11-Vertex Rhodathiaborane Chemistry: Nido→Closa Cluster Changes at Play

Congreso: XXV International Conference on Organometallics Chemistry

Autores: Macías Maza, Ramón; Calvo Calvo, Beatriz; Lahoz Díaz, Fernando José; Oro Giral, Luis Antonio

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: From Phosfines to Carbenes in Rhodathiaborane Chemistry

Congreso: XXV International Conference on Organometallics Chemistry

Autores: Calvo Calvo, Beatriz; Macías Maza, Ramón; Lahoz Díaz, Fernando José; Oro Giral, Luis Antonio

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Synthesis of poly(silylether)s by Rh(I)-NHC catalyzed hydrosilylation: heterogeneous versus homogeneous catalysis

Congreso: XXV International Conference on Organometallics Chemistry

Autores: Lázaro, Guillermo; Iglesias, Manuel; Fernández-Álvarez, Francisco J.; Sanz Miguel, Pablo J.; Pérez-Torrente, Jesús J.; Oro, Luis A.

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Access to all β -phenylproline stereoisomers in enantiomerically pure form

Congreso: 32nd European Peptide Symposium

Autores: Fatás Fernández, Paola; Jiménez Sanz, Ana Isabel; Calaza Cabanas, Isabel; Cativiela Marín, Carlos

Lugar: Atenas (Grecia) **Fecha:** 02/09/2012

Título: β -Phenylproline: effect of the β -phenyl substituent on the β -turn propensity and pyrrolidine puckering

Congreso: 32nd European Peptide Symposium

Autores: Fatás Fernández, Paola; Jiménez Sanz, Ana Isabel; Calaza Cabanas, Isabel; Cativiela Marín, Carlos

Lugar: Atenas (Grecia) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Stoichiometric and Catalytic Selective Functionalization of Heterocycles Mediated by Ru and Pd Complexes

Congreso: XXV International Conference on Organometallic Chemistry

Autores: Cuesta Orcoyen, Luciano; Villuendas Piqueras, Pedro Ramón; Soler, T.; Urriolabeitia Arrondo, Esteban Pablo

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Rh-Mediated C1 (co)polymerization: Carbenes From Diazoesters To Sulfoxonium Ylides

Congreso: XXV International Conference on Organometallic Chemistry

Autores: Suárez, A. I. O.; Río Varea, María Pilar del; Reek, J. N. H.; Bruin, B. de

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Ru(II) Catalysts for the Synthesis of Thieno[2,3-c]pyridine Compounds from Thiophenemethylamines and Alkynes

Congreso: International Conference on Organometallic Chemistry

Autores: Villuendas Piqueras, Pedro Ramón; Urriolabeitia Arrondo, Esteban Pablo

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Intramolecular C–H bond activations at [Ir{BOX-(S)}] complexes

Congreso: XXV International Conference of Organometallic Chemistry

Autores: Martín Casado, Marta; Castillo Mediano, M^a Rosa; Andrés, J. L.; Fraile Dolado, José María; Mayoral Murillo, José Antonio; Sola Larraya, Eduardo

Lugar: Lisboa (Portugal) **Fecha:** 02/09/2012

Título: Investigation of photo-induced transformations inside soft gel materials: Comparison with homogeneous and micellar solutions

Congreso: 4th EuCheMS Chemistry Congress

Autores: Bachl, J.; Hohenleutner, A.; Dhar, B.; Cativiela Marín, Carlos; Maitra, U.; König, B.; Díaz Díaz, David

Lugar: Praga (República checa) **Fecha:** 26/08/2012

Título: Reactivity and Luminescent Properties of Gold (I) and Gold (III) Complexes

Congreso: XXIV IUPAC Symposium on Photochemistry

Autores: Luquín Martínez, M^a Asunción; Gallardo Gallardo, Piedraescrita; González del Rosal, Aida; Merchán Álvarez, Francisco L.; Laguna Castrillo, Mariano

Lugar: Coimbra (Portugal) **Fecha:** 14/07/2012

Título: Terpyridine Lanthanide-Based Complexes for Heparine Determination

Congreso: XXIV IUPAC Symposium on Photochemistry

Autores: Gallardo Gallardo, Piedraescrita; Luquín Martínez, M^a Asunción; Blagoeva Markova, Tatiana; Laguna Castrillo, Mariano

Lugar: Coimbra (Portugal) **Fecha:** 14/07/2012

Título: Scope of arene NHC-pyridine ruthenium complexes as catalysts in organic synthesis

Congreso: 18th International Symposium on Homogeneous Catalysis (ISHC18)

Autores: Cornejo, A.; Aranda, Coral; Fraile Dolado, José María; Gil, M. J.; Martínez Merino, V.; Mayoral Murillo, José Antonio

Lugar: Toulouse (France) **Fecha:** 09/07/2012

Título: Deactivation of sulfonated hydrothermal carbons in the presence of alcohols: evidences for sulfonic esters formation

Congreso: 15th International Congress on Catalysis (ICC2012)

Autores: Fraile Dolado, José María; Roldán Muñoz, Laura; García-Bordejé, E.

Lugar: Munich (Alemania) **Fecha:** 01/07/2012

Título: Solvent, additive and surface effects in enantioselective Mukaiyama-type reactions with homogeneous and supported catalysts

Congreso: 15th International Congress on Catalysis (ICC2012)

Autores: Fraile Dolado, José María; García Laureiro, José Ignacio; Gasco Pérez, Lorena; Herrerías Larripa, Clara Isabel; Mayoral Murillo, José Antonio; Pires Ezquerro, Elisabet

Lugar: Munich (Alemania) **Fecha:** 01/07/2012

Título: Integration of heterogeneous catalysts into multistep processes

Congreso: 15th International Congress on Catalysis (ICC2012)

Autores: Fraile Dolado, José María; García Laureiro, José Ignacio; Herrerías Larripa, Clara Isabel; Mayoral Murillo, José Antonio

Lugar: Munich (Alemania) **Fecha:** 01/07/2012

Título: Hydrothermal carbon coating on graphite felt as structured catalyst for esterification reaction

Congreso: CARBOCAT-V

Autores: García-Bordejé, E.; Santos, Iván; Roldán Muñoz, Laura; Fraile Dolado, José María

Lugar: Bressanone-Brixen (Italia) **Fecha:** 28/06/2012

Título: ChiralAraBOX and XyliBOX ligands for cyclopropanation: computational insights on the enantioselection

Congreso: VIIIth Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2012

Autores: García Laureiro, José Ignacio; Rodríguez García, Antonio M.; Kellehan, D.; Kirby, F.; Frain, D.; O'Leary, P.

Lugar: Barcelona (España) **Fecha:** 26/06/2012

Título: Design of new compounds with antioxidant activity

Congreso: VIIIth Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2012

Autores: Haya, L.; Osante, I.; Carretero García, Angel; Mainar, A. M.; Cativiela Marín, Carlos; Urieta, J. S.

Lugar: Barcelona (España) **Fecha:** 26/06/2012

Título: Lossy Mode Resonante Optical Fiber Sensor to Detect Organic Vapors

Congreso: IMCS2012 – the 14th International Meeting on Chemical Sensors

Autores: Elosua, C.; Bariáin, C.; Vidondo, I.; Arregui, F. J.; Matías Maestro, I. R.; Luquín Martínez, M^a Asunción; Laguna Castrillo, Mariano

Lugar: Nuremberg (Alemania)

Fecha: 20/05/2012

Título: Detection of Organic Vapors by Polished Single Mode Optical Fiber Sensor

Congreso: IMCS2012 – the 14th International Meeting on Chemical Sensors

Autores: Elosua, C.; Bariáin, C.; Matías Maestro, I. R.; Luquín Martínez, M^a Asunción; Laguna Castrillo, Mariano

Lugar: Nuremberg (Alemania) **Fecha:** 20/05/2012

Título: Graphene and Carbon Nanotubes decorated with palladium nanoparticles as active catalysts in hydrogenation reactions

Congreso: ChemOnTubes 2012 (International Meeting on the Chemistry of Nanotubes and Graphene)

Autores: Cano, M.; Benito, A. M.; Maser, W. K.; Urriolabeitia Arrondo, Esteban Pablo

Lugar: Arcachon (Francia) **Fecha:** 01/04/2012

Título: Cooperative dienamine activation: Insights into the mechanism

Congreso: 14th Young Scientists Conference on Chemistry

Autores: Stiller, Julian; Marqués López, María Eugenia; Hiller, W.; Strohmman, C.; Christmann, Mathias

Lugar: Rostock (Alemania) **Fecha:** 18/03/2012

Título: Nitron Ylides: A new entry to all-cis-substituted pyrrolidines

Congreso: SISOC-9 Spanish Italian Symposium on Organic Chemistry

Autores: Merino Filella, Pedro; Díez-Martínez, A.; Dorel, R.; Tejero López, Tomás

Lugar: Tenerife ((España) **Fecha:** 10/02/2012

Título: Mechanism in cooperative dienamine activation

Congreso: 5. Tag der Chemie 2012

Autores: Stiller, Julian; Marqués López, María Eugenia; Hiller, W.; Strohmman, C.; Christmann, Mathias

Lugar: Dortmund (Alemania) **Fecha:** 03/02/2012

Título: Antiproliferative Activity of Gold(I) Complexes containing Water-Soluble Phosphane Ligands

