

Instituto Universitario de Investigación Mixto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea



Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea

MEMORIA ACTIVIDADES 2017

ÍNDICE

Introducción	3
Apartado 1. Estructura organizativa y recursos humanos.....	8
1.1 Equipo directivo y áreas de organización	
1.2 Recursos Humanos	
Apartado 2. Líneas de investigación y grupos de investigación.....	18
Apartado 3. Estructura de financiación.....	62
Apartado 4. Actividad Científica, Innovadora y Tecnológica	67
4.1 Proyectos	
Proyectos de carácter internacional	
Proyectos de convocatorias nacionales	
Proyectos de convocatoria autonómicas	
Proyectos con empresas	
4.2 Publicaciones	
Capítulos de libros	
Artículos	
4.3 Comunicaciones a congresos	
Conferencias invitadas	
Comunicaciones orales	
Comunicaciones posters	
4.4 Conferencias impartidas en el ISQCH	
4.5 Pertenencia a comités	
4.6 Patentes	
Apartado 5. Formación.....	102
Docencia en Másteres	
Docencias en Primer y Segundo Ciclo	
Tesis doctorales, TFM y TFG	
Cursos de formación impartidos	
Apartado 6. Proyección Internacional	113
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.....	116



Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea



Introducción

El 5 de Abril de 2011 se firmaba el convenio de creación del ISQCH. Han pasado, por tanto, casi 7 años del arranque de nuestro instituto. Durante este tiempo el ISQCH ha acometido retos importantes en distintas áreas, complementarias a la investigación propiamente dicha, para establecer y afianzar la estructura organizativa y de funcionamiento que permita considerar al ISQCH como el instituto de investigación de referencia, estable y competitivo, en el ámbito de la Química en nuestra comunidad autónoma.

Creemos ser completamente objetivos si afirmamos que durante este período el iSQCH ha mantenido un excelente nivel de generación de conocimiento científico, a pesar de los recortes económicos padecidos tanto en financiación de proyectos como en las ayudas para la incorporación de jóvenes investigadores pre- y post-doctorales. Sin duda, las aportaciones científicas realizadas en este periodo hacen que el ISQCH siga siendo considerado en la élite internacional de la síntesis química y de la catálisis.

El Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea ha venido realizando su labor como centro generador y trasmisor de conocimiento científico tratando de mantener sus líneas de trabajo de excelencia, modificando aquellas de menor impacto hacia temas de mayor interés social y, por tanto, de más fácil financiación, y, adicionalmente, incorporando nuevas líneas complementarias que refuercen las ya existentes.

El ISQCH ha mantenido y mantiene plenamente operativos los objetivos científicos y tecnológicos que se recogieron en su documento de creación, líneas directrices de la actividad de sus investigadores y de las decisiones de gestión de su Dirección. Entre estos objetivos cabe recordar:

- Promover la excelencia científica, reforzando y consolidando el marco de investigación existente.
- Contribuir al progreso de la investigación científica y al desarrollo tecnológico en Ciencias y Tecnologías Químicas con una dimensión internacional.
- Coordinar la investigación con sus vertientes prácticas de aplicación en los campos antes citados, estimulando la innovación en aquellos resultados que lo posibiliten.
- Promover la conexión de la investigación con la sociedad, para tratar de demostrar los beneficios de adoptar una gestión basada en el conocimiento científico.
- Estimular y participar activamente en la formación de personal investigador y apoyar la intensificación de la docencia en el contexto universitario de la UZ.
- Aprovechar su reconocimiento internacional para potenciar las relaciones con otros centros nacionales e internacionales tratando de lograr una integración mayor en el Espacio Europeo de Investigación.
- Incentivar y afianzar la cooperación con el sector industrial y los agentes económicos y sociales, desarrollando servicios y mecanismos de transferencia de tecnología precisos y efectivos.

Como es preceptivo, en esta memoria se presenta, de forma resumida, la actividad desarrollada por el Instituto en el año 2017. Se describe la estructura del instituto, las líneas y grupos de investigación, la producción científica, las actividades realizadas en el ámbito de la formación y de la divulgación científica, así como la captación de fondos, tanto de convocatorias públicas competitivas, como a través de contratos o proyectos con empresas privadas.

Como acostumbramos a hacer en todas las memorias, previamente a recoger los datos requeridos de manera detallada, comentamos a continuación algunos de los hitos acontecidos en 2017, tanto en el plano científico, como en los planos de gestión y reconocimiento científico, que creemos más representativos y destacables de la actividad de nuestro instituto.

Decir, antes que nada, que la calidad y cantidad de la producción científica del Instituto se mantiene en términos análogos a años anteriores. En 2017, los investigadores del ISQCH han publicado 109 trabajos referenciados en base de datos internacionales (JCR), con más del 70 % de estos trabajos en revistas de reconocido prestigio, presentes en el primer cuartil de las distintas áreas de trabajo; 14 de estos trabajos han sido publicados en las revistas de referencia en

Química, en particular en revistas de índice de impacto superior a 6.0.

Si la producción científica puede calificarse de excelente en términos de calidad y cantidad, no lo es menos la progresión en la conexión del iSQCH con el sector empresarial. En 2017, los investigadores del ISQCH han mantenido activos 20 iniciativas de transferencia de conocimiento al sector productivo, 20 proyectos de colaboración con la empresa que incorporan una financiación que supera los 600.000 €. Adicionalmente, fruto de esta labor, se debe destacar la solicitud de 4 nuevas patentes, dos de ellas internacionales (USA), dos en el ámbito nacional.

A pesar de esta excelente interacción con la empresa, el iSQCH mantiene su interés por dar a conocer su potencial y sus capacidades a la empresa, y potenciar este tipo de interacciones en el ámbito de la Química en el contexto de nuestra autonomía. Con este objetivo, de la mano de Confederación de Empresarios de Aragón (CEOE Aragón) y de la Federación de Empresas Químicas y de Plásticos de Aragón (FEQPA), el ISQCH se aventuró en 2017 en la organización de QUIMIARAGON, foro de intercambio de experiencias entre el ámbito científico y el empresarial del sector de la industria química aragonesa. Este foro busca tender puentes y crear sinergias para estimular la creación de colaboraciones que puedan incentivar y agilizar la innovación en el sector de la industria química aragonesa. Finalmente, más de 70 personas, representantes de distintos centros de investigación de nuestra comunidad y colegas de 22 empresas químicas, se reunieron en QUIMIARAGON generando valoraciones muy positivas y poniendo de manifiesto la necesidad de mantener y ampliar este tipo de iniciativas. Esperemos ser capaces de catalizar futuras ediciones de este foro, ampliando la participación de empresas e investigadores.



Un proyecto en el que una buena parte de los investigadores del ISQCH se han involucrado de manera intensa desde el arranque de las actividades del ISQCH ha sido el Master en 'Química Molecular y Catálisis Homogénea', máster oficial universitario promovido por el ISQCH y que tuvo su primera edición en el curso 2014-2015. Tras dos años con números de alumnos un tanto reducidos, lo que hizo que se cuestionara la adecuación de la temática o la estructura del máster, el curso 2017 ha significado un soporte claro a la calidad y a la bondad de la propuesta. Una veintena de alumnos, con varios alumnos de otras universidades españolas, se han matriculado en este proceso formativo. Esta circunstancia, creemos, pone de manifiesto el incipiente reconocimiento en nuestro entorno, y también fuera de nuestro ámbito regional, que comienza a tener esta iniciativa. Con ánimo e ilusión seguimos trabajando de manera crítica para hacer de este máster un proceso formativo útil en la preparación de profesionales capaces de incorporarse al sector de I+D de la empresa o del ámbito académico.

Una de las líneas de trabajo iniciadas para mejorar la competitividad de nuestro Instituto y que ha dado frutos en 2017, es el tratar de incrementar la participación de los investigadores del ISQCH en proyectos europeos. Con distintos altibajos, los investigadores de nuestro instituto han participado en proyectos europeos de manera esporádica, pero sin un convencimiento claro de las oportunidades que éstos ofrecen. En el pasado año, hay que destacar la implicación de distintos grupos de investigación del ISQCH en 4 proyectos europeos y en una acción COST que

esperemos cristalice en una iniciativa de cierta envergadura. A destacar el proyecto STARCELL, por su montante próximo a los 5 millones de euros y sus objetivos científicos ambiciosos: recuperar las limitadas materias primas de los materiales fotovoltaicos. Los investigadores del ISQCH asumen en esta iniciativa la parte científica de la recuperación de dos metales, tántalo y niobio, estratégicos en esta área tecnológica. Esperamos seguir dando pasos en esta incorporación de nuestros investigadores a este tipo de iniciativas.

A pesar de todos los hitos anteriormente destacados, quizás uno de los de mayor relevancia, por su impronta de futuro para nuestro Instituto ha sido la incorporación, con cierta estabilidad temporal, de dos jóvenes científicos con una destacada trayectoria investigadora. El pasado mes de septiembre, se unía al ISQCH, el Dr. Manuel Iglesias, como investigador Ramón y Cajal de la pasada convocatoria. El Dr. Iglesias atesora una amplia experiencia en el estudio de nuevas especies catalíticas, implicando ligandos carbeno u olefinas N-heterocíclicas, especies novedosas de claro interés en la funcionalización de moléculas orgánicas. Estamos seguros que esta incorporación al ISQCH potenciará nuevas líneas en el campo de la catálisis homogénea, incorporando nuevas ideas y un mayor dinamismo al instituto.

Otro fichaje, si se me permite la expresión, de destacado talento joven ha sido la incorporación al ISQCH, a través del programa ARAID, del Dr. Fernando López. El Dr. López acumula una amplia experiencia profesional de más 10 años postdoctorales en entornos académicos (CSIC, Univ. Minnesota, CIC BiomaGUNE) e industriales (REPSOL Petróleo), trabajando en un área que complementa las líneas catalíticas de nuestro instituto. La catálisis enzimática o, en general la biocatálisis, trata de explotar los tremendos potenciales catalíticos en procesos complejos de los sistemas biológicos; es en esta temática en la que el Dr. López desarrolla su investigación con un nivel de excelencia más que destacado (más de 1800 citas a sus trabajos, 85% en Q1). Tanto la incorporación de la temática desarrollada por el Dr. López, como su dinamismo y las previsibles sinergias con otros grupos, deben reforzar el potencial de nuestro instituto en los próximos años.

Si bien el desarrollo al más alto nivel de nuestras tareas de investigación focaliza nuestra actividad, no debemos, ni queremos olvidar, que es necesario el trasladar a la sociedad los hitos de nuestra actividad como juez último de la bondad de nuestra labor. El ISQCH mantiene un elevado dinamismo en estas tareas de proyección social de nuestro instituto, programando de manera continua actividades de divulgación y difusión de la Ciencia en general, de la Química y la Catálisis en particular. Programas como “De copas con Ciencia”, que lleva de manera divulgativa la Ciencia desarrollada en el ISQCH a los bares, el concurso de “Cristalización en la Escuela”, que introduce el método científico de manera motivante en las aulas de la enseñanza secundaria, o la plataforma para teléfonos móviles “Hi Score Science”, representan la parte más visible de un conjunto de acciones que tratan de acercar la realidad de nuestro instituto a los más jóvenes o a la ciudadanía en general.

El buen hacer y la probada trayectoria del ISQCH en estos temas de divulgación y difusión de la Ciencia han hecho que, muy recientemente, a finales del 2017, la FECYT, reconociera a nuestra Unidad de Cultura Científica como Unidad de Cultura Científica y de la Innovación (UCC+), fundamentalmente, según manifiesta FECYT, por su trabajo en el fomento de la cultura científica, tecnológica y de la innovación a través de diversas actividades. Sin duda este reconocimiento abre nuevas puertas para facilitar nuestras tareas de difusión de la Ciencia.

No podemos cerrar este listado de pequeños grandes hitos del año 2017, sin remarcar el reconocimiento que la comunidad científica internacional hacía manifiesto a nuestra compañera, la profesora Conchita Gimeno, al calificarla como una de las 12 mejores químicas del mundo. El pasado mes de Julio en Sao Paulo (Brasil) nuestra compañera recibía el premio de la *International Union of Pure and Applied Chemistry* con el reconocimiento “*Distinguished Women in Chemistry*”. Cada dos años esta asociación, de envergadura mundial, que aglutina la mayoría de asociaciones científicas, empresas y centros públicos y privados de investigación de todo el mundo en el ámbito de la Química, reconoce la excelencia, la trayectoria y el liderazgo de 12 mujeres. En la presente edición, la profesora Gimeno, compartió premio con dos americanas, dos chinas y una representante de Japón, Alemania, Rusia, Brasil, Suiza, Puerto Rico y Australia. Este premio

reconoce la excelencia de nuestra compañera y su trabajo serio e innovador desarrollado a lo largo de su destacada carrera.



Aunque quizás no sea el lugar más adecuado, pero queremos acabar esta breve introducción, remarcando uno de nuestros retos, todavía pendientes en nuestro instituto y que requiere la comprensión de nuestra administración. El funcionamiento suave, de producción constante y creativa de nuestros grupos de investigación se fundamenta obviamente en la capacidad de nuestros investigadores, pero requiere, necesita, de unos servicios de apoyo científico técnico que posibilite la dedicación de los investigadores a sus tareas propias. Nuestro instituto se enorgullece de tener los servicios que necesita para dar soporte adecuado a las líneas de investigación actuales de manera razonable, disfruta de jóvenes técnicos con capacidad e ilusión que los mantiene competitivos, en algunos casos, servicios de referencia a nivel estatal, para investigadores y empresas.

Sin embargo, y este es nuestro reto, estas valiosas personas, estos valioso servicio cuelgan de un débil hilo cual es la inestabilidad de nuestro personal. La investigación de calidad se sustenta en investigadores de excelencia, soportados por servicios de excelencia, dirigidos por técnicos también de excelencia. Este sistema de 'excelencia' requiere necesariamente una estabilidad de los recursos humanos y materiales; ahí andamos trabajando para solventar este reto.

Apartado 1. Estructura organizativa y recursos humanos



1.1 Equipo directivo y áreas de organización

1.1 Equipo directivo

Director

Fernando J. Lahoz Díaz (Profesor de investigación del CSIC)

Vicedirectora

María Concepción Gimeno Floría (Profesora de investigación del CSIC)

Vicedirector

Jesús J. Pérez Torrente (Catedrático de la Universidad de Zaragoza)

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 semejantes. Dentro de cada uno de estos Departamentos se localizan las verdaderas unidades de trabajo que constituyen los Grupos de Investigación.