Congreso: V International Conference Bifi 2012. Protein targets: Discovery of Bioactive Compounds

Autores: García Moreno, M^a Elena; Gascón, S.; Cerrada Lamuela, Elena; Rodríguez-Yoldi, M. J.; Laguna Castrillo, Maríano

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 01/02/2012

Congresos nacionales

Título: Catalizadores Heterogéneos de cobre para inserciones C-H enantioselectivas
Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich
Autores: Fraile Dolado, José María; Mayoral Murillo, José Antonio; Santafé Valero, Jorge
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/12/2012

Título: Síntesis de nitrona susceptible de transposicion [3,3]-sigmatropica y estudio de la cinetica de la reacción 2-aza-Cope
Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich
Autores: Merino Filella, Pedro; Tejero López, Tomás; Melicchio, A.
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Reacciones Enantioselectivas de Diels-Alder entre nitroestirenos y ciclopentadieno catalizadas por compuestos semisandwich de Rh (III) e Ir (III)
Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich
Autores: Pardo Abadía, Pilar; Lamata Cristóbal, M^a Pilar; Carmona Gascón, Daniel
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Efecto de la temperatura en la reacción de Friedel-Crafts entre nitroalquenos e índoles catalizada por compuestos semisandwich de Rh (III) e Ir (III)
Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich
Autores: Méndez Tejada, Isabel; Lamata Cristóbal, M^a Pilar; Carmona Gascón, Daniel
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Reacción aldólica de Mukaiyama catalizada por complejos quiralesbisoxazolona-Cu(II): influencia del soporte y aditivos
Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich
Autores: Fraile Dolado, José María; Gasco Pérez, Lorena; Mayoral Murillo, José Antonio; Pires Ezquerro, Elisabet
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Efecto del agente estabilizante en nanopartículas de Pd soportadas en films de líquido iónico sobre laponita, usadas como catalizadores para la reacción Heck.
Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich
Autores: Martínez Esteban, Alejandro Víctor; Mayoral Murillo, José Antonio; García Laureiro, José Ignacio
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Integración de catalizadores heterogéneos en rutas sintéticas complejas.
Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich
Autores: Fraile Dolado, José María; García Laureiro, José Ignacio; Herrerías Larripa, Clara Isabel; Mayoral Murillo, José Antonio
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Desactivación de carbones hidrotermales sulfonados en presencia de alcoholes mediante formación de ésteres sulfónicos
Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich
Autores: Roldán Muñoz, Laura; Fraile Dolado, José María; García-Bordejé, E.
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Estudio computacional de la reacción de Friedel-Crafts organocatalítica
Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich
Autores: Roca López, David; Merino Filella, Pedro; Perez Herrera, Raquel
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Síntesis de β -nitrohidrazidas quirales mediante reacción aza-Michael organocatalítica

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: Alcaine Laborda, Ana; Gimeno Floría, M^a Concepción; Merino Filella, Pedro; Marqués López, María Eugenia; Perez Herrera, Raquel

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Síntesis de beta-1,3-glicomimeticos, potenciales inhibidores de glicosiltransferasas

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: Marca Metola, Eduardo; Merino Filella, Pedro; Tejero López, Tomás; Hurtado-Guerrero, Ramón

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Diseño y síntesis de glicomimeticos inhibidores de transglicosidasas fungicas

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: Gomollón Bel, Fernando; Hurtado-Guerrero, Ramón; Tejero López, Tomás; Merino Filella, Pedro

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Sintesis enantioselectiva de sistemas ciclicos nitrogenados mediante métodos organocatalíticos

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: Sádaba Mendoza, David; Delso Hernández, José Ignacio; Merino Filella, Pedro; Tejero López, Tomás

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Formacion de N-hidroxipirrolidinas todo-cis altamente sustituidas mediante iluros de nitrona

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: Diez-Martínez, A.; Merino Filella, Pedro; Tejero López, Tomás

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Sensores luminiscentes para para la deteccion de sustancias biologicas

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: Gallardo Gallardo, Piedraescrita; Luquín Martínez, M^a Asunción; Laguna Castrillo, Mariano

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Luminiscencia en complejos de oro(III) y oro(I)

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: González del Rosal, Aida; Bolsa Tella, M^a José; Luquín Martínez, M^a Asunción; Laguna Castrillo, Mariano

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Complejos de oro con balance óptimo hidrófilo-lipófilo y su aplicación como cancerígenos

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: Atrián Blasco, Elena; García Moreno, M^a Elena; Rodríguez-Yoldi, M. J.; Cerrada Lamuela, Elena; Laguna Castrillo, Mariano

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Síntesis de polisililéteres a partir de nuevos catalizadores Heterogéneos de rodio

Congreso: IX Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich

Autores: Lázaro Villaroya, Guillermo; Iglesias-Alonso, Manuel; Vispe, Eugenio; Fernández-Álvarez, Francisco J.; Sanz Miguel, Pablo S.; Pérez-Torrente, Jesús J.; Oro, Luis A.

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 07/11/2012

Título: Photophysical studies of terpyridine lanthanide-based complexes for optical applications

Congreso: 3rd Generation PV cells. European PV Cluster 3 Meeting

Autores: Luquín Martínez, M^a Asunción; Gallardo Gallardo, Piedraescrita; Laguna Castrillo, Mariano

Lugar: Barcelona (España) **Fecha:** 02/10/2012

Título: Hidruro y alquil complejos de rodio

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Geer Ramos, Ana M^a; López Calvo, José Antonio; Ciriano López, Miguel Ángel; Tejel Altarriba, Cristina

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Oxigenación de olefinas coordinadas a rodio

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Abril Galve, Paula; Río Varea, María Pilar del; López Calvo, José Antonio; Ciriano López, Miguel Ángel; Tejel Altarriba, Cristina

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Estudio teórico y experimental de la activación C-H con Pd en α -aminoácidos. Aplicaciones sintéticas

Congreso: XXX Reunión Bienal del Grupo Especializado de Química Organometálica

Autores: Laga Lázaro, Eduardo; Sayago García, Fco. Javier; Moncho Escrivá, Salvador; García-Montero, Ángel; Cativiela Marín, Carlos; Urriolabeitia Arrondo, Esteban Pablo

Lugar: Castellón de la Plana (España) **Fecha:** 14/06/2012

Título: Síntesis y actividad catalítica de complejos octaédricos de Iridio (III) con ligandos quirales tretradentados

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Mateo Pérez, Ana Concepción; Carmona Gascón, Daniel

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Hidroxialquilaciones asimétricas de Friedel-Crafts catalizadas por ácidos de Bronsted basados en metales de transición

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Pardo, Pilar; Sánchez, Antonio; Ramírez, Paola; Lamata, M^a Pilar; García-Orduña, Pilar; Lahoz, Fernando J.; Carmona, Daniel

Lugar: Castellón **Fecha:** 12/06/2012

Título: Nuevo Ligando híbrido pirazolil/NHC como soporte para nuevos complejos de metales de transición

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Casado Lacabra, Miguel Ángel; Tejel Altarriba, Cristina; Sánchez Delgado, R.; Serrano López, Angel Luis

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Metalación dirigida como alternativa sintética para la funcionalización de heterociclos

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Cuesta Orcoven, Luciano; Urriolabeitia Arrondo, Esteban Pablo

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Inserción reversible de carbenos en el enlace Si-Ru de complejos pinza [Ru(PSiP)]

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Bernal Fernández, M^a Josefa; Martín Casado, Marta; Sola Larraya, Eduardo

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Complejos carbeno e hidruro de iridio con ligandos pinza kappa-P,P,Si
Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica
Autores: Plou, Pablo; Martín Casado, Marta; Sola Larraya, Eduardo
Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Activaciones CH intramoleculares en complejos Ir{BOX-(S)}
Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica
Autores: Martín Casado, Marta; Castillo Mediano, M^a Rosa; Andrés, J. L.; Fraile Dolado, José María; Mayoral Murillo, José Antonio; Sola Larraya, Eduardo
Lugar: Castellón (España)
Fecha: 12/06/2012

Título: Ortopaladación de aminoácidos. Influencia de los sustituyentes. Estudio mecanístico y DFT

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica
Autores: Urriolabeitia Arrondo, Esteban Pablo; Laga Lázaro, Eduardo; Moncho, Salvador; Sayago García, Fco. Javier; Cativiela Marín, Carlos
Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Solvato complejos del fragmento [Ir(IMes⁺)]: Propiedades electro- y fotoquímicas
Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica
Autores: Navarro Fuenmayor, Janeth; Martín Casado, Marta; Andrés, J.L.; Sola Larraya, E.
Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Luminiscencia de compuestos de lantánidos y oro
Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica
Autores: Luquín Martínez, M^a Asunción; Gallardo Gallardo, Piedraescrita; Bolsa Tella, M^a José; González del Rosal, Aida; Laguna Castrillo, Mariano
Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Propiedades anticancerígenas de compuestos de oro
Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica
Autores: Laguna Castrillo, Mariano; García Moreno, M^a Elena; Gascón, S.; Atrián Blasco, Elena; Cerrada Lamuela, Elena; Rodríguez-Yoldi, M. J.
Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Unexpected Closo-to-Aracno Transformation in a 10-Vertex Rhodathiaborane system
Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica
Autores: Luaces Orobitg, Susana María; Bould, J.; Macías Maza, Ramón; Oro Giral, Luis Antonio
Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Activaciones C-H intramoleculares en complejos [Ir]-Box-(S)
Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica
Autores: Martín Casado, Marta; Castillo Mediano, M^a Rosa; Andrés, J. L.; Fraile Dolado, José María; Mayoral Murillo, José Antonio; Sola Larraya, Eduardo
Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Nanopartículas de Pd soportadas en films de líquido iónico sobre laponita: un sistema altamente reciclable para la reacción de Heck
Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica
Autores: Martínez Esteban, Alejandro Víctor; Mayoral Murillo, José Antonio; García Laureiro, José Ignacio
Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Síntesis diastereoselectiva de complejos hidruros quirales de Iridio (III) con ligandos fosfanooxazolina