Es de destacar que la estructura organizativa del ISQCH, basada sobre los Grupos de Investigación, hace coincidir, hasta el momento actual, 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:

Química de oro y plata
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
Organocatálisis Asimétrica

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 ISQCH, como Instituto de Investigación Mixto acreditado está integrado por investigadores que pertenecen a la Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) y a la Universidad de Zaragoza (UZ). En las siguientes tablas se presenta un resumen numérico del personal del ISQCH mostrando su estructura y procedencia.

Los valores consignados hacen referencia al número de investigadores en equivalente a jornada completa (EJC), normalizado teniendo en cuenta las dedicaciones que no han tenido una duración completa en el año físico de 2017.

UZ	Doctores	No Doctores	Total
PDI	46	23,24	69,24
PTL	1	0	1
PA	0	0,9	0,9
Total	47	24,14	71,14
CSIC	Doctores	No Doctores	Total
Investigadores	29,42	34,08	63,5
PTL	0,9	2,7	3,6
PA	0	2,81	2,81
Total	30,32	39,59	69,91
ARAID	Doctores	No Doctores	Total
PDI	0,249	0	0,249
CUD	Doctores	No Doctores	Total
PDI	0	0	0
Investigadores	2	0	2
Total	2	0	2

TOTAL ISQCH	Doctores	No Doctores	Total
PDI	46,249	23,24	69,49
Investigadores	31,42	34,08	65,5
PTL	1,9	2,7	4,6
PA	0	3,71	3,71
Total	79,569	63,73	143,30

¹El personal del CEQMA se ha imputado al ISQCH en un 45%, la misma proporción que representa el personal fijo permanente del ISQCH respecto del personal fijo permanente total de ambos Institutos (ICMA e ISQCH).

Personal iSQCH 2017

1er Apellido	2º Apellido	Nombre	Organismo	Vínculo	Titulación	EJC
Abás	Benedí	Elisa	UZ	CTR-Proy	No doctor	1
Abril	Galve	Paula	CSIC	CTR-Proy	No doctor	1
Alegre	Requena	Juan Vicente	CSIC	CTR-DGA-Pre	No doctor	1
Aliaga	Lavrijsen	Melanie	CSIC	CTR-FPI	No doctor	1
Angulo	Cabeza	Beatriz	CSIC	Per-Est	No doctor	1
Ara	Laplana	Irene Victoria	UZ	TU	Doctor	1
Auría	Luna	Fernando	CSIC	Per-Est	No doctor	1
Babón	Molina	Juan Carlos	UZ	CTR-Proy	Grad Univ	1
Badorrey	Miguel	Ramón Angel	UZ	TU	Doctor	1
Bajo	Velázquez	Sonia	CSIC	CTR-Proy	No doctor	1
Baya	García	Miguel	UZ	P-CTR-Doctor	Doctor	1
Blanco	Ortiz	Mª del Carmen	CUD	Doctor-VINC	Doctor	1
Bøge		Matthias Dirk	CSIC	Per-Est	Doctor	0,167
Bravo	Peña	José Luis	UZ	ADM	No doctor	1
Buceta	Jiménez	Alicia	CSIC	CTR-DGA-Pre	No doctor	1
Buil	Juan	Mª Luisa	UZ	P-CTR-Doctor	Doctor	1
Calaza	Cabanas	Isabel	UZ	P-CTR-Doctor	Doctor	1
Campillo	Pérez	David	UZ	CTR-Proy	Grad Univ	0,972
Cancela	Cancela	Lara	UZ	CTR-Proy	Grad Univ	0,282
Carmona	Gascón	José Daniel	CSIC	PIN	Doctor	1
Carmona	Esteban	María	CSIC	CTR-DGA-Pre	No doctor	1
Carrera	Jiménez	Clara	UZ	CTR-Proy	Grad Univ	0,142
Casado	Lacabra	Miguel Angel	UZ	P-CTR-Doctor	Doctor	1
Casas	del Pozo	José María	UZ	TU	Doctor	1
Castán	Nadal	Alejandro	CSIC	Per-Est	No doctor	1
Castarlenas	Chela	Ricardo	CSIC	CT	Doctor	1
Castel	Pérez	Javier	CSIC	Ctr-TitSup-Tec	No doctor	1
Bruno de Castillo	Martínez	Agustín I	CSIC	Per-Est	Est	0,230
Cativiela	Marín	Carlos	UZ	CU	Doctor	1
Cerrada	Lamuela	Elena	UZ	TU	Doctor	1
Chueca	López	Andrés José	CSIC	CTR-FPI	No doctor	1
Ciriano	López	Miguel Angel	CSIC	PIN	Doctor	1
Crespo	Zaragoza	Olga	UZ	TU	Doctor	1
Díaz de Villegas	Solans	Mª Dolores	CSIC	INV	Doctor	1
Dorado	Horrillo	Vicente	CSIC	CTR-FPI	No doctor	1
Elduque	Palomo	Ana Isabel	UZ	CU	Doctor	1
Esteban	Pérez	Montserrat	UZ	CEU	Doctor	1
Esteruelas	Rodrigo	Miguel Angel	CSIC	PIN	Doctor	1
Fernández	Moreira	Vanesa	CSIC	CTR-Proy	Doctor	1
Fernández	Álvarez	Francisco José	UZ	P-CTR-Doctor	Doctor	1
Ferrer	Cerra	Joaquina	UZ	TU	Doctor	1
Forniés	Gracia	Juan	UZ	Col-Ext	Doctor	1
Fortuño	Turmo	Consuelo	UZ	TU	Doctor	1
Fraile	Dolado	José María	CSIC	INV	Doctor	1
Fuertes	Lorda	Sara	CSIC	CTR-Proy-Doctor	Doctor	1
Galiana	Cameo	María	UZ	CTR-Proy	No doctor	0,699
Galván	Curto	Sheila	UZ	CTR-Proy	No doctor	1
Gálvez	Lafuente	José Antonio	UZ	TU	Doctor	1
García	Orduña	Mª Pilar	CSIC	CTR-Proy-Tec	Doctor	1

García	Laureiro	José Ignacio	CSIC	PIN	Doctor	1
García	Yebra	M ^a Cristina	UZ	P-CTR-Doctor	Doctor	1
Gil	Ferrás	Ana M ^a	UZ	CTR-Proy-Doctor	Doctor	1
Giménez	Sonsona	Isaac	CSIC	Ctr-TitSup-Tec	No doctor	1
Gimeno	Floría	M ^a Concepción	CSIC	PIN	Doctor	1
Gimeno	Prat	Antonio	CSIC	CTR-Proy	No doctor	0,972
Giuseppe		Andrea Di	UZ	CTR-JdIC	Doctor	1
Gómez	Bautista	Daniel	UZ	CTR-Proy	No doctor	1
González	Laínez	Miguel	UZ	CTR-FPI	No doctor	1
González	del Rosal	Aida	CSIC	Per-Est	No doctor	1
Gracia	Vitoria	Jaime	UZ	CTR-DGA-Pre	No doctor	1
Guzmán	Velasco	Jefferson	UZ	CTR-Proy	Grad Univ	0,504
Hermosilla	Fernández	Pablo Simón	UZ	CTR-FPI	No doctor	0,671
Herrerías	Larripa	Clara Isabel	UZ	TU	Doctor	1
Hormigón	Ausejo	Zoel	UZ	CTR-DGA-Pre	No doctor	1
Iglesias	Alonso	Manuel	UZ	CTR-Proy-Doctor	Doctor	1
Iglesias	Nicasio	Antonio	CSIC	CTR-FPI	No doctor	1
Iturmendi	Urrutia	Amaia	UZ	CTR-Proy	No doctor	1
Jiménez	Villar	Josefina	UZ	TU	Doctor	1
Jiménez	Rupérez	M ^a Victoria	CSIC	CT	Doctor	1
Jiménez	Sanz	Ana Isabel	CSIC	CT	Doctor	1
Jiménez	AnDoctoreu	Mercedes	UZ	CTR-DGA-Pre	No doctor	1
Johnson		Alice	CSIC	CTR-FPI	No doctor	1
Joven	Sancho	Daniel	CSIC	CTR-FPI	No doctor	1
Julián	Arrese	Alejandro	UZ	CTR-Proy	No doctor	1
Juste	Navarro	Verónica	UZ	CTR-FPI	No doctor	1
Laguna	Castrillo	Antonio	UZ	Prof-Emerito	Doctor	1
Laguna	Castrillo	Mariano	CSIC	PIN	Doctor	1
Lahoz	Díaz	Fernando José	CSIC	PIN	Doctor	1
Lamata	Cristóbal	M ^a Pilar	UZ	CU	Doctor	1
Latre	Morales	Beatriz	CSIC	CTR-Proy-Tec	No doctor	1
Leal	Duaso	Alejandro	CSIC	CTR-FPU	No doctor	1
López	Ram de Viu	M ^a Pilar	UZ	TU	Doctor	1
López	de Lama	Ana Margarita	UZ	CU	Doctor	1
López	Calvo	José Antonio	UZ	TU	Doctor	1
López	Gallego	Fernando	UZ	I-C-ARAID	Doctor	0,249
Luengo	Baranguan	Andrés José	CSIC	CTR-DGA-Pre	No doctor	1
Luna	Jordán	Coral	CSIC	Ctr-TecSup	FP II	1
Macías	Maza	Ramón	UZ	P-CTR-Doctor	Doctor	1
Mahía	Moros	Alejandro	CSIC	Per-Est	No doctor	1
Marqués	López	M ^a Eugenia	UZ	P-CTR-Doctor-Interciclos	Doctor	1
Martín	Tello	Antonio Jesús	CSIC	INV	Doctor	1
Martín	Casado	Marta	CSIC	CT	Doctor	1
Martín	González	Jaime	UZ	CTR-Proy	No doctor	1
Martínez	Gutiérrez	Antonio	UZ	CTR-Proy	Grad Univ	1
Mayoral	Murillo	José Antonio	UZ	CU	Doctor	1
Medina	Morales	José Fernando	CSIC	Ctr-TecSup	FP II	1
Menjón	Ruiz	Babil	CSIC	INV	Doctor	1
Merchán	Alvarez	Francisco Luis	UZ	Prof-Emerito	Doctor	1
Modrego	Pérez	Francisco Javier	UZ	TU	Doctor	1
Mora	Paniagua	Erik	UZ	CTR-Proy	No doctor	1

Moreno	Carrasco	Alberto	CSIC	CTR-FPI	No doctor	0,972
Munárriz	Tabuenca	Julen	UZ	CTR-FPU	No doctor	1
Navarro	Martín	Rafael	UZ	Prof-Emerito	Doctor	1
Navarro	Fuenmayor	Janeth	CSIC	Per-Est	Doctor	1
Ojeda	Amador	Ana Isabel	CSIC	CTR-Proy	No doctor	0,252
Oliván	Escó	Montserrat	CSIC	CT	Doctor	1
Oñate	Rodríguez	Enrique	CSIC	CT	Doctor	1
Oro	Giral	Luis Antonio	UZ	Prof-Emerito	Doctor	1
Osante	García	Iñaki	CSIC	Per-Est	Doctor	1
Palmese		Marco	UZ	CTR-Proy	No doctor	0,972
Pardina	Morlanes	Elena	CSIC	Ctr-TecSup	FP II	1
Passarelli		Vincenzo	CUD	Doctor-VINC	Doctor	1
Pérez	Torrente	Jesús Julián	UZ	CU	Doctor	1
Pérez	Herrera	Raquel	CSIC	CT	Doctor	1
Pérez	Bitrián	Alberto	UZ	CTR-FPU	No doctor	1
Pires	Ezquerro	Mª Elisabet	UZ	TU	Doctor	1
Río	Varea	Mª Pilar del	CSIC	CTR-Proy	Doctor	1
Rodríguez	Martínez	Ricardo	UZ	RyC	Doctor	1
Romera	Ariño	Pablo	CSIC	Per-Est	Est	0,115
Sádaba	Mendoza	David	UZ	CTR-Proy	Doctor	1
Salvador	Gil	Daniel	CSIC	Ctr-TitSup-Tec	No doctor	1
Salvatella	Ibáñez	Luis	UZ	TU	Doctor	1
San Torcuato	Sanz	Ainhoa	UZ	CTR-Proy	No doctor	1
Sánchez	Martínez	Sara	CSIC	Per-Est	Est	0,172
Sánchez	Burillo	Irene	CSIC	CTR-DGA-Pre	No doctor	1
Sánchez	Page	Beatriz	UZ	CTR-Proy	No doctor	1
Sancho	Gracia	Sofía	CSIC	CTR-Proy-Tec	Doctor	1
Sanz	Miguel	Pablo José	UZ	P-CTR-Doctor	Doctor	1
Sanz	Sanz	Ignacio	CSIC	Ctr-TecSup	FP II	1
Sayago	García	Francisco Javier	UZ	P-CTR-Doctor-Interino	Doctor	1
Sicilia	Martínez	Violeta	UZ	TU	Doctor	1
Sola	Larraya	Eduardo	CSIC	INV	Doctor	1
Suárez	Flores	Elizabeth	CSIC	CTR-FPI	No doctor	1
Tejedor	Recio	Leyre	CSIC	Ctr-TitSup-Tec	No doctor	1
Tejel	Altarriba	Mª Cristina	CSIC	INV	Doctor	1
Tejero	López	Tomás	UZ	CU	Doctor	1
Téllez	Castañeda	Juan	CSIC	Ctr-TitSup-Tec	No doctor	1
Tomás	Lisbona	Milagros	CSIC	INV	Doctor	1
Trujillo	Rodríguez	Alejandra María	CSIC	CTR-Proy	No doctor	0,252
Urriolabeitia	Arrondo	Esteban Pablo	CSIC	INV	Doctor	1
Varela	Izquierdo	Víctor	CSIC	CTR-FPI	No doctor	1
Velasco	Lozano	Susana	CSIC	Per-Est	Doctor	0,252
Viguri	Rojo	Fernando	UZ	TU	Doctor	1
Villacampa	Pérez	Mª Dolores	UZ	TU	Doctor	1
Villarroya	Aparicio	Beatriz Eva	UZ	TU	Doctor	1
Vispe	Palacín	Eugenio	UZ	Ctr-TitSup-Tec	Doctor	1
Wilkinson		Eden-Taylor	CSIC	Per-Est	Est	0,110
					Total	136.985

Personal CEQMA 2017

1er Apellido	2º Apellido	Nombre	Organismo	Vínculo	Formación	EJC
Martínez	Ruiz	Marisol	CSIC	AYI	No doctor	1
Marco	Pérez	Concepción	CSIC	ADM	No doctor	1
Lahoz	Espinosa	Ruth	CSIC	TecSupEsp_OPIs	Doctor	1
Delso	Hernández	José Ignacio	CSIC	TecSupEsp_OPIs	Doctor	1
Pérez	Montañés	M ^a Pilar	CSIC	ADM	No doctor	1
Sarto	Asensio	M ^a Dolores	UZ	ADM	No doctor	1
Lloret	Barrachina	José	CSIC	CºGestSI_AGE	No doctor	1
Sierra	Lite	Ana Cristina	CSIC	ADM	No doctor	1
Cortés	Viamonte	Ana Reyes	CSIC	ADM	No doctor	1
Pueyo	Marcial	Alejandro	CSIC	Ctr-TecSup	No doctor	1
Segura	Pueyo	Pablo	CSIC	Ctr-TecSup	No doctor	1
Márquez	Ortiz	M ^a Dolores	CSIC	TecEsp_OPIs	No doctor	1
Tacchini	Ciudad	Ignacio	CSIC	AYI	No doctor	1
Benito	Canto	Carmen Patricia	CSIC	CTR-Proy-Lcd	No doctor	0,252
Estepa	Millán	Luis Carlos	CSIC	TecEsp_OPIs	No doctor	1
Gil	Andaluz	Miguel Angel	CSIC	TecSup	No doctor	1
					Total	15,252

Altas, bajas y modificaciones producidas durante 2017
Captación de recursos humanos

Incorporación de investigadores/personal técnico de laboratorio al ISQCH durante 2017, como resultado de convocatorias de carácter público y concurrencia competitiva de ámbito autonómico, nacional o internacional.

1º Apellido	2º Apellido	Nombre	Entidad	Tareas	Convocatoria/Programa	Fecha de alta
Benito	Canto	Carmen Patricia	CSIC	Administrativa	Contrato de Garantía Juvenil del CSIC - Gº 1	01/10/2017
Ojeda	Amador	Ana Isabel	CSIC	Investigación	Contrato de Garantía Juvenil del CSIC - Gº 1	01/10/2017
Paterna	Navas	Azahara	CSIC	Investigación	Contrato de Garantía Juvenil del CSIC - Gº 1	01/10/2017
Trujillo	Rodríguez	Alejandra María	CSIC	Investigación	Contrato de Garantía Juvenil del CSIC - Gº 1	01/10/2017
Castillo	Vallés	Martín	CSIC	Investigación	CTR-FPI	26/10/2015
Joven	Sancho	Daniel	CSIC	Investigación	CTR-FPI	01/10/2016
Moreno	Carrasco	Alberto	CSIC	Investigación	CTR-FPI	16/04/2017
Robles	Fernández	Adrián	CSIC	Investigación	CTR-FPI	16/04/2017
Begué	Gracia	Adrián	CSIC	Investigación	CTR-FPI	16/12/2016
Hermosilla	Fernández	Pablo Simón	UZ	Investigación	CTR-FPI	01/05/2017
Soria	Carrera	Héctor	CSIC	Investigación	CTR-FPU	16/08/2016

Altas (referidas a personal no permanente)

1er Apellido	2º Apellido	Nombre	Organismo	Formación	Vinculación	Categoría
Abril	Galve	Paula	CSIC	No doctor	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Babón	Molina	Juan Carlos	UZ	No doctor	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Böge		Matthias Dirk	CSIC	Doctor	Investigadora	Per-Est
Campillo	Pérez	David	UZ	No doctor	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Cancela	Cancela	Lara	UZ	No doctor	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Carrera	Jiménez	Clara	UZ	No doctor	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Casas	del Pozo	José María	UZ	Doctor	Investigadora	TU
Castán	Nadal	Alejandro	CSIC	No doctor	Investigadora	Per-Est
Castillo	Martínez	Agustín Bruno del	CSIC	No doctor	Técnica	Per-Est
Fernández	Moreira	Vanesa	CSIC	Doctor	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Forniés	Gracia	Juan	UZ	Doctor	Investigadora	Col-Ext
Gimeno	Prat	Antonio	CSIC	No doctor	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Giuseppe		Andrea Di	UZ	Doctor	Investigadora	CTR-JdIC
Guzmán	Velasco	Jefferson	UZ	No doctor	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Hermosilla	Fernández	Pablo Simón	UZ	No doctor	Investigadora	CTR-FPI
Iturmendi	Urrutia	Amaia	UZ	No doctor	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Joven	Sancho	Daniel	CSIC	No doctor	Investigadora	CTR-FPI
Julián	Arrese	Alejandro	UZ	No doctor	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Latre	Morales	Beatriz	CSIC	No doctor	Administrativa	CTR-Proy-Tec
López	Gallego	Fernando	UZ	Doctor	Investigadora	I-C-ARAID
Moreno	Carrasco	Alberto	CSIC	No doctor	Investigadora	CTR-FPI
Navarro	Fuenmayor	Janeth	CSIC	Doctor	Investigadora	Per-Est
Ojeda	Amador	Ana Isabel	CSIC	No doctor	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Río	Varea	Mª Pilar del	CSIC	Doctor	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Romera	Ariño	Pablo	CSIC	No doctor	Técnica	Per-Est
Sánchez	Burillo	Irene	CSIC	No doctor	Investigadora	CTR-DGA-Pre
Sánchez	Martínez	Sara	CSIC	No doctor	Técnica	Per-Est
Sanz	Miguel	Pablo José	UZ	Doctor	Investigadora	P-CTR-Dr
Trujillo	Rodríguez	Alejandra María	CSIC	No doctor	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Velasco	Lozano	Susana	CSIC	Doctor	Investigadora	Per-Est
Wilkinson		Eden-Taylor	CSIC	No doctor	Investigadora	Per-Est

Bajas (referidas a personal no permanente)

1er Apellido	2º Apellido	Nombre	Organismo	Titulación	Vinculación	Categoría
Alegre	Requena	Juan Vicente	CSIC	Lcd	Investigador	CTR-DGA-Pre
Algieri		Vincenzo	CSIC	Lcd	Investigador	Per-Est
Azcárate	Sedano	Paula	CSIC	Est	Investigadora	Per-Est
Babón	Molina	Juan Carlos	UZ	Gº UNIV	Investigador	CTR-Proy-Lcd
Bajo	Velázquez	Sonia	CSIC	Dr	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Bayona	Ramón y Cajal	Rocío	CSIC	Est	Investigadora	Per-Est
Berbés	Martínez	Roberto	CSIC	Est	Investigador	Per-Est
Bruñén	Fau	Patricia	CSIC	Est	Investigadora	Per-Est
Castán	Nadal	Alejandro	CSIC	Lcd	Investigador	CTR-DGA-Pre
Chueca	López	Andrés José	CSIC	Lcd	Investigador	CTR-FPI
Civera	Casadas	Alba	CSIC	Est	Investigadora	Per-Est
Collado	Ruiz	Sandra	CSIC	MR	Investigadora	Per-Est
Espallargas	Añón	Natalia	CSIC	Est	Investigadora	Per-Est
Ferrer	Bru	Carlos	CSIC	Est	Investigador	Per-Est
Forniés	Gracia	Juan	UZ	Dr	Investigador	Prof-Emerito
Galiana	Cameo	María	UZ	Lcd	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
García	Peiró	José Ignacio	CSIC	Est	Investigador	Per-Est
Ghirardello		Mattia	UZ	Lcd	Investigador	CTR-FPU
Gil	Ferrás	Ana Mª	UZ	Dr	Investigadora	CTR-Proy-Dr
Gómez	Bachiller	María	CSIC	Est	Investigadora	Per-Est
Gracia	Barberán	Sara	CSIC	Est	Investigadora	Per-Est
Hernández	González	Yaiza	UZ	Gº UNIV	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Iturmendi	Urrutia	Amaia	UZ	Lcd	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Jimeno	Marco	Angel	CSIC	FP II	Técnico	CTR-Proy-Tec
Joven	Sancho	Daniel	UZ	MR y Gº	Investigador	CTR-Proy-Lcd
Juan	Pérez	Saúl	CSIC	Est	Investigador	Per-Est
Julián	Arrese	Alejandro	UZ	Lcd	Investigador	CTR-Proy-Lcd
Lallana	Pardo	Diego Neil	CSIC	Est	Investigador	Per-Est
Lanzas	Pescador	Tomás	CSIC	Est	Investigador	Per-Est
Latre	Morales	Beatriz	CSIC	Lcd	Administrativa	CTR-Proy-Tec
López	Osorio	Víctor	CSIC	Est	Investigador	Per-Est
Lumbreras	Bustos	Raquel	CSIC	Est	Investigadora	Per-Est
Mehravar		Ehsan	CSIC	Dr	Investigadora	Per-Est
Monciino		Giulia	CSIC	Lcd	Investigadora	Per-Est
Montañés	Gil	Laura	CSIC	Est	Investigadora	Per-Est
Nariman	Ruiz	Santiago	CSIC	Lcd	Investigador	Per-Est
Navarro	Fuenmayor	Janeth	CSIC	Dr	Investigadora	CTR-Proy-Dr
Ortego	Cañaveras	Mª Lourdes	CSIC	Dr	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Ospino	Mendoza	Isaura	UZ	Dr	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Ozalla	Sánchez	Javier	CSIC	Est	Investigador	Per-Est
Palacios	Laganga	Adrián Úrbez	CSIC	Lcd	Investigador	Per-Est
Palmese		Marco	UZ	Máster	Investigador	CTR-Proy-Lcd
Pereira	Esclapés	Rafael	CSIC	Est	Investigador	Per-Est
Polo	de Castro	Jorge	CSIC	Est	Investigador	Per-Est
Ropero	Hinojosa	Diego	CSIC	Est	Investigador	Per-Est

Royo	Salas	Daniel	CSIC	Est	Investigador	Per-Est
Ruighi		Francesco	CSIC	Gº UNIV	Investigador	Per-Est
Ruiz	Morte	Sara	CSIC	Lcd	Investigadora	CTR-DGA-Pre
San Torcuato	Sanz	Ainhoa	UZ	Lcd	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Sánchez	Page	Beatriz	UZ	Lcd	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Sancho	Gracia	Sofía	CSIC	Dr	Técnica	CTR-Proy-Tec
Sanz	Miguel	Pablo José	UZ	Dr	Investigador	P-CTR-Dr-Interino
Vellé	Ruiz	Alba	UZ	Lcd	Investigadora	CTR-Proy-Lcd
Villarroya	Macarrilla	Mirella	CSIC	Est	Investigadora	Per-Est

Modificaciones

Apellido 1	Apellido 2	Nombre	Organismo	Titulación	Vinculación	Categoría
Casas	del Pozo	José María	UZ	Doctor	Investigador	TU
Casas	del Pozo	José María	UZ	Doctor	Investigador	CU
Castán	Nadal	Alejandro	CSIC	No doctor	Investigador	CTR-DGA-Pre
Castán	Nadal	Alejandro	CSIC	No doctor	Investigador	Per-Est
Forniés	Gracia	Juan	UZ	Doctor	Investigador	Prof-Emerito
Forniés	Gracia	Juan	UZ	Doctor	Investigador	Col-Ext
Joven	Sancho	Daniel	CSIC	No doctor	Investigador	CTR-Proy-Lcd
Joven	Sancho	Daniel	CSIC	No doctor	Investigador	CTR-FPI
Ruiz	Morte	Sara	CSIC	No doctor	Investigador	CTR-DGA-Pre
Ruiz	Morte	Sara	CSIC	No doctor	Investigador	Per-Est
Sanz	Miguel	Pablo José	UZ	Doctor	Investigador	P-CTR-Dr-Interino
Sanz	Miguel	Pablo José	UZ	Doctor	Investigador	P-CTR-Dr
Navarro	Fuenmayor	Janeth	UZ	Doctor	Investigador	CTR-Proy-Dr
Navarro	Fuenmayor	Janeth	UZ	Doctor	Investigador	Per-Est



Apartado 2. Líneas de investigación y 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 2.2. Catálisis heterogénea y bifásica
- Sublínea 2.3. Catálisis estereoselectiva
- Sublínea 2.4. Compuestos orgánicos enantiopuros y catálisis
- Sublínea 2.5. Organocatálisis asimétrica

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:

- Nuevos modos de coordinación de los ligandos
- 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.
- Presencia de propiedades interesantes como magnéticas, ópticas (luminiscencia, vapocromismo), catalíticas, etc. y en algunos casos puede ser de interés adicional las posibles aplicaciones industriales.
- 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 $(C_5Me_5)_2M$ ($M = Rh, Ir$) o $(areno)M'$ ($M' = Ru, Os$) 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.

Sublínea 2.5. Organocatálisis asimétrica

En esta sublínea de investigación nos dedicamos al desarrollo de nuevos procesos en el campo de la organocatálisis enantioselectiva, lo que constituye una aportación de gran importancia para la síntesis de productos naturales o análogos estructurales de interés biológico o farmacológico. Cabe destacar que el desarrollo de nuevos procesos enantioselectivos constituye un campo de enorme repercusión para la preparación de compuestos enantioméricamente puros con aplicaciones comerciales.

En los últimos años, e impulsado por la creciente preocupación por el medio ambiente, se han desarrollado de manera exponencial métodos catalíticos que permiten llevar a cabo la síntesis enantioselectiva de compuestos orgánicos de forma muy eficiente y con alto rendimiento. Además, en nuestro caso, los nuevos procedimientos que se pretenden desarrollar en este campo de la química, podrán ser aplicados a la preparación de compuestos

enantioméricamente enriquecidos de interés biomédico con un mínimo impacto medioambiental debido, esto último, entre otras cosas, al propio hecho de no emplear metales en el medio de reacción.