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Néstor García, I.; Ramírez, P.; Ferrer Cerra, Joaquina; García Orduña, M^a Pilar; Lahoz Díaz, Fernando José; Carmona Gascón, Daniel

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Alquilaciones enantioselectivas de Friedel-Crafts de indoles con nitroalquenos catalizadas por compuestos semisandwich de Rodio (III) e Iridio (III)

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Méndez Tejada, Isabel; Lamata Cristóbal, M^a Pilar; Carmona Gascón, Daniel

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Enonas como dienófilos en reacciones enantioselectivas de Diels-Alder

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Asenjo Orzanco, Ainara; Viguri Rojo, Fernando; García Orduña, M^a Pilar; Lahoz Díaz, Fernando José; Carmona Gascón, Daniel

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Transformación de ligandos N-alquilimidazol en carbenos N-heterocíclicos en complejos de molibdeno

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Huertos, Miguel A.; Pérez, Julio; Riera Menéndez, Lucía; Díaz, Jesús; López, Ramón

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Acoplamiento cruzado entre N-heterociclos en la esfera de coordinación del fragmento fac-{Re(CO)₃}

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Espinal Viguri, Maialen; Huertos, Miguel A.; Pérez, Julio; Riera Menéndez, Lucía

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Formación de nuevos metalaciclos de oro con ligandos carbeno difuncionales

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Gimeno Floría, M^a Concepción; Montanel Pérez, Sara; Laguna Castrillo, Antonio; Villacampa Pérez, M^a Dolores

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Autores: Pérez-Torrente, Jesús J.; Nguyen, Duc H.; Greger, Ingo; Jiménez, M^a Victoria; Oro, Luis A.

Título: Síntesis, reactividad y aplicación en catálisis de compuestos insaturados de Ir(III) con ligandos pincer O,N,O dadores

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Reactividad de complejos de oro(I) con ligandos carbeno N-heterocíclicos frente a fosfinas bidentadas

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Visbal Acevedo, Renso Raúl; Laguna Castrillo, Antonio; Gimeno Floría, M^a Concepción

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Hidratación de nitrilos catalizada por un complejo de osmio

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Buil Juan, M^a Luisa; Esteruelas Rodrigo, Miguel Ángel; Herrero, Juana; Izquierdo Ferrer, Susana María; Oñate Rodríguez, Enrique

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Nuevos complejos de rodio e iridio con ligandos pinza POP

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Esteruelas Rodrigo, Miguel Ángel; Oliván Esco, Montserrat; Vélez Blasco, Andrea

Lugar: Castellón (España)

Fecha: 12/06/2012

Título: Múltiple activación de amoníaco medida por un complejo de Iridio

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Mena, Inmaculada; Casado, Miguel Angel; Polo, Victor; García-Orduña, M^a Pilar; Lahoz, Fernando J.; Oro, Luis A.

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Título: Complejos de Ir(I) con ligandos carbeno N-Heterocíclico hemilábiles como catalizadores en procesos de autotransferencia de hidrógeno

Congreso: XXX Reunión del Grupo Especializado en Química Organometálica

Autores: Jiménez, M^a V.; Fernández-Tornos, Javier; Pérez-Torrente, Jesús J.; Oro, Luis A.

Lugar: Castellón (España) **Fecha:** 12/06/2012

Congresos locales

Título: β -Fenilprolina: influencia del grupo fenilo en el giro β y la conformación del anillo de pirrolidina

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Fatás Fernández, Paola; Jiménez Sanz, Ana Isabel; Calaza Cabanas, Isabel; Cativiela Marín, Carlos

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Aplicación de la luminiscencia de complejos de lantánidos para la determinación de constantes de formación y concentración de sustancias biológicas

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Gallardo Gallardo, Piedraescrita; Luquín Martínez, M^a Asunción; King, S.; Kotova, O.; Blagoeva Markova, Tatiana; Merchán Alvarez, Francisco L.; Haque, Saif; Gunnlaugson, T.; Laguna Castrillo, Mariano

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Formación de nuevos metalociclos de oro con ligandos carbeno difuncionales

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Montanel Pérez, Sara; Gimeno Floría, M^a Concepción; Laguna Castrillo, Antonio; Villacampa Pérez, M^a Dolores

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Desactivación de carbones hidrotermales sulfonados en presencia de alcoholes mediante formación de ésteres sulfónicos

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Roldán Muñoz, Laura; Fraile Dolado, José María; García-Bordejé, E.

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Funcionalización selectiva de aminofosfonatos mediada por paladio

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: García-Montero, Ángel; Laga Lázaro, Eduardo; Sayago García, Fco. Javier; Cativiela Marín, Carlos; Urriolabeitia Arrondo, Esteban Pablo

Lugar: Zaragoza (España)

Fecha: 04/12/2012

Título: Síntesis en escala de gramos de cis y trans β -fenilprolina a partir de β -alanina

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Rodríguez, I.; Calaza Cabanas, Isabel; Fatás Fernández, Paola; Gil, A. M.; Pueyo Gracia, María José; Jiménez Sanz, Ana Isabel; Cativiela Marín, Carlos

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Reacción aldólica de Mukaiyama catalizada por complejos quiralesbisoxazolona-Cu(II): influencia del soporte y aditivos

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Fraile Dolado, José María; Gasco Pérez, Lorena; Mayoral Murillo, José Antonio; Pires Ezquerro, Elisabet

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Reacciones enantioselectivas de inserción de carbenoides de cobre en enlaces C-H

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Fraile Dolado, José María; Mayoral Murillo, José Antonio; Santafé Valero, Jorge

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Integración de catalizadores heterogéneos en rutas sintéticas complejas
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Fraile Dolado, José María; García Laureiro, José Ignacio; Herrerías Larripa, Clara Isabel; Mayoral Murillo, José Antonio
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Diseño de inhibidores de transglicosilasas fungicas
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Gomollón Bel, Fernando; Hurtado-Guerrero, Ramón; Tejero López, Tomás; Merino Filella, Pedro
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Metodos organocataliticos para la síntesis enantioselectiva de sistemas ciclicos nitrogenados
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Sádaba Mendoza, David; Delso Hernández, José Ignacio; Tejero López, Tomás; Merino Filella, Pedro
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Enantioselective Synthesis of Spirooxindoles through an Organocatalyzed Domino Michael/Cyclization Sequence
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Mohammadi, Somayeh; Heiran, Roghayeh; Marqués López, María Eugenia; Perez Herrera, Raquel
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Organocatalyzed Synthesis of Chiral 1,4-Dihydropyridine Derivatives
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Heiran, Roghayeh; Mohammadi, Somayeh; Perez Herrera, Raquel; Marqués López, María Eugenia
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Modelando la reactividad con organocatalizadores derivados de tioureas: un estudio teórico
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: David Roca López, Pedro Merino, Raquel P. Herrera
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Polímeros de coordinación autosoportados: un sistema recuperable para la reacción de Henry enantioselectiva
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Miñana Segura, Ana Cristina; García Laureiro, José Ignacio; Herrerías Larripa, Clara Isabel; Mayoral Murillo, José Antonio
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Efecto del agente estabilizante en nanopartículas de Pd soportadas en films de líquido iónico sobre laponita, usadas como catalizadores para la reacción de Heck
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Martínez Esteban, Alejandro Víctor; Pérez Sánchez, Irene; Mayoral Murillo, José Antonio; García Laureiro, José Ignacio
Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Síntesis de análogos bicíclicos de prolina con estructura de octahidroindol
Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón
Autores: Laborda Martínez, Pedro; Sayago García, Fco. Javier; Calaza Cabanas, Isabel;

Pueyo Gracia, María José; Jiménez Sanz, Ana Isabel; Cativiela Marín, Carlos

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Síntesis de complejos de oro(I) con derivados de cisterna. Estudio de su actividad biológica

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Gutierrez Allueva, Alejandro; Cativiela Marín, Carlos; Gimeno Floría, Mª Concepción; Laguna Castrillo, Antonio; Marzo, Isabel

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Acción antitumoral de tiolato complejo de oro(I) con ligandos aminofosfinas

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Ortego Cañaveras, Mª Lourdes; Cardoso, F.; Gimeno Floría, Mª Concepción; Laguna Castrillo, Antonio; Meireles, M.; Villacampa Pérez, Mª Dolores

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Síntesis de ácidos aminofosfónicos basados en la estructura de prolina

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Arizpe Santiago, Alicia; Sayago García, Fco. Javier; Jiménez Sanz, Ana Isabel; Ordóñez, M.; Cativiela Marín, Carlos

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Síntesis de amido complejos a partir de amoníaco

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Mena, Inmaculada; Casado, Miguel Angel; Polo, Victor; García-Orduña, Mª Pilar; Lahoz, Fernando J.; Oro, Luis A.