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 trabajos 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 ser

alcanzado 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 hidrógeno 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.

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

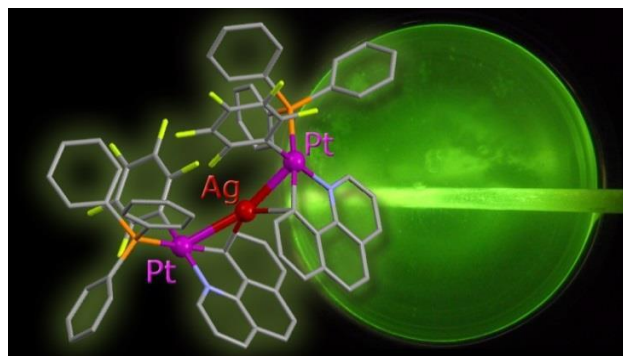
La optimización de procesos catalíticos conocidos y el desarrollo de otros nuevos pueden ser abordados desde varias perspectivas diferentes, que pueden ir desde lo puramente empírico a lo basado en el conocimiento. En el ámbito de este último, los principales objetivos de esta sublínea son la extracción de conclusiones mecanísticas significativas desde el punto de vista de la investigación fundamental que también se puede utilizar como guía para la mejora y el desarrollo de catalizadores.

Debido a este carácter dual, las conclusiones deseadas deben ser extraídas de las transformaciones químicas, encontrándose tanto con los hallazgos relevantes a nivel de mecanismos como con economía potencial. Como un 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 puede superar a través de la comprensión mecanicista y, en consecuencia, el desarrollo de funcionalizaciones C-H económicamente viables es un objetivo final en el horizonte de la sublínea. De hecho, la mayoría de los esfuerzos de la sublínea se concentran actualmente en la economía atómica de estos procesos.

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 catalíticas 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:

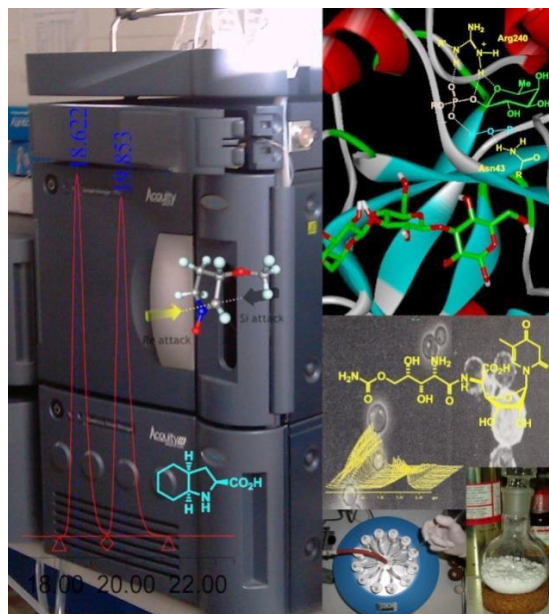
1. Diseño y síntesis. Nuevos ligandos (no quirales y quirales), nuevos complejos de dichos ligandos con metales de transición y nuevos organocatalizadores.
2. Aspectos mecanísticos. Investigación de los mecanismos de reacción, detección de intermedios, estudios cinéticos y espectroscópicos (incluyendo 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).



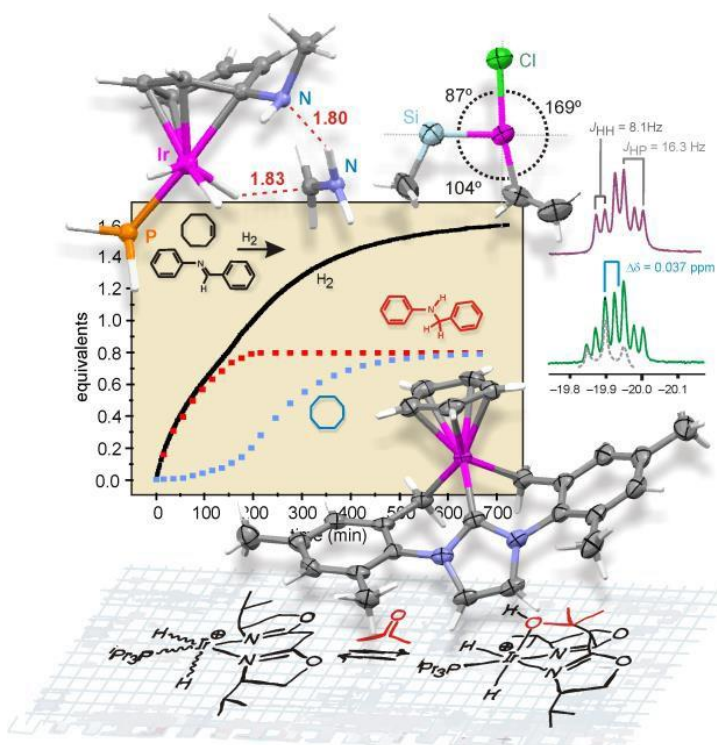
Departamento 4. Activación de Enlaces por Complejos Metálicos

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 funcionales, 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
- Organocatálisis Asimétrica
- Organometálicos y Catálisis
- Química Bioorgánica
- Química de oro y plata
- 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.

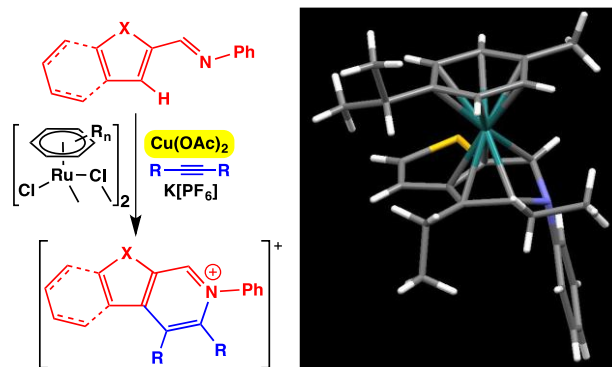
- En la primera se estudia la formación del complejo organometálico, es decir, el que contiene el enlace metal-carbono (M-C) o la posición reactiva, por reacción de nuestra molécula orgánica con el precursor metálico. En la segunda se ha de producir la ruptura del enlace M-C y la formación de los nuevos 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

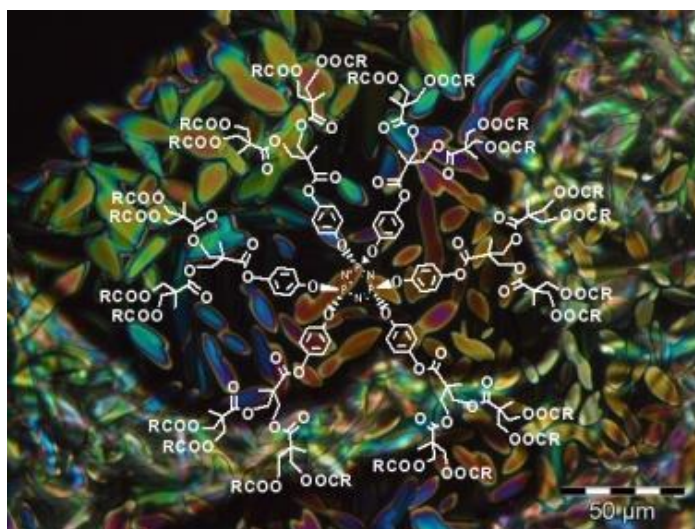
fosfazeno, su alta flexibilidad, su alta estabilidad térmica y su baja inflamabilidad, hacen que estos compuestos sean de gran interés en la investigación de nuevos materiales, no sólo desde una perspectiva de investigación básica, sino también aplicada. La gran versatilidad sintética de este sistema 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 dendríticas. 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.



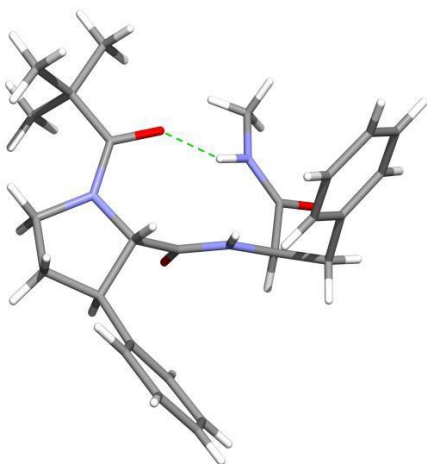
Nuevos materiales cristal-líquido basados en dendrímeros con un núcleo ciclotrifosfazeno

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

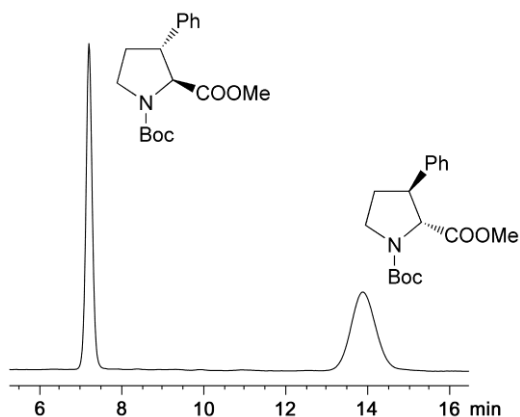
La investigación desarrollada por el grupo Aminoácidos y Péptidos se centra en la síntesis de aminoácidos no proteicos con diferentes tipos de modificaciones estructurales y funcionales y su posterior aplicación en el desarrollo de compuestos bioactivos de utilidad en el campo de la biomedicina o la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

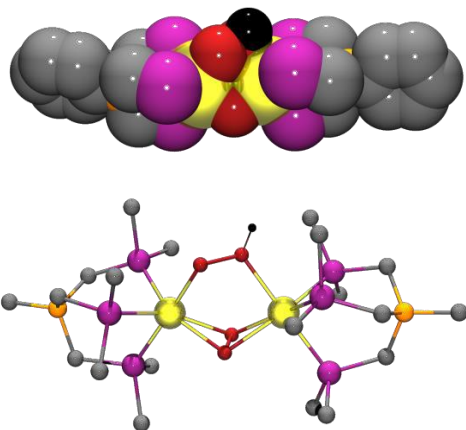
Arquitectura Molecular Inorgánica y Aplicaciones (IP: Cristina Tejel; Grupo Consolidado E70)



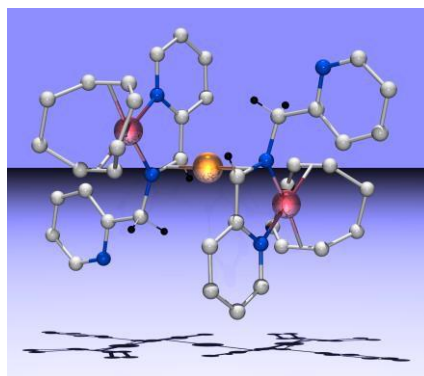
La temática del grupo es la síntesis y el estudio de la reactividad de nuevos complejos mononucleares y agregados moleculares de metales de transición dirigida a aplicaciones en catálisis homogénea y nuevos materiales.

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-metaloaxetanos, 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 están en su infancia en contraposición con la química desarrollada hasta ahora generalmente con complejos de capa cerrada.

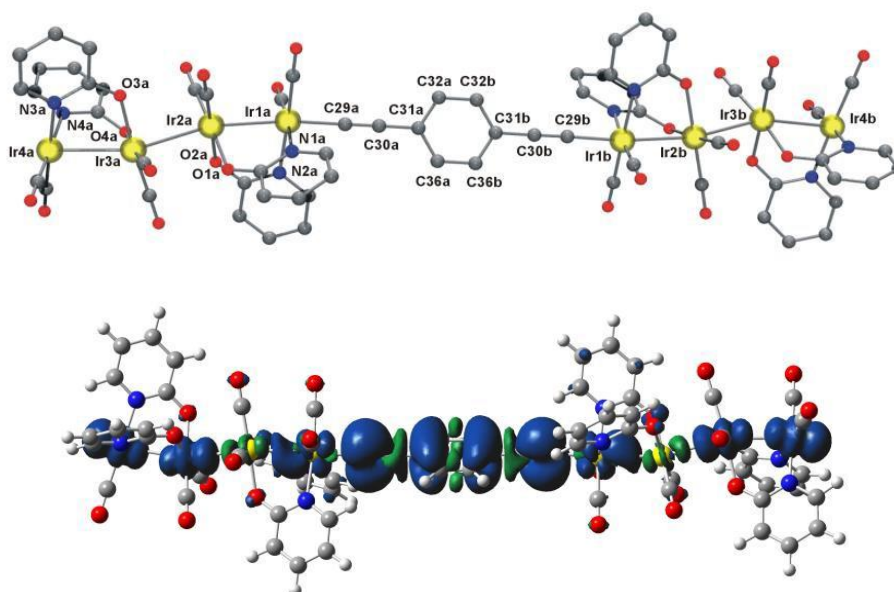


De especial relevancia en este contexto es el estudio de reacciones del dióxido de carbono dirigidas a su transformación en especies reducidas, ya sea por reacciones de inserción en enlaces del tipo M-X (X = H, C), o su reducción a ácido fórmico. El objetivo es encontrar nuevos modos de reactividad de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

- compuestos con cadenas metálicas de valencia mixta y deslocalización electrónica.
- 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:

Ácidos de Lewis, tanto soportados sobre sílice como intercambiados catiónicamente en arcillas y otros soportes aniónicos. Se han utilizado en reacciones de formación de enlaces C-C, y algunos de ellos han sido capaces de llevar a cabo reacciones que no tenían lugar en fase homogénea.

Ácidos de Brønsted, sobre todo sólidos sulfonados, como polímeros, sílices y materiales compuestos, y en los últimos años, carbones hidrotermales sulfonados preparados a partir de fuentes renovables.

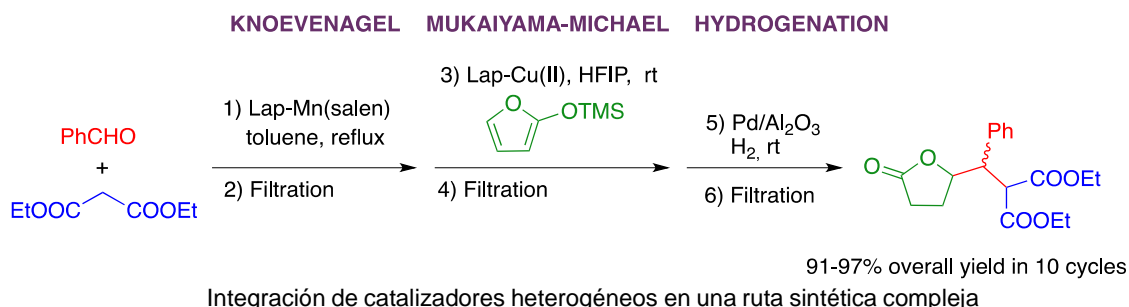
Sólidos básicos, como óxidos mixtos y fosfatos naturales modificados, empleados en procesos de condensación, así como en reacciones de epoxidación de alquenos deficientes en electrones con agua oxigenada.

Catalizadores de oxidación, principalmente de Ti soportado sobre sílices, empleados en oxidaciones con hidroperóxido de terc-butilo o con peróxido de hidrógeno acuoso.

Nanopartículas metálicas soportadas, principalmente de Pd(0) en laponita, y se han aplicado en reacciones de acoplamiento C-C, llegando a recuperarse durante 50 ciclos de reacción, lo que es prueba de su estabilidad y fácil manipulación.

Catalizadores quirales soportados mediante diferentes tipos de inmovilización, pero la seña de identidad ha sido la inmovilización por intercambio iónico de complejos de tipo bis(oxazolina)-cobre. En arcillas ha mostrado un efecto de confinamiento capaz de cambiar, mejorando o revertiendo, la diastereo y/o enantioselectividad de diferentes reacciones.

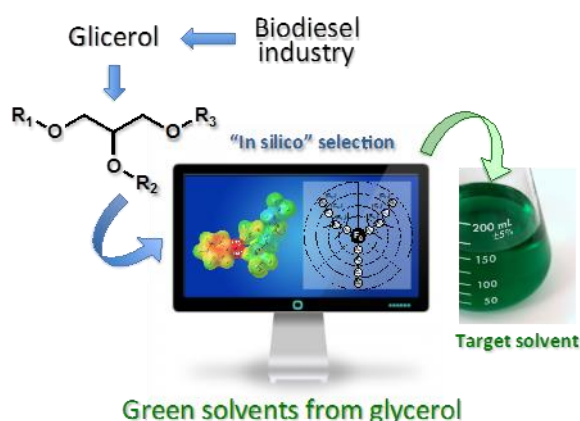
Finalmente, el empleo de sistemas catalíticos heterogéneos permite diseñar procesos multietapa en los que los catalizadores pueden ser fácilmente separados y reutilizados. Por ejemplo, un proceso secuencial de reacciones de Knoevenagel/Mukaiyama-Michael/Hidrogenación reutilizado en 10 ciclos.



Línea de trabajo 2: Catálisis heterogénea en procesos de biorrefinería

Esta línea es la de más reciente creación habiendo comenzado a desarrollarse a mediados de la década del 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. Así, se han desarrollado síntesis de distintos derivados de glicerol como éteres, ésteres o cetales, susceptibles de ser empleados como disolventes o como aditivos para biocombustibles. Se han descrito 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. En la actualidad, en esta línea de disolventes renovables, se está trabajando en el diseño de DES (Deep Eutectic Solvents) y líquidos iónicos derivados de glicerol y sus distintas aplicaciones.



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

Dentro de esta misma línea de catálisis heterogénea en procesos de biorrefinería, en la última década, nuestro grupo ha estado trabajando también en transformaciones catalíticas de ácidos y ésteres grasos para obtención de materiales de alto valor añadido. Los aceites vegetales constituyen un valioso recurso para la obtención de derivados con largas cadenas hidrocarbonadas (útiles en lubricantes, tensioactivos, plastificantes, combustibles, etc.).

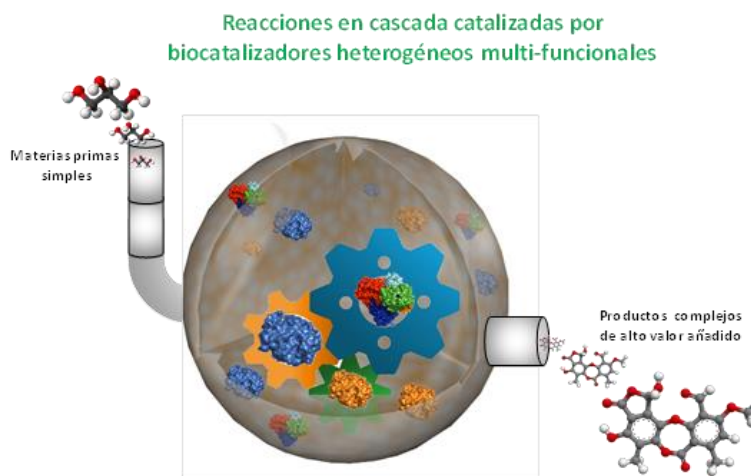
Se está trabajando tanto en la modificación de los dobles enlaces de las cadenas alquílicas como en las transformaciones del propio grupo carboxílico. Entre las reacciones en las venimos trabajando de modificación de los dobles enlaces se destacan las reacciones de ciclopropanación con diazocompuestos usando catalizadores de Cu y Rh, adiciones de ácidos carboxílicos a los dobles enlaces usando sólidos ácidos o reacciones de epoxidación con catalizadores de Ti. Los epóxidos obtenidos en estas últimas reacciones presentan una reactividad muy versátil que permiten obtener una gran variedad de compuestos como alcoholes o cetonas. El grupo también está trabajando en distintas aproximaciones que permitan la rotura controlada de la cadena hidrocarbonada, mediante catálisis química o por vía enzimática, evitando el uso de oxidantes fuertes y nocivos para el medio ambiente.

Finalmente se ha empezado a trabajar en el aprovechamiento de ligninas. En un primer paso se ha estudiado desde el punto de vista teórico y experimental la rotura ácida de modelos simples, utilizando catalizadores heterogéneos. Este estudio se va a continuar con ligninas de diferente procedencia y se van a evaluar diferentes alternativas de modificación para su uso en diversas aplicaciones.

Línea de trabajo 3: Biocatálisis

En octubre de 2017 se asimiló al grupo la línea de biocatálisis gracias a la incorporación al mismo del investigador ARAID, el Dr. Fernando López-Gallego. Esta línea de investigación se centra en la aplicación de sistemas multienzimáticos en el ámbito de la química sintética y analítica aprovechando las excelentes propiedades (actividad, especificidad y selectividad) de las enzimas: los catalizadores biológicos. Estas propiedades nos permiten desarrollar procesos químicos más sostenibles y eficientes. El objetivo es desarrollar sistemas biológicos artificiales inspirados en la organización espacial y funcional que nos brinda la naturaleza. Para alcanzar este objetivo, se está trabajando en tres direcciones principales:

- Avanzar en la caracterización molecular de las enzimas inmovilizadas para entender mejor el efecto de los materiales sólidos en las propiedades físico-químicas de estos enzimas. En último término, se busca la optimización de los biocatalizadores heterogéneos guiada por la información proporcionada por estas técnicas (Soft Matter, 2016, 12, 8718-8725).
- Crear andamios sintéticos que inspirados en sistemas celulares y que tengan la capacidad de ensamblar sistemas multi-enzimáticos dentro de estructuras sólidas y porosas con precisión nanométrica. Esta organización espacial permite que los sistemas multi-enzimáticos catalicen reacciones químicas en cascada de manera más eficiente y sostenible (Chemcatchem, 2015, 7, 1939-1947).
- Desarrollar biocatalizadores heterogéneos multi-funcionales y autosuficientes donde los materiales porosos no solo sirvan como mero soporte para inmovilizar los enzimas sino que también jueguen un papel activo en el proceso. De este modo los materiales pueden crear gradientes de sustratos y productos, aumentar la concentración efectiva de cofactores o crear microambientes de pH que impacten positivamente en las propiedades catalíticas de los enzimas inmovilizadas (Angew. Chem. Int. Ed. 2017, 56, 771-775).



El elemento diferenciador de esta línea de investigación consiste en la conjugación de sistemas biomoleculares complejos con materiales avanzados que podrían ser fácilmente integrables en procesos o dispositivos con aplicación industrial. Esta línea de investigación sigue la senda de la complejidad tecnológica inspirada por la jerarquía espacial que encontramos en la naturaleza.

En este sentido, en un futuro cercano, se pretende lograr que diferentes funcionalidades biológicas (p.e actividades enzimáticas) puedan ser coordinadas eficazmente con las propiedades físico-químicas de las superficies sólidas para crear sinergias que den lugar a nuevas aplicaciones. Un claro ejemplo de esta simbiosis artificial son las reacciones quimio-enzimáticas en cascada donde tanto la maquinaria biológica como la superficie del material jueguen un papel catalítico.

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, (c) funcionalización de sustratos insaturados: hidroaminación, hidrosililación, hidrotiolación, y (d) polimerización de alquinos y olefinas. La mayor parte de las aplicaciones objeto de estudio tienen una 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.

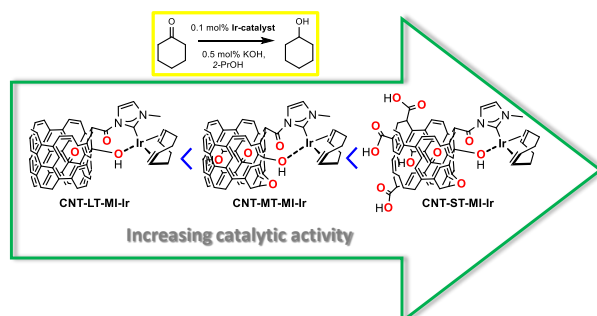
- 1.- Soporte de catalizadores en superficies de carbono: Reciclado de catalizadores
- 2.- Hidrosilanos como fuente de hidrógeno en procesos catalíticos
- 3.- Adición regioselectiva de enlaces X-H a enlaces carbono-carbono insaturados mediante catalizadores organometálicos
- 4.- Ligandos NHC y NHO en catálisis homogénea
- 5.- Activación y funcionalización catalítica de amoníaco: Reactividad de parent-amido complejos
- 6.- Desarrollo de catalizadores homogéneos basados en ligandos polidentados con la unidad NHC
- 7.- Compuestos poliédricos de boro en catálisis
- 8.- Biomoléculas modificadas: propiedades y aplicaciones en catálisis
- 9.- Reacción de activación C-H en compuesto de iridio(I)

Línea de investigación: Soporte de catalizadores en superficies de carbono: Reciclado de catalizadores

Investigadora: Dra. M. Victoria Jiménez

El desarrollo de sistemas catalíticos organometálicos para reducir compuestos insaturados basados en compuestos de iridio con carbeno N-heterocíclico funcionalizados que a su vez permitan su heterogeneización por anclaje en superficies de carbono permite la reutilización de los catalizadores, sin pérdida de actividad y selectividad, y además, su separación del medio de reacción reduciendo tanto costes como residuos. Este objetivo general se enmarca como uno de los grandes principios de la química sostenible. Un puente de la catálisis homogénea a la catálisis heterogénea, que en parte resuelve el hándicap de la imposibilidad de la recuperación de los catalizadores, es la heterogeneización de los catalizadores en nuevos materiales que además de solucionar el problema del reciclado tal vez refuerce la actividad y selectividad del sistema catalítico. La funcionalización de materiales carbonosos, tipo óxido de grafeno y nanotubos de carbono con sales de imidazolio precursoras de los ligandos carbeno NHC ditópicos permite disponer de un amplio abanico de catalizadores híbridos Ir-NHC activos en la reducción de ciclohexanona por transferencia de hidrógeno y entre los cuales se pueden establecer correlaciones actividad-superficie soporte ayudados por la espectroscopia de absorción de rayos-X (EXAFS) en la caracterización de los mismos.

El anclaje Ir-NHC se realiza a través de enlaces acetilo utilizando los grupos carboxílicos de nanotubos de carbono obtenidos por tratamientos de oxidación en diferentes grados de severidad. Se conocen muy pocos complejos acetil-metal de transición siendo además muy reactivos. Sin embargo, la influencia positiva de la pared del nanotubo ha permitido aislar NHC-acetilcomplejos de iridio soportados en nanotubos de carbono y exhiben una importante actividad como catalizadores de reducción de ciclohexanona por transferencia de hidrógeno. Se ha estudiado la dependencia de la actividad catalítica, la estabilidad y la re-ciclabilidad de los catalizadores híbridos resultantes con la superficie química del soporte.



La actividad catalítica en transferencia de hidrógeno en catalizadores híbridos de iridio soportados en nanotubos de carbono está fuertemente influenciada por el grado de oxidación del soporte sólido.

Línea de investigación: Desarrollo de catalizadores homogéneos con ligandos de tipo NSi, NSiN o SiNSi. Estudio de su aplicación en procesos de transformación química de CO₂ y otros gases de efecto invernadero

Investigador: Dr. Francisco José Fernández

En el contexto de la catálisis homogénea por complejos de metales de transición, está bien establecido que mediante el ajuste de las propiedades estéricas y electrónicas del entorno de coordinación del centro metálico es posible mejorar la actividad y selectividad de los procesos catalíticos. En ese sentido, nuestro equipo ha preparado complejos de rodio e iridio con ligandos monoaniónicos bi y tridentados de tipo NSi, NSiN e SiNSi (N = anillo piridínico; Si = grupo sililo) que son fácilmente modificables mediante funcionalización del grupo sililo y de los N-heterociclos. La presencia del grupo sililo ha demostrado ser relevante ya que no sólo favorece la estabilización de estados de oxidación altos sino que además la posición trans al grupo sililo es más lábil. Los

estudios que hemos realizado durante los pasados cinco años ha demostrado que este tipo de sistemas es muy activo en procesos de transformación química de CO_2 (Figura 1). Este tipo de sistemas no sólo son de los más activos publicados hasta el momento sino que además permiten trabajar en ausencia de disolvente.