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Complejos de Rh(I) con ligandos hemilábiles tipo fosfina como catalizadores para la polimerización de poli(fenilacetileno) ramificado

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Angoy, Marta; Jiménez, Mª Victoria; Pérez-Torrente, Jesús J.; Vispe, Eugenio; Oro, Luis A.

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Síntesis y caracterización de compuestos de Rh(I) con ligandos heteroescorpionato carbeno N-heterociclo

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física en Aragón

Autores: Puerta-Oteo, Raquel; Jiménez, Mª Victoria; Pérez-Torrente, Jesús J.

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título: Hidrotiolación selectiva de alquinos catalizada por complejos de rodio con ligandos carbeno nhc y otros ligandos nitrogenados

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física de Aragón

Autores: Palacios, Laura; Castarlenas, Ricardo; Pérez-Torrente, Jesús J.; Oro, Luis A.

Lugar: Zaragoza (España) **Fecha:** 04/12/2012

Título : Síntesis de polisililéteres a partir de nuevos catalizadores Heterogéneos de rodio

Congreso: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física de Aragón

Autores: Lázaro Villaroya, Guillermo; Iglesias-Alonso, Manuel; Vispe, Eugenio; Iglesias, Marta; Fernández-Álvarez, Francisco J.; Sanz Miguel, Pablo S.; Pérez-Torrente, Jesús J.; Oro, Luis A.

Lugar: Zaragoza (España)

Fecha: 04/12/2012

4.4 CONFERENCIAS IMPARTIDAS EN EL ISQCH

Dra. María Victoria Gómez Almagro

Instituto Regional de Investigación Científica Aplicada (UCLM)

Nuevas técnicas en resonancia magnética nuclear. microbobinas, aplicaciones en muestras de masa y volumen limitados

Noviembre 2012

Prof. Dr. Elena Lalinde

Universidad de la Rioja

Diversidad estructural y fotoluminiscencia en sistemas mono y polimetálicos de platino

25 de junio

Prof. Dr. Rosario Fernández

Universidad de Sevilla

Desarrollo de nuevos catalizadores y modos de activación. Aplicaciones en catálisis asimétrica

1 de junio

Dr. Gregori Ujaque

Universidad Autónoma de Barcelona

A mechanistic viewpoint on gold-catalyzed hydroamination and hydroalkoxylation processes

29 de mayo

Prof. Dr. Juan Carlos Carretero

Universidad Autónoma de Madrid

Nuevos sustratos coordinantes en reacciones catalizadas por metales de transición

22 de mayo

Prof. Gregory L. Hillhouse

Department of Chemistry, University of Chicago, USA

Unusual Reactivity of 2- and 3-Coordinate Nickel: Chemistry Outside the Square Plane

16 de mayo

Prof. Robert M. Waymouth

Stanford University, USA

Catalysis: enabling science for a sustainable future

10 de mayo

Prof. Dr. Javier A. Cabeza

Universidad de Oviedo

Aproximaciones a la síntesis de complejos trinucleares de rutenio con carbenos derivados de n-heterociclos de seis miembros

22 de marzo

Prof. Jairton Dupont

Institute of Chemistry – UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil

On the Catalytic Properties of Ionic Liquid Soluble Metal-Nanoparticles

6 de febrero

4.5 PERTENENCIA COMITÉS CIENTÍFICOS

María Dolores Díaz de Villegas. Investigadora Científica CSIC

Vocal electo de la Junta de Gobierno del Grupo Especializado de Química Orgánica de la Real Sociedad Española de Química

José Antonio Gálvez. Profesor Titular UZ

Miembro de la Comisión de Garantía de la Calidad del Máster en Química Sostenible de la Universidad de Zaragoza

José Ignacio García. Profesor Investigación CSIC

Vocal de la Sección Territorial de Aragón de la Real Sociedad Española de Química
Miembro del comité organizador de las 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física de Aragón

M^a Concepción Gimeno. Profesora Investigación CSIC

Presidenta del Comité Organizador de la 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores (Química y Física) de Aragón
Presidenta de la Sección Territorial de Aragón de la RSEQ
Vocal del Grupo Especializado de Química Organometálica de la RSEQ
Miembro del Editorial Board de la revista "E-Journal of Chemistry"

Antonio Laguna. Catedrático UZ

Miembro del *National Advisory Committee* de la *40th International Conference on Coordination Chemistry (ICCC40)*. Valencia (España). Septiembre 2012
Miembro del *International Advisory Board* de la *International Conference on Gold Science, Technology and its Applications*. Tokio (Japón). Septiembre 2012

Mariano Laguna. Profesor Investigación CSIC

Miembro del *Editorial Board* de *Chemistry: An Indian Journal*, sección *Organometallics*
Miembro del *Editorial Board* de *Current Inorganic Chemistry*

Fernando J. Lahoz. Profesor Investigación CSIC

Presidente del Grupo Especializado de Cristalografía y Crecimiento Cristalino (GE3C) de las Reales Sociedades Españolas de Química (RSEQ) y Física (RSEF)
Chair de la *Commission on Structural Chemistry* de la *International Union of Crystallography (IUCr)*

María Pilar López Ram de VÍu. Profesora Titular UZ

Miembro de la Comisión de Garantía de la Calidad del Grado en Biotecnología de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza

Eugenia Marqués López. Prof. Ayudante Dr.

Miembro del Claustro de la Universidad de Zaragoza

Pedro Merino. Catedrático UZ

Comisión Asesora de Proyectos de Investigación del MINECO. Panel 2012
Comisión Asesora de Proyectos Nacionales de Portugal. Panel 2012
Comisión Asesora de Proyectos Nacionales de Italia. Panel 2012
Chairman del panel CHEM en Acciones Marie Curie (FP7-ITN-2012)
Nominación como *referee* de excelencia por la revista *Angewandte Chemie*

Luis A. Oro. Catedrático UZ

Miembro del Consejo Asesor de la Ciencia, la Tecnología y la Innovación
Miembro del *OCDE Global Science Forum*
Vicepresidente de la *European Association for Chemical and Molecular Sciences*
Miembro del Consejo Científico y Tecnológico de la FECYT
Miembro de la Comisión Nacional Evaluadora Actividad Investigadora
Miembro del Consejo Asesor de Investigación y Desarrollo del Gobierno de Aragón
Miembro del Alto Consejo Consultivo en Investigación, Desarrollo e Innovación de la Generalitat Valenciana
Miembro del Comité Científico Asesor de Ikerbasque
Co-chairman del *Editorial Board* de *ChemCatChem*
Series Editor of *Topics in Organometallic Chemistry*
Miembro del Consejo Asesor Internacional de *Angewandte Chemie*
Presidente de *ChemPubSoc Europe (European Journals of Inorganic and Organic Chemistry and ChemCatChem)*
Miembro de la Academia Nacional de Ciencias Alemana Leopoldina
Miembro de la Academia Nacional de Ciencias de Francia
Miembro de la Academia Europaea
Miembro de la *European Academy of Sciences*

Raquel Pérez Herrera. Científico Titular CSIC

Miembro del Editorial Board en la revista *The Scientific World Journal*
Miembro del Editorial Board en la revista *Asymmetric Catalysis*

Jesús Pérez Torrente. Catedrático UZ

Miembro de la Comisión de Garantía de la Calidad del Máster en Química Sostenible de la Universidad de Zaragoza

Luis Salvatella. Profesor Titular UZ

Vocal del Consejo Gestor de la Plataforma Tecnológica de Química Sostenible Suschem-España

Esteban Urriolabeitia. Investig. Científico CSIC

Miembro del *Editorial Board* de la revista "*E-Journal of Chemistry*"

4.6 PATENTES

Patentes Europeas

Inventores (p.o. de firma): A. Rueda, J. Pérez, E. Villarroja, G. Navarro, A. Elduque, R. Giménez

Título: A Method for preparing a set accelerator, the product obtained and its use.

Fecha de publicación: 19 septiembre 2012 **Fecha origen datos:** 2 marzo 2012

Número de aplicación: 12157915.5

País de prioridad: ES 201130374 **Fecha de prioridad:** 17 marzo 2011

Entidad titular: Industrias Químicas del Ebro, S.A.

Empresa/s que la están explotando: Industrias Químicas del Ebro, S.A.

Patentes Españolas

Inventores (p.o. de firma): A. Rueda, J. Pérez, E. Villarroja, G. Navarro, A. Elduque, R. Giménez

Título: Método de preparación de un producto acelerante de fraguado, producto obtenido y uso.

Fecha de concesión: 9 agosto 2012 **Fecha publicación solicitud:** 19 septiembre 2011

N. de solicitud: 201130374 **Nº de publicación:** 2 364 937

País de prioridad: España **Fecha de prioridad:** 17 marzo 2011

Entidad titular: Industrias Químicas del Ebro, S.A.

Empresa/s que la están explotando: Industrias Químicas del Ebro, S.A.