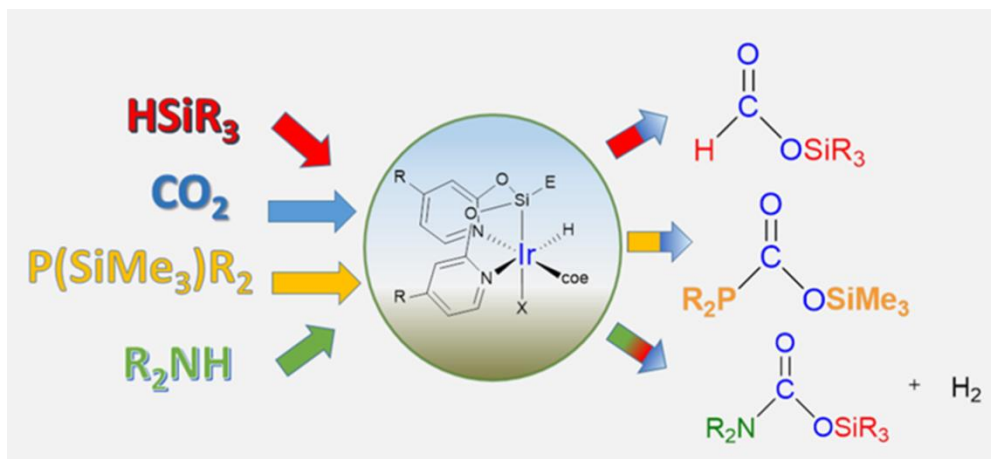


Figura 1: Ejemplos de procesos catalizados por especies Ir-NSiN

Otros retos que nos planteamos son el desarrollo de sistemas que nos permitan catalizar procesos de acoplamiento C-C entre CO_2 y otras moléculas orgánicas. Para ello, decidimos explorar la actividad de complejos de rodio e iridio con dos ligandos bidentados de tipo NSi que dispongan por tanto de dos enlaces metal-sililo y por ello tengan dos posiciones lábiles mutuamente dispuestas en posición cis y complejos con ligandos de tipo SiNSi que incorporen dos grupos sililo en un solo ligando (Figura 2).

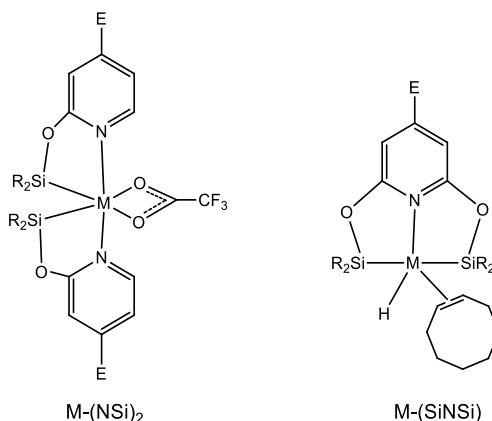


Figura 2: Ejemplo de precursores catalíticos con ligandos de tipo NSi y SiNSi

Los procesos que estamos estudiando se emplea como reductor el enlace Si-H de siloxanos que por ser residuos de la industria de la silicona son reactivos baratos. Finalmente, los mejores catalizadores homogéneos serán inmovilizados en soportes mesoestructurados para preparar catalizadores heterogéneos que puedan ser reciclados y por tanto de aplicación industrial.

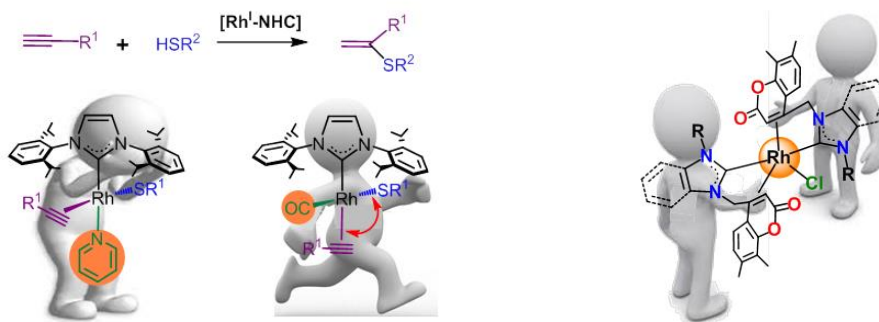
Por tanto esta línea de investigación pretende desarrollar complejos de metales de transición de los grupos 8 y 9 con los ligandos anteriormente mencionados y estudiar su aplicación en procesos catalíticos que empleen hidrosiloxanos como fuente de hidrógeno. Los procesos catalíticos objeto de estudio serán:

- i) Síntesis de materiales degradables mediante hidrosililación de aldehídos, cetonas y estudios de mecanismos de reacción.
- ii) Transformación de CO_2 en moléculas de valor añadido.
- iii) Generación de hidrogeno y silanoles mediante hidrólisis de enlaces Si-H.
- iv) Hidrodeshalogenación de moléculas orgánicas.
- v) Síntesis de compuestos orgánicos a partir de gases de efecto invernadero.

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

Investigador: Dr. Ricardo Castarlenas. Dr. Andrea Di Giuseppe

La línea de investigación pretende controlar la funcionalización de moléculas orgánicas de forma selectiva utilizando catalizadores de rodio con ligandos carbeno N-heterocíclicos (NHC). Previamente habíamos descubierto que los precursores catalíticos $[\text{Rh}(\mu\text{-Cl})(\text{IPr})(\eta^2\text{-coe})_2]$ (coe = cicloocteno; IPr = 1,3-bis-(2,6-diisopropilfenil)imidazol-2- carbeno) eran muy eficientes y selectivos en reacciones de hidrotiolación, hidrofosfinación y dimerización de alquinos. Estudios mecanísticos han demostrado que la primera etapa del proceso catalítico es en general la oxidación de Rh^{I} a Rh^{III} mediante adición de X-H. En el presente ejercicio hemos descubierto que la introducción de un ligando carbonilo en el precursor metálico incrementa la selectividad en la reacción de hidrotiolación de alquinos actuando mediante un proceso diferente al usual sin producirse oxidación en el metal. Alternativamente, hemos diseñado nuevos ligandos NHC con un grupo cumarino con gran potencialidad en reacciones catalíticas de acoplamiento.

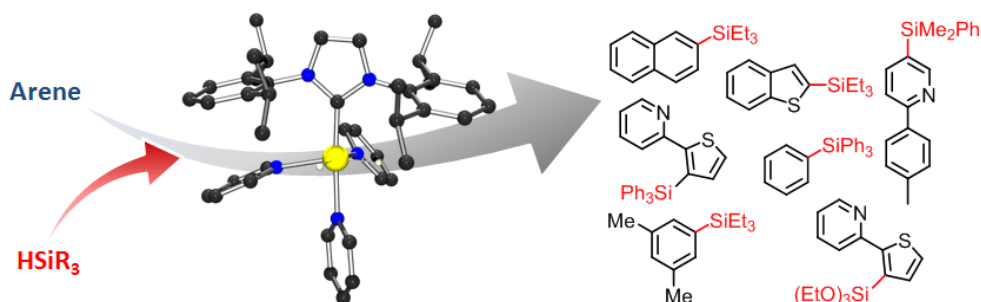


Línea de investigación: Ligandos NHC y NHO en catálisis homogénea

Investigador: Dr. Manuel Iglesias

El objetivo de la investigación es explotar el potencial de ligandos tipo carbeno N- heterocíclico (NHC) y más recientemente ligandos tipo olefina N-heterocíclica (NHO's) en catálisis homogénea. Más concretamente, la estrategia se basa en tres etapas: (i) el desarrollo de nuevas arquitecturas moleculares basadas en ligandos NHC y NHO, (ii) la síntesis y caracterización de sus complejos de coordinación, (iii) la aplicación de estos en la funcionalización de moléculas orgánicas para la obtención de productos de alto valor añadido.

En este contexto se está trabajando en la aplicación de complejos de rodio e iridio que presentan ligandos tipo carbeno-N-heterocíclico en la funcionalización de enlaces C-H y en el diseño de nuevos ligandos pincer basados en ligandos tipo NHO.



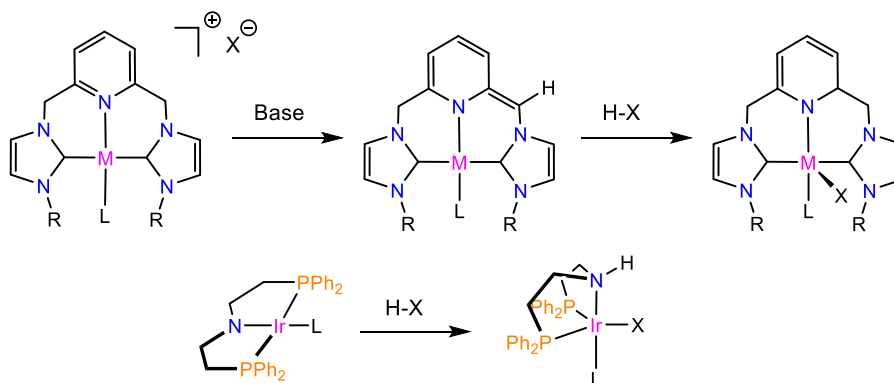
- a) Ejemplo de funcionalización de enlaces C-H mediante silylación deshidrogenante de arenos (Chem. Sci., 2017, 8, 4811–4822).

Línea de investigación: Activación y funcionalización catalítica de amoníaco: Reactividad de parent-amido complejos

Investigador: Dr. Miguel Ángel Casado Lacabra

Esta línea de investigación está centrada en el desarrollo de 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 heterolítico N–H bien establecido en nuestros laboratorios. También es posible acceder a especies $[\text{H-Ir-NH}_2]$ por adición oxidante de NH_3 sobre complejos de iridio, lo que mejora las perspectivas para su aplicación en la funcionalización catalítica de NH_3 . Estas vías de activación de NH_3 están permitiendo estudiar su reactividad y la actividad catalítica de algunos complejos, en la que pueden ser operativos mecanismos de esfera externa debido a la participación de los fragmentos $-\text{NH}_2$ en conjunción con el metal.

Otra aproximación a la funcionalización catalítica de amoníaco se está desarrollando en la actualidad mediante la utilización de ligandos *pinza*. Por un lado uno basado en un esqueleto de acridina funcionalizado con dos grupos heterocíclicos NCN de tipo carbeno. La desprotonación de uno de los fragmentos metileno genera especies amido neutras muy reactivas que se están explorando en el contexto de activación N–H de amoníaco y su potencial en catálisis homogénea. Por otro lado un ligando P_2N -dador que contiene un esqueleto alifático, que es susceptible de participar en fenómenos de cooperación metal-ligando, en donde el átomo de N y el metal pueden activar sustratos próticos de un modo cooperativo, lo que puede ser crucial en determinados procesos catalíticos.



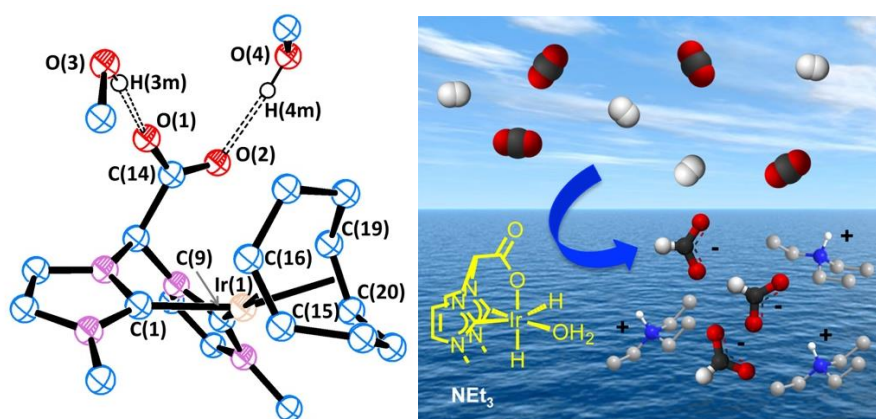
Mediante el empleo de estos sistemas ligando se pretende estudiar en profundidad, desde las perspectivas experimental y teórica, su reactividad con amoníaco (y otras aminas) junto con otros sustratos insaturados (alquenos, alquinos), además de con alcoholes y diversos reactivos próticos. Las aplicaciones catalíticas de estos sistemas organometálicos que se están estudiando o serán exploradas a corto plazo están centradas en el empleo de NH_3 como sustrato para su funcionalización. Más concretamente se están estudiando adiciones de amoníaco a sustratos insaturados activados (alquenos y alquinos) catalizadas por complejos de iridio del tipo $[\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{PPh}_2)_2\text{Ir}(\text{olefina})]$ que da lugar a la formación de aminas funcionalizadas. Posteriormente se pretende extender esta química a sustratos insaturados no activados. Adicionalmente se está explorando el empleo de catalizadores de iridio activos en el acoplamiento de amoníaco y CO_2 con silanos.

Línea de investigación: Desarrollo de catalizadores homogéneos basados en ligandos polidentados con la unidad NHC

Investigador: Dr. Jesús J. Pérez-Torrente

Los ligandos NHC son la plataforma adecuada para el diseño de arquitecturas moleculares metal-ligando con capacidad de generar nuevos modos de reactividad con impacto en catálisis debido a la posibilidad de introducir hemilabilidad, facilitar fenómenos de activación bifuncional o la cooperación intermetálica en compuestos di- y polinucleares.

En esta línea de investigación se pretende la utilización de ligandos tridentados basados en esqueletos NHC y bis-NHC con diferentes funcionalidades derivadas de la combinación de átomos dadores (O, S, y N), y tipologías: trípode, pincer y escorpionato entre otras. Este tipo de catalizadores se aplicarán al estudio de reacciones de deshidrogenación que no requieren la presencia de un aceptor y posibilita la eliminación de dihidrógeno, funcionalización deshidrogenativa, o alternativamente el consumo in situ de los equivalentes de hidrógeno generados, autotransferencia de hidrógeno. Adicionalmente, estos catalizadores se evaluarán en reacciones de hidrofuncionalización clásicas y en reacciones de activación/funcionalización de CO₂.



Aplicación de catalizadores de iridio(I) con ligandos bis-NHC funcionalizados en la hidrogenación de CO₂ a formiato.

Línea de investigación: Compuestos poliédricos de boro en catálisis

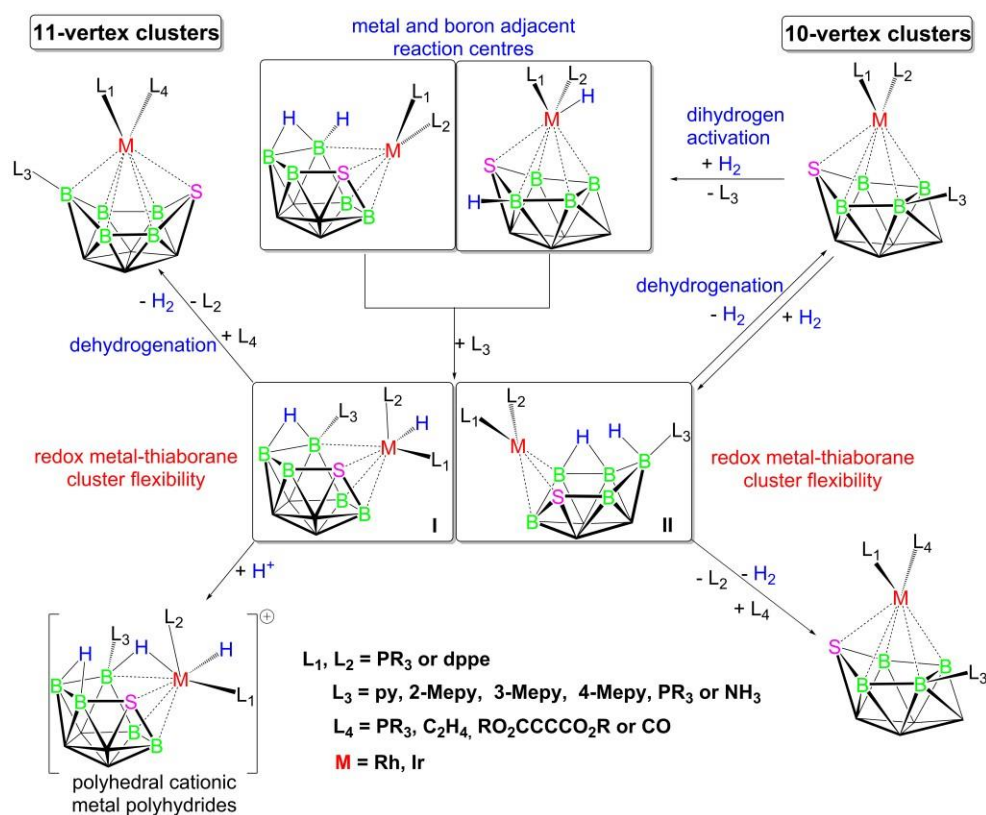
Investigador: Dr. Ramón Macías

El objetivo general es el desarrollo de nuevos sistemas catalíticos basados en compuestos poliédricos de boro capaces de activar de moléculas pequeñas (por ejemplo, H₂, CO, C₂H₄, NH₃, etc.) y modificar substratos orgánicos para formar moléculas de interés.

Nuestra estrategia se ha fundado en la síntesis de una amplia gama de metalatioboranos en los que se han modificado de forma sistemática los ligandos en el metal y en los vértices de boro, modulando, por tanto, las propiedades electrónicas de los clusters.

Este método ha permitido “montar” una gama de complejos partiendo de un precursor común; evitando el consumo de tiempo que supone la síntesis independiente de múltiples ligandos.

El carácter modular de estos clusters queda reflejado claramente en este esquema:

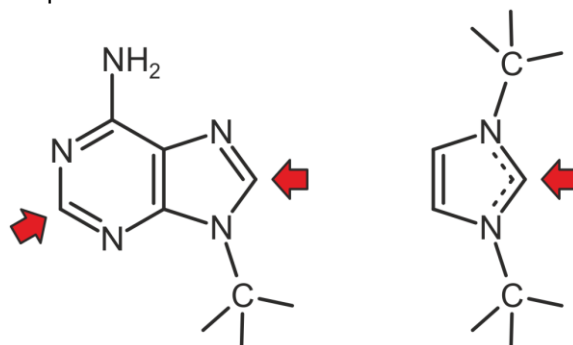


Algunos de los clusters, descubiertos en esta línea de investigación, son activos en la hidrogenación catalítica de olefinas y alquinos. Y de especial relevancia son los resultados obtenidos en la hidrosililación catalítica de alquinos terminales que han dado lugar a la síntesis de α -vinilsilanos con alta selectividad.

El diseño modular de estos clusters proporciona grandes oportunidades para mejorar sus propiedades catalíticas.

Línea de investigación: Biomoléculas modificadas: propiedades y aplicaciones en catálisis
Investigador: Dr. Pablo Sanz

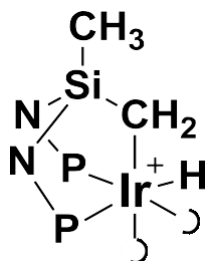
La línea de trabajo en estudiar propiedades generales de algunas moléculas biológicas. Pretendemos demostrar que estas pueden ser utilizadas como ligandos metálicos en procesos catalíticos tanto en medios biológicos como fuera de ellos. Desarrollamos varias aproximaciones bioinspiradas para mejorar rendimientos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



Línea de investigación: Reacción de activación C-H en compuesto de iridio(I)

Investigador: Dr. Vincenzo Passarelli

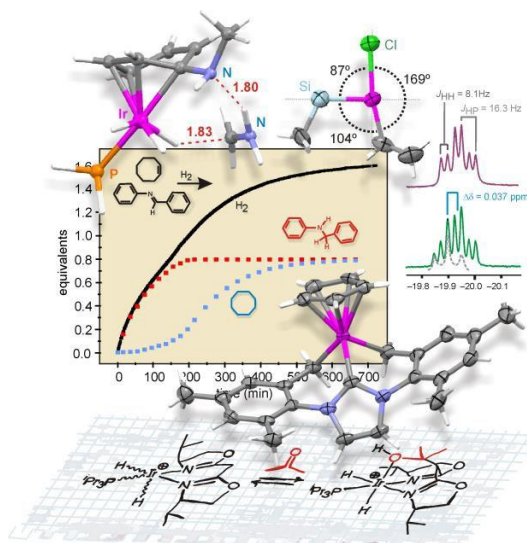
Los ligandos polidentados permiten controlar la geometría y estereoquímica de compuestos de coordinación y organometálicos de metales de transición. Los ligandos tridentados de tipo pincer proporcionan a los complejos un adecuado balance de estabilidad y reactividad que ha permitido el diseño de catalizadores eficientes para un buen número de transformaciones. En este contexto se ha abordado el estudio de la reacción del ligando bidentado N,N'-difosfanosilanodiamina de fórmula $\text{SiMe}_2\{\text{N}(4\text{-C}_6\text{H}_4\text{CH}_3)\text{PPh}_2\}_2$ (SiNP) con compuestos de iridio(I) obteniéndose la plataforma $[\text{Ir}^{\text{III}}\text{H}(\text{SiNP}-\text{H})]^+$ en la que el ligando SiNP-H muestra el modo de coordinación $\kappa^3\text{C,P,P}'$. La presente línea de investigación aborda el estudio de la reactividad de esta plataforma centrándose en la aplicación en reacciones de activación C-H.



Catalizadores y Mecanismos (IP: Eduardo Sola; Grupo consolidado E79)

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 estereo-electrónica.

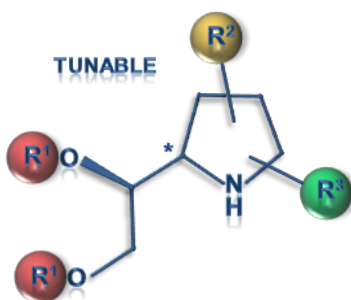


Compuestos Enantiopuros y Procesos Sostenibles – CEPS (IP: M^a Dolores Díaz de Villegas; Grupo emergente E102)

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.

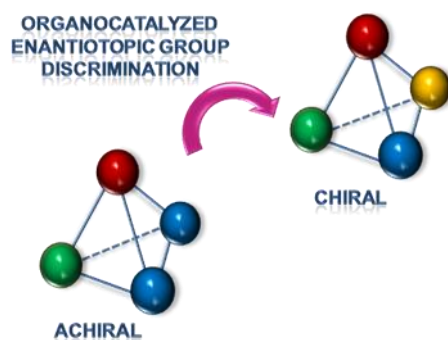
Línea de trabajo 2: Síntesis de nuevos organocatalizadores para la α -heterofuncionalización de compuestos carbonílicos

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).



Organocatálisis Asimétrica (IP: Rarquel P. Herrera; Grupo emergente E104)



La investigación que nuestro grupo desarrolla se enmarca en el área de la organocatálisis asimétrica y engloba varios puntos interrelacionados basados en ideas fuertemente fundadas en investigaciones que se están tratando ya en la línea de investigación de organocatálisis asimétrica que venimos desarrollando desde el año 2008 en Zaragoza, así como en otras ideas novedosas que se desean emprender.

Algunas de las sublíneas de investigación que se están estudiando se enumeran a continuación.

1.-(Tio)ureas quirales y sus propiedades

Cabe remarcar, que aunque se trabaja con diversas familias de organocatalizadores, tales como derivados de Cinchona, catalizadores de transferencia de fase y derivados de prolina, la mayor contribución se ha llevado a cabo en el campo de los catalizadores que actúan mediante enlaces de hidrógeno, entre los que se encuentran las (tio)ureas quirales. Actualmente, se está explorando su capacidad catalítica en distintos procesos enantioselectivos y además, se están estudiando sus propiedades biológicas, obteniendo resultados muy interesantes. También dedicamos esfuerzos al estudio de otras propiedades de dichas (tio)ureas, como es su capacidad de formar geles.

2.-Escuaramidas quirales y sus propiedades

Recientemente, hemos introducido un nuevo esqueleto como centro de nuestra investigación, como son las escuaramidas. Las escuaramidas son moléculas orgánicas que poseen propiedades estructurales muy particulares que han propiciado un gran interés en el campo de la organocatálisis, desde hace tan sólo unos años (desde 2008), por lo que se trata de un campo aún por explorar. Por otra parte, conforme nos hemos ido adentrando en el mundo de las escuaramidas hemos apreciado el enorme potencial que tienen estos motivos estructurales. Es por ello que el grupo de investigación también trabaja en la exploración de las propiedades biológicas y luminiscentes de las escuaramidas sintetizadas, además de otras aplicaciones entre las que se encuentra su uso como organocatalizadores propiamente, así como su capacidad de formar geles.

3.-Reacciones multicomponentes (RMCs)

Motivados por la edición y escritura de nuestro libro *Multicomponent Reactions. Concepts and Applications for Design and Synthesis*. (Eds. Herrera, R. P. y Marqués-López, E., John Wiley & Sons, 2015), decidimos adentrarnos en el mundo de las reacciones multicomponentes, como una de las claves de la Química sintética futura. En tales reacciones, el tiempo empleado en la purificación y aislamiento de los intermedios sintéticos desaparece, y en general, el consumo de energía, disolventes, manipulación, y por tanto, los costes del proceso se reducen, comparados con otros métodos clásicos. La economía atómica, el carácter convergente, la simplicidad operacional, la diversidad estructural y la complejidad molecular a la que se puede acceder, son las mayores ventajas de estos procesos.

En este sentido, nos encontramos desarrollando nuevas metodologías multicomponentes empleando para ello un motivo privilegiado en la Naturaleza, como lo es el indol y sus derivados. Este heterociclo posee una estructura clave presente en numerosos compuestos naturales y se trata, como se ha denominado previamente por algunos autores, del Señor de los Anillos de los compuestos aromáticos. Además, se prevé el estudio de las propiedades biológicas de los productos finales obtenidos en dichos procesos.

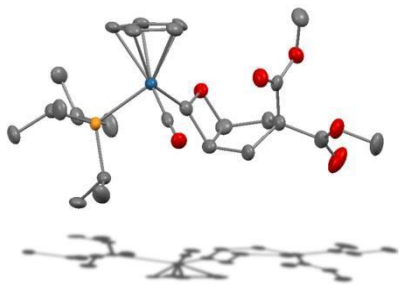
Organometálicos y Catálisis (IP: Ana Margarita López de Lama; Grupo Consolidado E35)

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.

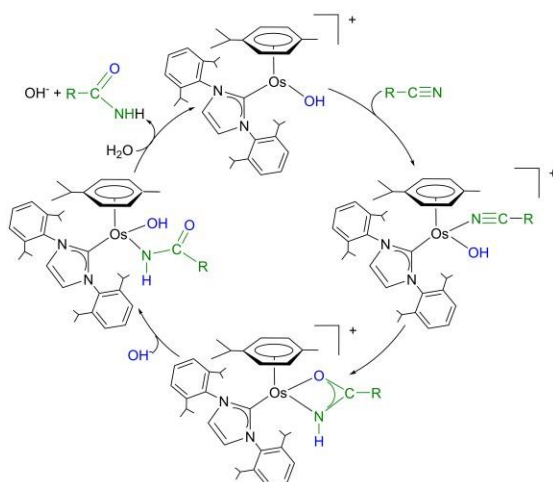
Los objetivos específicos del grupo Organometálicos y Catálisis son:

- i) Diseñar complejos de metales de transición eficientes en la ruptura inducida por la luz solar de la molécula de H₂O, para dar H₂ y O₂.
- 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.

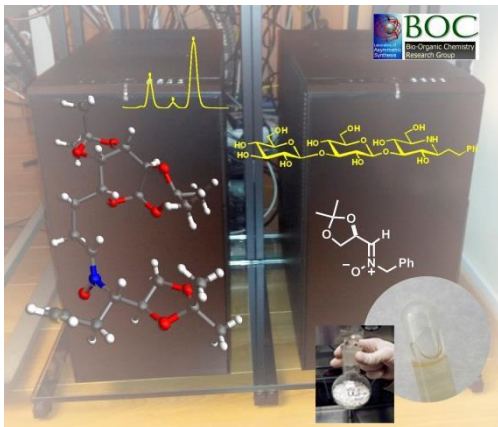


Primer complejo oxetilideno de metales de transición catalizada por el complejo [Os(OH)(η^6 -*p*-cimeno)(IPr)]OT



Mecanismo de la reacción de hidratación de nitrilos

Química Bioorgánica (IP: Tomás Tejero; 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.