CIP: C04B 22/14 (2006.01)

Inventores (p.o. de firma): Miguel Angel Caballero López, Joaquín Javier Pérez Aparicio y José Ignacio Tolosa Cortés (grupo SAMCA), Mariano Laguna Castrillo, Asunción Luquín Martínez, y M^a José Bolsa Tella

Título: Procedimiento de producción de una suspensión metálica para impresión de elementos cerámicos

Fecha de concesión: 23.07.2012 **Fecha publicación solicitud:** 10.02.2012

Nº de solicitud: 201031196 **Nº de publicación:** 2 373 897

Nº de aplicación: ES 2 373 897 B2

País de prioridad: España **Fecha de prioridad:** 30.07.2010

Entidad titular: SAMCA Sociedad Anónima Minera Catalano-Aragonesa

Empresa/s que la están explotando: SAMCA Sociedad Anónima Minera Catalano-Aragonesa

CIP: B22F 9/24 (2006.01) / B82Y 30/00 (2011.01) / C09D 11/02 (2006.01)

Inventores (p.o. de firma): Miguel Angel Caballero López, Joaquín Javier Pérez Aparicio, José Ignacio Tolosa Cortés (grupo SAMCA), Mariano Laguna Castrillo, Asunción Luquín Martínez, y M^a José Bolsa Tella

Título: Síntesis de nanopartículas en fase poliglicol y derivados

Nº de solicitud: ITTO20100775 A1

País de prioridad: Italia **Fecha de prioridad:** Septiembre 2010

Entidad titular: SAMCA Sociedad Anónima Minera Catalano-Aragonesa

Empresa/s que la están explotando: SAMCA Sociedad Anónima Minera Catalano-Aragonesa



Apartado 5. Formación

DOCENCIA EN MÁSTERES

Los miembros del Instituto imparten docencia en tres másteres oficiales impartidos por la Universidad de Zaragoza. Éstos, están dirigidos a licenciados en Química e ingenieros químicos cuyo objetivo es la formación de especialistas versátiles, capaces de incorporarse tanto a la Industria Química como a la investigación académica.

Máster Universitario en Química Sostenible

http://ciencias.unizar.es/master_qs/

La Sociedad es cada vez más consciente de que las amenazas al medioambiente (cambio climático, destrucción de la capa de ozono, contaminación de los ecosistemas, pérdida de biodiversidad, escasez de agua potable...) son también un peligro para la viabilidad a largo plazo del desarrollo económico y de nuestras condiciones de vida actuales.

Por eso, los poderes públicos exigen que las actividades humanas sean cada vez más respetuosas hacia el medioambiente. Así, la Industria Química ha empezado a introducir en los últimos años la filosofía de la Química Sostenible ("Green Chemistry"), definida como "el diseño, el desarrollo y la implementación de productos químicos o procesos para reducir o eliminar el uso y la generación de sustancias peligrosas". El objetivo, por tanto, no consiste en el tratamiento, control o neutralización de las sustancias peligrosas, sino en evitar que lleguen a existir.

Máster Universitario en Investigación Química

155.210.12.154/acad/eGrados.php?id=186&p=1

El Máster tiene como objetivos principales:

- Proporcionar una formación científica avanzada, tanto en aspectos teóricos como prácticos, mediante la profundización en el estudio de áreas específicas dentro de la Química y la realización de un trabajo de investigación.
- Desarrollar en los alumnos la habilidad para adaptarse a nuevas situaciones y enfrentarse a problemas diversos.
- Proporcionar los conocimientos y competencias que permitan el acceso a los estudios de doctorado.

Máster Universitario en Profesorado de E.S.O.

<http://titulaciones.unizar.es/master-secundaria/>

La finalidad del Master es proporcionar al profesorado de Educación Secundaria Obligatoria, Bachillerato, Formación Profesional, Enseñanzas de Idiomas, Artísticas y Deportivas la formación pedagógica y didáctica obligatorias en nuestra sociedad para el ejercicio de la profesión docente con arreglo a lo establecido en la Ley Orgánica 2/2006, de 3 de mayo, de Educación, el Real Decreto 1393/2007, el Real Decreto 1834/2008, y en la Orden ECI 3858/2007 de 27 de diciembre.

En este Máster se imparten complementos formativos de química.

Otros Cursos de Máster

Máster: Master de Química fina. Universidad de Alcalá de Henares (Madrid)

Título: Espectrometría de masas de compuestos inorgánicos. (1 cred)

Profesor: Maríano Laguna

Fecha: Enero 2012

Máster: Master de Química Avanzada. Universidad de Burgos

Título: Fundamentos y Aplicaciones de la Espectrometría de masas. (2 cred)

Profesor: Maríano Laguna

Fecha: Noviembre 2012

Máster: Master on Crystallography and Crystallization. Universidad Internacional Menéndez Pelayo – Consejo Superior de Investigaciones Científicas (Sevilla)

Título: Solving and Refining Structural Data. (9 cred.)

Profesor: Fernando J. Lahoz (coordinador del módulo + 2 cred.)

Fecha: Noviembre-Diciembre 2012

Máster: Master en Ingeniería de Protección contra incendios. Universidad Pontificia de Comillas

Título: Fundamentos y Aplicaciones de las Señales Luminiscentes (1 cred)

Profesor: Maríano Laguna

Fecha: Abril 2012

DOCENCIA EN PRIMER Y SEGUNDO CICLO

Personal docente permanente ISQCH

El personal del Instituto imparte docencia en el primer y segundo ciclo del grado en Química, Ingeniería Química, Ingeniería Mecánica, Biotecnología, Óptica y Optometría, Geología y Ciencias Ambientales.

PDI Dr.		47
Catedrático Universidad	UZ	12
Catedrática E.U.	UZ	1
Titular Universidad	UZ	21
Prof. Ayudante Doctor	UZ	2
Prof. Contratado Doctor	UZ	2
Prof. Contratado Doctor Inv.	UZ	5
Contrato Ramón y Cajal	UZ	1
Contrato Juan de la Cierva	UZ	2
Contrato Juan de la Cierva	CSIC	1

En la tabla siguiente se presenta un resumen de los datos obtenidos del plan de ordenación docente de la Universidad de Zaragoza, a través de la aplicación ODILE de la Universidad de Zaragoza.

	Compromiso Investigador	Horas dedicación	Horas reducción	Disponibilidad
Depto. Química Inorgánica	3230	5522	623	4979
Depto. Química Orgánica	1180	3240	450	2790
ISQCH	4500	8762	1073	7769

TESIS DOCTORALES Y PROYECTOS FINAL DE MÁSTER

Nº Tesis doctorales: 15

Nº Proyectos final de Máster: 12

Tesis Doctorales

Título Tesis: Trifluorometil-derivados de Pt y Au: síntesis, estructura y reactividad

Universidad que titula: Universidad de Zaragoza

Doctoranda: Martínez Salvador, Sonia Pilar

Directores: Fornies Gracia, Juan. Menjon Ruiz, Babil

Calificación: Sobresaliente "cum laude" **Fecha de lectura:** 19/01/2012

Título Tesis: Arquitectura polinuclear basada en sistemas luminiscentes de oro (I) con ligandos acetiluro y/o fosfina

Universidad que titula: Universidad de Zaragoza

Doctoranda: Camara Chueca, Jessica

Directores: Laguna Castrillo, Antonio. Blanco Ortiz, María del Carmen

Calificación: Sobresaliente "cum laude" **Fecha de lectura:** 03/02/2012

Título Tesis: Síntesis de derivados de glicerol y de ésteres grasos: estudio de sus propiedades como aditivos para biodiesel

Universidad que titula: Universidad de Zaragoza

Doctoranda: Torres Domínguez, Miriam De

Directores: Pires Ezquerro, María Elisabet. Jiménez Osés, Gonzalo

Calificación: Sobresaliente "cum laude" **Fecha de lectura:** 02/03/2012

Título Tesis: Síntesis y caracterización de nuevos compuestos de osmio y su aplicación en reacciones de formación de enlaces C-C y C-N

Universidad que titula: Universidad de Zaragoza

Doctoranda: Valencia Calvo, Marta

Directores: Esteruelas Rodrigo, Miguel Angel. Olivan Esco, Montserrat

Calificación: Sobresaliente "cum laude" **Fecha de lectura:** 23/03/2012

Título Tesis: Homogeneous catalysis for fine chemical production: vanadium and rhodium-catalyzed carbon-heteroatom and carbon-carbon bond formation

Universidad que titula: Università Degli Studi dell'Aquila (Italia)

Doctorando: di Giuseppe, Andrea

Directores: Castarlenas Chela, Ricardo (Univ de Zaragoza), Marcello, Crucianelli y Francesco, De Angelis (Univ. Dell'Aquila)

Calificación: Título Doctor **Fecha de lectura:** 24/04/2012

Título Tesis: Nuevos complejos de rutenio y osmio con enlace múltiple M-C: reacciones de activación C-H y acoplamiento C-C

Universidad que titula: Universidad de Zaragoza

Doctoranda: Collado Martínez, Alba

Directores: Esteruelas Rodrigo, Miguel Angel. Oñate Rodríguez, Enrique

Calificación: Apto "cum laude" **Fecha de lectura:** 23/05/2012

Título Tesis: Síntesis de nitronas derivadas de aminoácidos y su aplicación en reacciones de tipo mannich

Universidad que titula: Universidad de Zaragoza

Doctoranda: Diez Martínez, Alba

Directores: Merino Filella, Pedro. Tejero Lopez, Tomas

Calificación: Apto "cum laude" **Fecha de lectura:** 15/06/2012

Título Tesis: Synthesis, structural studies and applications of ss-phenylproline and (phenylazo)phenylalanine derivatives

Universidad que titula: Universidad de Zaragoza

Doctoranda: Fatas Fernandez, Paola

Directores: Cativiela Marin, Carlos. Jimenez Sanz, Ana Isabel

Calificación: Apto "cum laude" **Fecha de lectura:** 26/06/2012

Título Tesis: Carboranos y sus derivados en el diseño de complejos de metales del grupo 11 con propiedades emisoras y precursores de nanopartículas de oro

Universidad que titula: Universidad de Zaragoza

Doctoranda: Ospino Mendoza, Isaura

Directores: Crespo Zaragoza, Olga. Laguna Castrillo, Antonio

Calificación: Apto "cum laude" **Fecha de lectura:** 25/07/2012

Título Tesis: Apertura de sulfamidatos cíclicos con nucleófilos nitrogenados

Universidad que titula: Universidad de la Rioja

Doctoranda: Mata Martínez, Lara

Directores: Rodríguez Barranco, Miguel Á. (director), Campos García, Pedro J. (codirector)

Calificación: Apto "cum laude" **Fecha de lectura:** 25/07/2012

Título Tesis: aplicaciones derivadas de la fotoquímica de O-aciloximas

Universidad que titula: Universidad de la Rioja

Doctoranda: Caballero Millán, Alegría

Directores: Rodríguez Barranco, Miguel Á. (director), Campos García, Pedro J. (codirector)

Calificación: Apto "cum laude" **Fecha de lectura:** 26/09/2012

Título Tesis: Tioles y tiolatos como grupos protectores en la química de oro. Apliaciones en catálisis, luminiscencia y nuevos colores en cerámica

Universidad que titula: Universidad de Zaragoza (Mención Europea)

Doctoranda: Bolsa Tella, María José

Directores: Laguna Castrillo, Mariano. Luquín Martínez, M^a Asunción

Calificación: Apto "cum laude" **Fecha de lectura:** 19/10/2012

Título Tesis: Diseño de compuestos de oro como agentes terapéuticos anticancerígenos

Universidad que titula: Universidad de Zaragoza

Doctoranda: García Moreno, Elena

Directores: Laguna Castrillo, Mariano. Cerrada Lamuela, Elena

Calificación: Apto "cum laude" **Fecha de lectura:** 23/11/2012

Título Tesis: reacciones de complejos ciclopentadienilo de osmio con olefinas y alenos: activación de enlaces C-H, C-C y acoplamiento C-C

Universidad que titula: Universidad de Zaragoza

Doctoranda: Mozo de la Vieja, Silvia

Directores: Esteruelas Rodrigo, Miguel Angel. López de Lama, Ana Margarita

Calificación: Apto "cum laude" **Fecha de lectura:** 13/12/2012

Título Tesis: Activación de enlaces en heterociclos y moléculas relacionadas inducidas por un complejo polihidruro de osmio

Universidad que titula: Universidad de Zaragoza

Doctorando: García Raboso, Jorge

Directores: Esteruelas Rodrigo, Miguel Angel. Oliván Escó, Montserrat

Calificación: Apto "cum laude" **Fecha de lectura:** 08/11/2012

Proyectos Fin de Máster

Título del trabajo: nuevos complejos de oro(III) con ligandos nitrogeno dadores

Alumno: González Del Rosal, Aida

Director/a: Laguna Castrillo, Maríano. Luquín Martínez, M^a Asunción

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 11/07/2012

Título del trabajo: Síntesis dirigida de complejos de oro solubles en agua

Alumna: Elena Atrián Blasco

Director/a: Laguna Castrillo, Maríano. Cerrada Lamuela, Elena

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 11/07/2012

Título del trabajo: Reacciones de oxigenación de diolefinas en compuestos organometálicos

Alumna: Abril Galve, Paula

Director/a: C. Tejel Altarriba, Cristina. Del Río, María Pilar

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 11/07/2012

Título del trabajo: Cisteínas modificadas: síntesis y aplicaciones

Alumno: Carretero Garcia, Angel

Director/a: Cativiela Marin, Carlos

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 11/07/2012

Título del trabajo: Síntesis de ácidos aminoborónicos

Alumna: Andres Esquivias, Patricia Lorena

Directores: Calaza Cabanas, María Isabel. Cativiela Marín, Carlos

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 11/07/2012

Título del trabajo: Ciclometalación del ligando 3,8-dinitro-6-fenilfenantridina por sustratos de Pt(II). Síntesis de nuevos compuestos ciclometalados con propiedades luminiscentes

Alumno: Palacios Laganga, Adrian Urbez

Directores: Fornies Gracia, Juan. Sicilia Martínez, María Violeta

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 12/07/2012

Título del trabajo: Inmovilización de nuevos catalizadores de Rh (I) en MCM-41. Estudio de su actividad catalítica en hidrosililación

Alumno: Lazaro Villarroya, Guillermo

Directores: Fernández Álvarez, Francisco José. Iglesias Alonso, Manuel

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 12/07/2012

Título del trabajo: Síntesis de glicomiméticos inhibidores de glicosiltransferasas

Alumno: Gomollón Bel, Fernando

Directores: Merino Filella, Pedro. Tejero Lopez, Tomas

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 12/07/2012

Título del trabajo: síntesis y caracterización de complejos ciclometalados de PT (II) con ligandos polidentados N, P, C y O dadores. Estudio de su reactividad y propiedades

Alumna: Lezáun Alcalá, Virginia

Directores: Casas del Pozo, José María. Sicilia Martínez, María Violeta

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 12/07/2012

Título del trabajo: Síntesis y reactividad de catalizadores de rodio con ligandos carbeno N-heterocíclicos

Alumna: Palacios Gutiérrez, Laura

Director/a: Pérez Torrente, Jesús Julian

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 12/07/2012

Título del trabajo: Diseño de catalizadores homogéneos para reacciones de intercambio H/D

Alumna: Pérez Tamayo, Eva

Director/a: Pérez Torrente, Jesús Julián. Jiménez Rupérez, María Victoria

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 04/09/2012

Título del trabajo: Síntesis de nuevos complejos de metales de transición

Alumno: Fernández Cardo, Juan José

Director/a: Esteruelas Rodrigo, Miguel Angel. Buil Juan, María Luisa

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 20/09/2012

BECAS DE INICIACIÓN A LA INVESTIGACIÓN

Becas de Iniciación a la Investigación

Tipo de ayuda: Beca de colaboración del MEC

Becaria: Vellé Ruiz, Alba

Director: Sanz Miguel, Pablo

Duración de la beca: Septiembre 2012 - junio 2013

Tipo de ayuda: Beca de colaboración del MEC

Becario: Jiménez Andreu, Mercedes

Director: Cativiela Marín, Carlos

Duración de la beca: Septiembre 2012 - junio 2013

CURSOS DE FORMACIÓN

Cursos

Título: Maths and Chemistry

Responsables: Elduque, Anabel, Tejel, Cristina

Tipo de actividad: Congreso Científico

Entidad convocante: Instituto Universitario de Matemáticas (IUMA) y Facultad de Ciencias (Universidad de Zaragoza)

Número de participantes: 43

Lugar: Facultad de Ciencias. Universidad de Zaragoza. **Fechas:** Junio 2012

Título: Introducción a la caracterización de adsorbentes y catalizadores

Responsables: Laguna, Mariano, Luquín, Asunción

Tipo de actividad: Curso de Postgrado

Entidad convocante: CSIC-Universidad de Extremadura

Número de participantes: 50

Lugar: Jarandilla de la Vera (Cáceres) (España)

Fechas: 5-8 junio

Título: V International School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas

Responsables: Esteruelas, Miguel Angel

Tipo de actividad: Congreso-Escuela

Entidad convocante: Equipo Consolider ORFEO (Convocatoria Consolider Ingenio 2010-Orfeo Team CSD2007-00006

Número de participantes: 120

Lugar: Jaca

Fechas: 2-4 julio de 2012

Título: Curso práctico de manejo de espectrómetros de RMN. Nivel básico

Responsables: Urriolabeitia, Esteban P., Delso, Iñaki

Tipo de actividad: Cursos de postgrado del CSIC

Entidad convocante: CSIC

Número de asistentes: 6 alumnos por 3 ediciones

Lugar: Facultad de Ciencias. Universidad de Zaragoza. Servicio de RMN del CEQMA

Fechas: Febrero 2012; Junio 2012; Noviembre 2012

Duración: 35 h

Título: Curso práctico de manejo de espectrómetros de RMN. Nivel Avanzado

Responsables: Urriolabeitia, Esteban P., Delso, Iñaki

Tipo de actividad: Cursos de postgrado del CSIC

Entidad convocante: CSIC

Número de participantes: 6 alumnos

Lugar: Facultad de Ciencias. Universidad de Zaragoza. Servicio de RMN del CEQMA

Fechas: Abril 2012

Duración: 35 h



Apartado 6. Proyección internacional

Investigación en colaboración con centros extranjeros

Grupo de investigación: Activación Molecular a través de Organometálicos

- Brooklyn College, University of New York (USA)
- University of Newcastle (Reino Unido)

Grupo de investigación: Aminoácidos y Péptidos

- Universidad de Padua (Italia)
- Universidad de Regensburg (Alemania)
- Universidad Autónoma del Estado de Morelos (Méjico)
- Instituto Nacional del Cáncer - NIH (USA)
- Universidad de California Santa Barbara (USA)

Grupo de investigación: Arquitectura Molecular Inorgánica y Aplicaciones

- University of Amsterdam (Holanda)
- Universität Erlangen-Nürnberg (Alemania)

Grupo de investigación: Catálisis Heterogénea en Síntesis Orgánicas Selectivas

- Universität Regensburg (Alemania)

Grupo de investigación: Catálisis Homogénea por Compuestos Organometálicos

- Università dell'Aquila (Italia)
- TU Universität Dortmund (Alemania)
- Westfälische Wilhelms-Universität Münster (Alemania)
- Universidad Nacional Autónoma de México (Méjico)
- King Fahd University of Petroleum & Minerals (Arabia Saudí)
- Academy of Sciences of the Czech Republic (República Checa)
- University of Leeds (Reino Unido)
- Academy of Sciences of the Czech Republic (República Checa)
- Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology (Suiza)
- Universität Göttingen (Alemania)
- Universität Hamburg (Alemania)
- Babes-Bolyai University (Rumania)
- Institut Laue-Langevin (Francia)
- Indian Institute of Technology (India)

Grupo de investigación: Diseño de Compuestos de Coordinación con propiedades de interés

- University of Eastern Finland (Finlandia)
- St-Petersburg, State University (Rusia)

Grupo de investigación: Química Bioorgánica

- TU Dortmund University (Alemania)
- Università degli Studi di Messina (Italia)
- Università degli Studi di Roma Tor Vergata (Italia)
- Università degli Studi di Catania (Italia)
- Università della Calabria (Italia)
- University of Milan (Italia)
- Fondazione Santa Lucia-IRCCS (Italia)
- Institut Parisien de Chimie Moléculaire CNRS (Francia)

Grupo de investigación: Química Inorgánica y de los Compuestos Organometálicos

- ICCOM-CNR U.O.S. di Pisa. Istituto di Chimica dei Composti Organometallici (Italia)
- University of Ioannina (Grecia)

Estancias de investigación en centros extranjeros

Investigador: Luis A. Oro. Profesor Invitado

Centro extranjero: Universidad de Münster, Münster (Alemania)

Fechas de la estancia: Agosto 2012

Investigadora: Ana M^a Geer Ramos

Centro extranjero: Laboratoire de Chimie de Coordination (LCC), CNRS, Toulouse (Francia)

Fechas de la estancia: 1 marzo – 31 mayo 2012

Investigador: Jurgen Bachl

Centro extranjero: Universidad de Regensburg, Regensburg (Alemania)

Fechas de la estancia: 1 marzo - 31 julio 2012

Investigadora: Ana Cristina Miñana Segura: Estancia predoctoral

Centro extranjero: Institut für Organische Chemie, RWTH Aachen University, Aachen, (Alemania)

Fechas de la estancia: 1 mayo – 31 julio de 2012

Investigador: María Batuecas Batuecas

Centro extranjero: Stockholm University. Organic Chemistry Department (Suecia)

Fechas de la estancia: 1 julio - 31 agosto 2012

Investigador: Jurgen Bachl

Centro extranjero: Universidad de Regensburg, Regensburg (Alemania)

Fechas de la estancia: 1 septiembre - 21 diciembre 2012

Investigadora: Elena Atrian Blasco

Centro extranjero: Universidad de Toulouse (Francia)

Fechas de la estancia: 1 de noviembre – 31 diciembre 2012

Investigadora: Aida Gonzalez del Rosal

Centro extranjero: Universidad de Toulouse (Francia)

Fechas de la estancia: 1 de noviembre – 31 diciembre 2012

Estancias de investigadores extranjeros en el Instituto

Grupo de investigación: Aminoácidos y Péptidos

Investigador: Mario Ordóñez Palacios

Centro de procedencia: Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca (Méjico)

Fechas de la estancia: 14 – 29 enero

Investigador: José Luis Viveros Ceballos

Centro de procedencia: Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca (Méjico)

Fechas de la estancia: 3 marzo – 1 agosto

Investigador: José Luis Viveros Ceballos

Centro de procedencia: Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca (Méjico)

Fechas de la estancia: 5 septiembre – 19 diciembre

Grupo de investigación: Diseño de compuestos de coordinación con propiedades de interés

Investigador: Alice Jonson

Centro de procedencia: Universidad de Durhan

Fechas de la estancia: 1 octubre 2011 – 31 marzo 2012

Investigador: Francesco Caddeo

Centro de procedencia: Universidad de Cagliari

Fechas de la estancia: 1 de febrero – 31 de junio

Investigador: Francesco Mateo

Centro de procedencia: Universidad de Cagliari

Fechas de la estancia: 1 de febrero – 31 de junio

Investigador: Mie Højer Vilhelmsen

Centro de procedencia: Universidad de Heidelberg

Fechas de la estancia: 1 noviembre – 31 noviembre

Investigador: Julia R. Shakirova

Centro de procedencia: Universidad de St. Petersburg

Fechas de la estancia: 1 octubre – 31 noviembre

Grupo de investigación: Catálisis Homogénea por Compuestos Organometálicos

Investigador: Jitendra Vera

Centro de procedencia: Indian Institute of Technology, Kanpur (India)

Fechas de la estancia: 17 mayo – 19 mayo

Investigador: Eisen Moris

Centro de procedencia: Israel Institute of Technology. Haifa (Israel)

Fechas de la estancia: 29 junio – 26 julio

Investigadora: Laura Rubio Pérez

Centro de procedencia: Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México

Fechas de la estancia: 1 septiembre 2011 - 30 agosto 2012

Investigador: Juri Möbus

Centro de procedencia: Estudiante predoctoral Universidad de Münster. Münster (Alemania)

Fechas de la estancia: 15 noviembre 2012 - 27 febrero 2013

Grupo de investigación: Química biorgánica

Investigador: Alessandro Melicchio

Centro de procedencia:

Fechas de la estancia: 1 enero 2012 – 29 febrero 2013

Investigadora: Roghayeh Heiran

Centro de procedencia:

Fechas de la estancia: 1 enero – 31 diciembre

Investigadora: Somayeh Mohammad

Centro de procedencia:

Fechas de la estancia: 1 enero – 31 diciembre



Apartado 7. Interacción con la sociedad

Organización de Congresos

5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física de Aragón



Título: 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Química y Física de Aragón

Lugar y fecha: 4 de diciembre de 2012, Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza

Número de participantes: 140

Miembros del comité organizador:

- Presidenta: Dra. María Concepción Gimeno Floria
- Secretario: Dra. María Victoria Jiménez Rupérez
- Tesorera: Dra. Blanca Ros Latienda
- Vocal: Dr. José Ignacio García Laureiro

Las Jornadas de Jóvenes Investigadores de Aragón llevan celebrándose con carácter bienal desde el año 2004 en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza, organizadas por la Sección Territorial de Aragón de la Real Sociedad Española de Química, con la colaboración de la Sección Territorial de Aragón de la Real Sociedad Española de Física y de la propia Facultad de Ciencias. Como las anteriores, la 5ª Jornada de Jóvenes Investigadores (Química y Física) de Aragón está pensada para que los investigadores más jóvenes de los campos de la Química o la Física, den a conocer su labor y, a su vez, sepan lo que hacen sus compañeros. El formato comprende una conferencia invitada, sesiones de pósters y, por primera vez este año, una sesión de presentaciones rápidas (6 minutos), que fueron seleccionadas de entre algunos de los pósters presentados.

Numerosos jóvenes investigadores del Instituto participaron en este congreso, presentando pósters y flash presentaciones. En el comité organizador estaban José Ignacio García, María Victoria Jiménez y Concepción Gimeno, miembros del ISQCH.

Más información del congreso y el libro de abstracts: <http://jjiqfa5.wordpress.com/>

IX Simposio de Investigadores Jóvenes (RSEQ – Sigma-Aldrich)

Título: IX Simposio de Investigadores Jóvenes (RSEQ– Sigma-Aldrich)

Lugar y Fecha: Zaragoza (España), 7–10 noviembre 2012

Número de participantes: 110

Miembros del comité organizador:

- Presidenta: Raquel Pérez Herrera
- Secretaria: Eugenia Marqués-López
- Secretario: Pablo J. Sanz Miguel
- Tesorero: Ignacio Delso Hernández
-

Miembros del comité científico:

- Prof. Jesús Jiménez-Barbero (CIB CSIC Madrid, Presidente de la RSEQ)
- Prof. Pedro J. Pérez (Universidad de Huelva, Secretario General de la RSEQ)
- Javier Márquez (Sigma-Aldrich)
- Dra. Begoña Milián Medina (IMDEA Nanociencia, Presidenta del Grupo Especializado JIQ de la RSEQ)
- Prof.^a Concepción Gimeno Floría (ISQCH CSIC-UZ, Presidenta de la Sección Territorial de Aragón de la RSEQ)
- Dra. Raquel Pérez Herrera (ISQCH CSIC-UZ, Presidenta del Comité Organizador)
- Dra. Eugenia Marqués-López (ISQCH CSIC-UZ, Química Orgánica)
- Dra. Patricia Galán Malo (ZEU-Inmunotec, Bioquímica)
- Dr. Pablo J. Sanz Miguel (ISQCH CSIC-UZ, Química Inorgánica)
- Dr. Victoriano Polo Ortiz (UZ, Química Física)
- Dr. Ignacio Delso Hernández (CEQMA CSIC-UZ, Química Orgánica)

Personal del ISQCH participó en la organización del IX Simposio de Investigadores Jóvenes, concretamente el Dr. Pablo Sanz Miguel, en el comité organizador. Así mismo, varios jóvenes investigadores del Instituto presentaron pósters y comunicaciones orales.

Toda la información del Simposio y el libro completo de abstracts se puede encontrar en la siguiente dirección <http://ixsij.unizar.es/>

Actividades de Divulgación

El personal del Instituto ha participado en la organización y desarrollo de las siguientes actividades.

Semana de Inmersión en Ciencias 2012



La Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza organizó la Semana de Inmersión en Ciencias dirigida a los alumnos de 4º de ESO y 1º de Bachillerato. La actividad consistió en la asistencia de manera continuada de un grupo de alumnos a las actividades de los Departamentos de la Facultad, donde podrán aprender los métodos y peculiaridades del trabajo científico.

Jóvenes investigadores del ISQCH participaron como tutores en la realización de los talleres de la Semana de Inmersión en Ciencias

II Circuitos científicos de la Universidad de Zaragoza y Ciencia Viva

Actividad cofinanciada por la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología (FECYT) del MINECO y el programa Ciencia Viva del Departamento de Educación del Gobierno de Aragón. Los circuitos tuvieron lugar en febrero del 2012, contando con la presencia de alrededor de 600 alumnos de Secundaria del medio rural aragonés en los laboratorios de la Universidad de Zaragoza.

Además, alrededor de 1200 jóvenes asistieron a las charlas impartidas por científicos del campus aragonés en las propias aulas del medio rural en el mes de enero, entre ellas la impartida por Fernando J. Lahoz en Monzón, titulada "Cristalografía de rayos X: hurgando en la estructura de la materia".

Jornada de puertas abiertas de la Facultad de Ciencias

JORNADAS DE PUERTAS ABIERTAS EN LA FACULTAD DE CIENCIAS:
 Dos jueves de cada mes comenzando el 22 de noviembre y hasta el 23 de mayo (excluidos diciembre y enero). Para más información consultar:
<http://ciencias.unizar.es/web/puertasAbiertas.do>

CICLOS DE CONFERENCIAS/EXPOSICIONES:
 De enero de 2012 a octubre de 2013.

VISITAS DE PROFESORES DE LA FACULTAD A CENTROS DE EDUCACIÓN SECUNDARIA:
 De enero a mayo de 2013.

CICLO DE SALIDAS PROFESIONALES DE CIENCIAS:
 De marzo a junio de 2013.

SEMANA DE INMERSIÓN EN CIENCIAS:
 La actividad se llevará a cabo al final del curso 2012/2013.

EDUCACIÓN SECUNDARIA
Programa de Actividades 2012/2013
Para alumnos de 4º de ESO, 1º y 2º de Bachillerato



Más información:
<http://ciencias.unizar.es>
 C/ Pedro Cerbuna, 12
 Campus San Francisco
 50009 Zaragoza
 976 76 12 95



Participación en las ediciones de los cursos 2011/2012 y 2012/2013 de las Jornadas de Puertas Abiertas de la Facultad de Ciencias de Zaragoza incluidas en el Programa de Actividades para Educación Secundaria, con visitas guiadas a la sala de difracción de rayos X y a los laboratorios de química. En la edición 2012/2013 participan 40 institutos.

Noche de los Investigadores – Researchers in real life



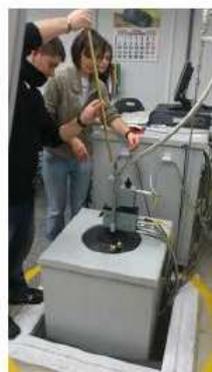
La Noche de los Investigadores 2012, "II Researchers in real life" es un proyecto organizado por Esciencia, Fundación Araid, Universidad de Zaragoza y Consejo Superior de Investigaciones Científicas. El evento tuvo lugar el 28 de septiembre de 2012 en el entorno de la Plaza San Francisco de Zaragoza, con la instalación de varias carpas en las que el personal científico acercó su labor investigadora al público. Personal del ISQCH participó en el evento en el que el Instituto contó con un stand propio. Además, miembros del instituto presentaron charlas científicas de temáticas tan dispares como "Química y cocina" (por Guillermo Lázaro),

"Indol. El señor de los anillos" (Raquel Pérez Herrera), "Dos investigadores en el Everest" (Fernando J. Lahoz) o "Anda, pero si es químico" (José Ignacio Laureiro) y dinamizaron talleres sobre quiralidad "Quiralidad, construye tu molécula en 3D", y polímeros "Polímeros. Fabrica los materiales del futuro" enfocados a participantes de 3 a 10 y de 10 a 18 años, respectivamente.

Proyecto CSI-Zaragoza (FECYT)

Participación en el proyecto CSI Zaragoza, financiado por la Fundación Española para la Ciencia y Tecnología (FCT-12-5402) que tiene como objetivo acercar el método científico a alumnos de educación secundaria y bachillerato. En una primera parte, los alumnos de Bachillerato de 5 institutos, principalmente de Zaragoza tuvieron la oportunidad de convertirse en investigadores y analizar una serie de muestras mediante distintas técnicas experimentales como difracción de rayos X, resonancia magnética nuclear o cromatografía de gases, llevadas a cabo en laboratorios de la Universidad de Zaragoza. En una segunda parte, que tuvo lugar en enero del 2013, alumnos de 10 institutos de educación secundaria participaron en distintos talleres en Ibercaja Zentrum.

Participación en el proyecto CSI Zaragoza, financiado por la Fundación Española para la Ciencia y Tecnología (FCT-12-5402) que tiene como objetivo acercar el método científico a alumnos de educación secundaria y bachillerato. En una primera parte, los alumnos de Bachillerato de 5 institutos, principalmente de Zaragoza tuvieron la oportunidad de convertirse en investigadores y analizar una serie de muestras mediante distintas técnicas experimentales como difracción de rayos X, resonancia magnética nuclear o cromatografía de gases, llevadas a cabo en laboratorios de la Universidad de Zaragoza. En una segunda parte, que tuvo lugar en enero del 2013, alumnos de 10 institutos de educación secundaria participaron en distintos talleres en Ibercaja Zentrum.



Actividades con alumnos de bachillerato

Semana de la Ciencia y la Energía del CSIC

Del 6 al 13 de noviembre de 2012 se celebra la "SEMANA DE LA CIENCIA Y LA ENERGÍA EN EL CSIC DE ARAGÓN" que tendrá lugar en la Delegación del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) en Aragón.



La Semana de la Ciencia se suma a la conmemoración del Año Internacional de la Energía Sostenible para Todos ofreciendo una valiosa oportunidad para profundizar en la toma de conciencia sobre la importancia de incrementar el acceso sostenible a la energía, la eficiencia energética y la energía renovable en el ámbito local, nacional, regional e internacional.

Durante la celebración de la Semana de la Ciencia contamos con la exposición científica "LA ENERGÍA NOS MUEVE", y con el desarrollo de diversos talleres didácticos, experimentos, charlas, y pequeñas demostraciones científicas.

El objetivo principal de esta Semana es acercar la ciencia y la tecnología a la sociedad.

Conferencias de divulgación científica

Autor: José Ignacio García Laureiro

Título: Biocombustibles: una transición sostenible del petróleo a las energías limpias

Institución: Ibercaja Zentrum, 19 noviembre 2012 (ciclo organizado por el CSIC en el Año Internacional de la Energía Sostenible para Todos)

Autor: José Ignacio García Laureiro

Título: Biocombustibles: presente y futuro

Institución: Centro Cultural Caja Rioja, 29 noviembre 2012 (dentro de las actividades de Divulgaciencia, programa de la Fundación Caja Rioja)

Autor: Raquel Pérez Herrea

Título: The Lord of the Ring

Institución: Esciencia, Fundación Araid, Universidad de Zaragoza y Consejo Superior de Investigaciones Científicas. La noche de los investigadores. 28 septiembre

Publicaciones en prensa

Autor: Luis A. Oro Giral

Título: Un gran pacto de Estado en I+D+i

Publicación: El País. La Cuarta página, 21 diciembre 2012

Autora: A. Elduque

Título: Tiempos nuevos

Publicación: conCIENCIAS.digital nº9, mayo 2012, pág. 72, Ed. Facultad de Ciencias-Universidad de Zaragoza. Depósito Legal: Z-1942-08, ISSN: 1888-7848

Autora: A. Elduque

Título: Un aniversario para meditar

Revista: conCIENCIAS.digital nº10, noviembre 2012, pág. 84, Ed. Facultad de Ciencias-Universidad de Zaragoza. Depósito Legal: Z-1942-08, ISSN: 1888-7848.

Autor: Eduardo Sola Larraya

Título: Catalizadores: la química limpia toma forma

Publicación: Sección Tercer Milenio, Heraldo de Aragón, 20 Marzo 2012

Autora: Alicia Arizpe Santiago

Título: Diseño y síntesis de aminoácidos: nuevas rutas con aplicaciones biológicas

Publicación: Sección Tercer Milenio, Heraldo de Aragón, 7 febrero 2012

Blog de divulgación

En abril de 2012 se puso en marcha desde el instituto un blog de divulgación sobre temas de química que se bautizó como "moléculas a reacción" (<http://isqch.wordpress.com>). El personal investigador del instituto participa con entradas que abordan temas muy diferentes, pero siempre en un nivel divulgativo, asequible al público en general. Durante 2012 se publicaron 39 entradas, que recibieron más de 19.000 visitas.