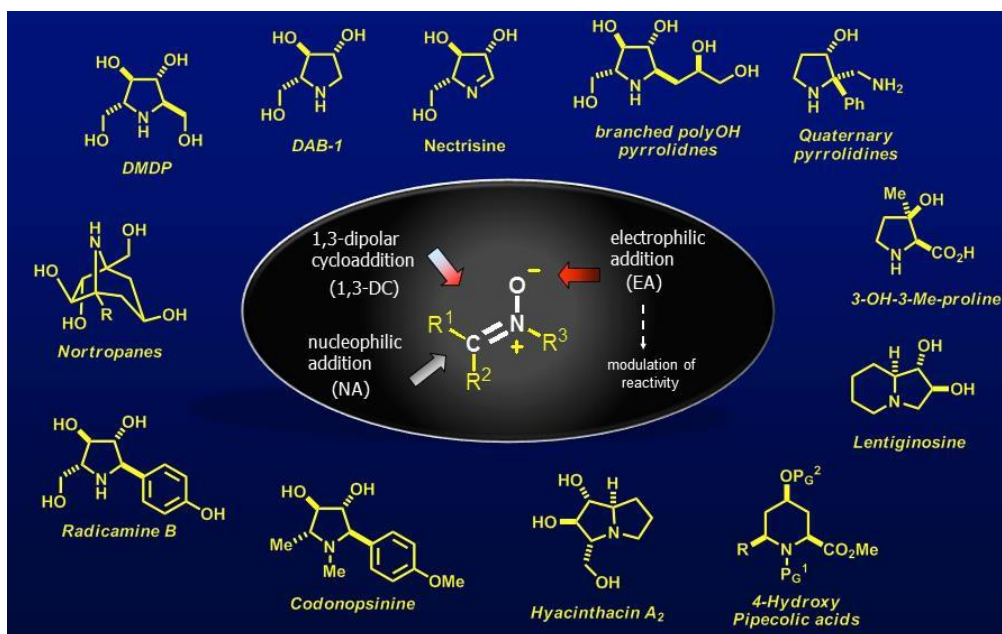
Línea de trabajo 1: Síntesis asimétrica de compuestos de interés biológico

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, aquéllas 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.

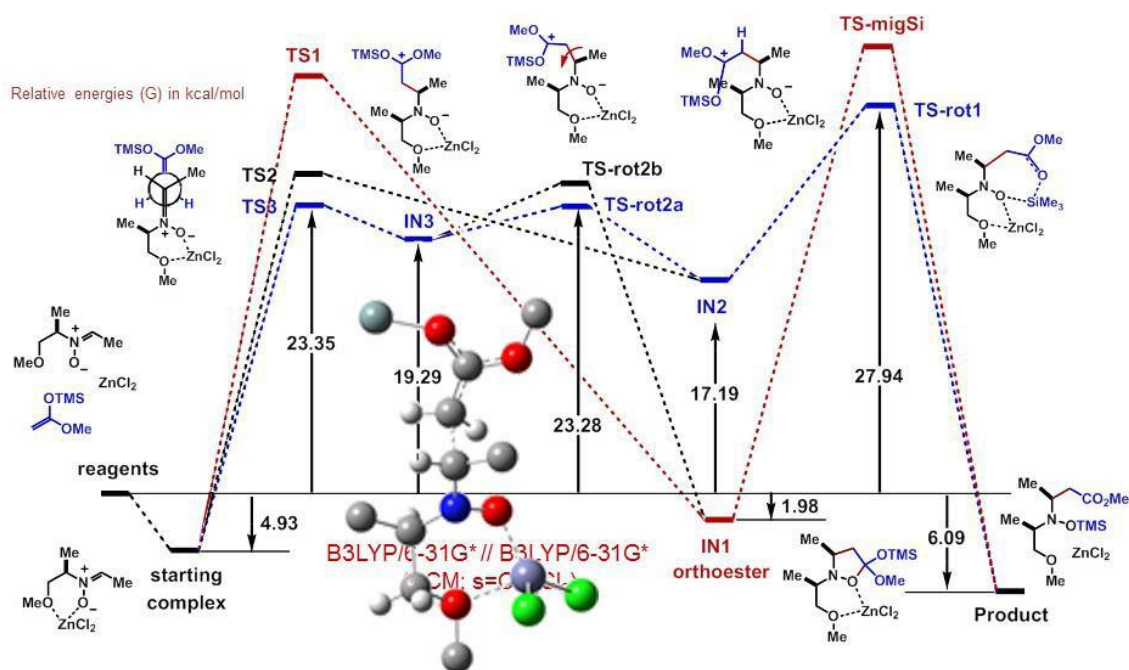


Línea de trabajo 2. Estudio teórico de reacciones orgánicas

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.

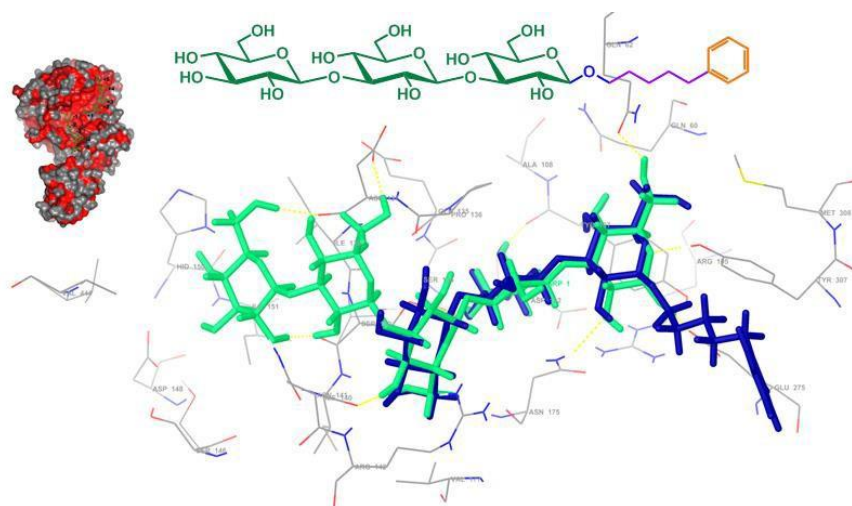
El grupo de investigación tiene acceso a potentes herramientas de cálculo a las que someter los problemas del laboratorio y evaluar computacionalmente los resultados obtenidos. Mediante esta línea de investigación nuestro grupo pretende, de una parte, modelizar las reacciones selectivas que llevamos 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

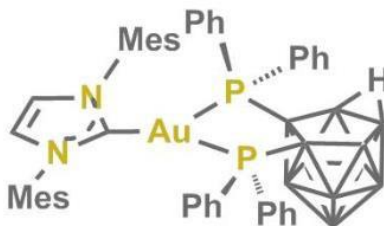
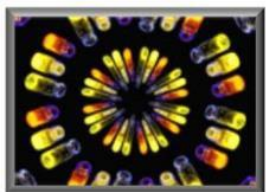
Un gran número de los compuestos estudiados en el Grupo de Química Bioorgánica se pretende que actúen como inhibidores y/o moduladores de enzimas relacionados con determinadas patologías que incluyen enfermedades autoinmunes, cáncer o infecciones fúngicas. Para establecer los modelos que operan en las 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 de Oro y Plata (IP: M. Concepción Gimeno; Grupo Consolidado E77)



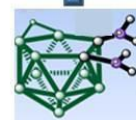
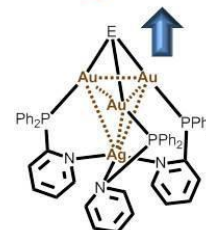
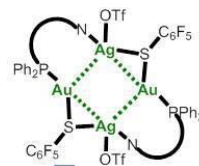
El interés del grupo se centra en el diseño y estudio de las propiedades luminiscentes y/o biológicas de nuevos compuestos metálicos del grupo 11 con el objetivo de obtener novedosos sensores, OLEDs, marcadores biológicos, agentes de contraste y/o compuestos con posible actividad bactericida, antitumoral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

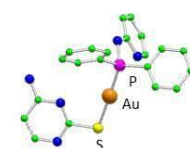
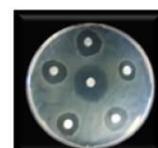
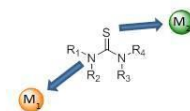
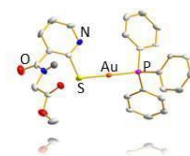


El uso de fluoróforos: La funcionalización y coordinación de metales a diferentes especies emisoras (fluoróforos), como especies aromáticas, que incluyen carboranos, de los que se ha mencionado su "aromaticidad en tres dimensiones" permiten modificar la energía e intensidad de las emisiones propias de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

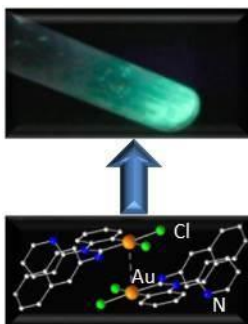
Línea de trabajo 2: Compuestos con propiedades biológicas

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.



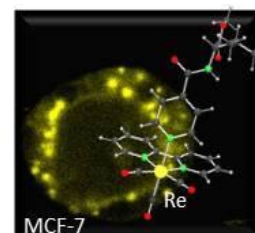
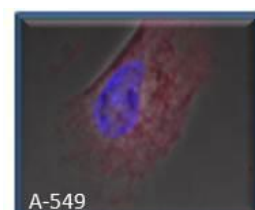
Línea de trabajo 3: Compuestos de Au(III) ortometalados y funcionalizados



El gran interés despertado por la química de los ciclometalados 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.



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 actualmente definidas 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 como emisores luminiscentes y/o sensores.

La tecnología LED ha emergido como la fuente de iluminación del futuro para reemplazar a las bombillas de luz incandescente (actualmente prohibidas) y a las lámparas fluorescentes. Esto supone una gran demanda de dispositivos LEDs y WLEDs (LEDs blancos).

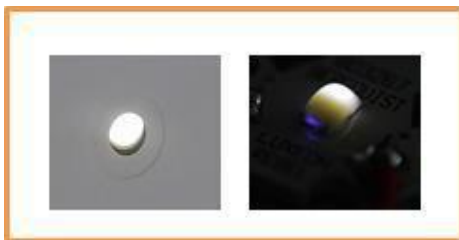
En nuestro grupo hemos preparado compuestos ciclometalados de Pt(II) luminiscentes con rendimientos cuánticos que en algunos casos alcanzan el 95%. Cambiando la naturaleza del grupo ciclometalado, de los ligandos auxiliares y del contraión así como controlando la existencia de interacciones Pt...Pt y/o pi-pi hemos sido capaces de preparar compuestos que emiten luz de forma eficiente en el azul, verde, amarillo, naranja y rojo.

Estas pequeñas moléculas tienen un alto potencial tecnológico, ya que hemos demostrado su capacidad para actuar:

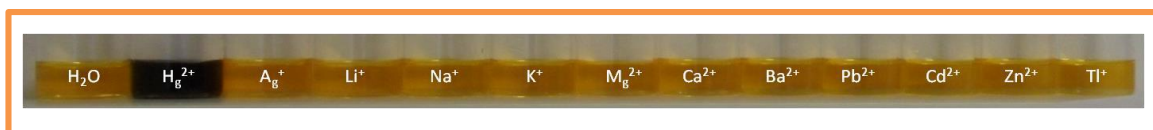
- como nariz electrónica para la detección de vapor de agua o de compuestos orgánicos volátiles (VOCs) en el aire. *Inorganic Chemistry* 2008, 47, 7166-7176.



- como componentes básicos en dispositivos emisores de luz blanca para iluminación. *Chemistry, a European Journal* 2015, 21, 1620-1631 y *Applied Materials & Interfaces* 2016, 8, 16160-16169.



- como sensores químicos selectivos para la detección en tiempo real de cantidades micromolares de mercurio (II) en agua. *Dalton Transactions* 2015, 44, 6936-6943.



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

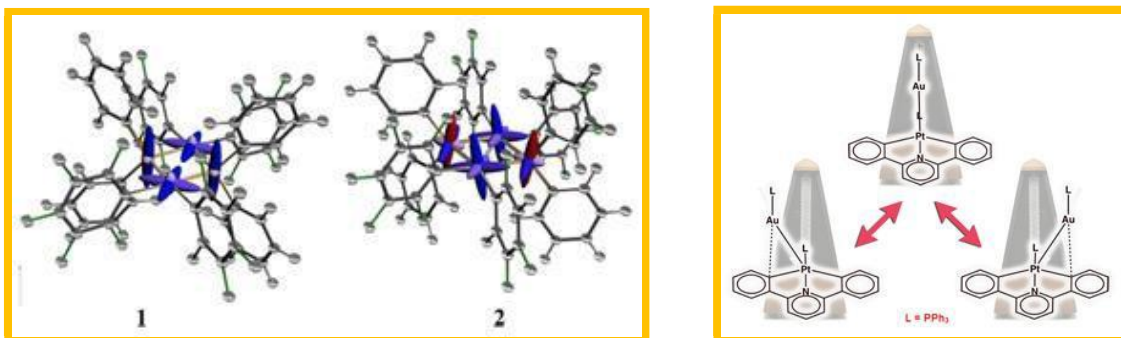
La preparación de trifluorometil-derivados de metales de transición, así como el estudio de sus propiedades físicas y de su reactividad, está siendo objeto de gran atención por parte de un buen número de laboratorios en el panorama internacional. Recientemente, el grupo de investigación también viene realizando sustanciosas aportaciones a éste área, usando principalmente los metales más pesados de la tercera serie de transición: Pt y Au.

Basándonos en los resultados obtenidos hasta la fecha, y siguiendo una línea de desarrollo natural, proponemos ampliar nuestro campo de acción a otros metales pesados del grupo del platino. Ello nos permitirá poner de manifiesto la influencia que pueda tener el metal en la estabilidad del enlace [M]-CF₃, y también su repercusión en la reactividad de dicha entidad química.



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.

El trabajo realizado hasta ahora con grupos fosfanuro ha demostrado que son excelentes ligandos para conseguir la síntesis de complejos polinucleares de platino específicos. Este grupo suele actuar como ligando puente entre dos centros metálicos a través del átomo de fósforo y ahora se conocen ejemplos de complejos polinucleares en los que los centros metálicos unidos a través del átomo de fósforo presentan estados de oxidación I, II, III y IV. Hemos observado recientemente que algunos difenilfosfuro-derivados de paladio y platino en altos estados de oxidación (III, IV) evolucionan a través de un acoplamiento reductor con ruptura del enlace M-P (M = Pd, Pt) y formación de nuevos enlaces P-X (X = C, N, O, P).



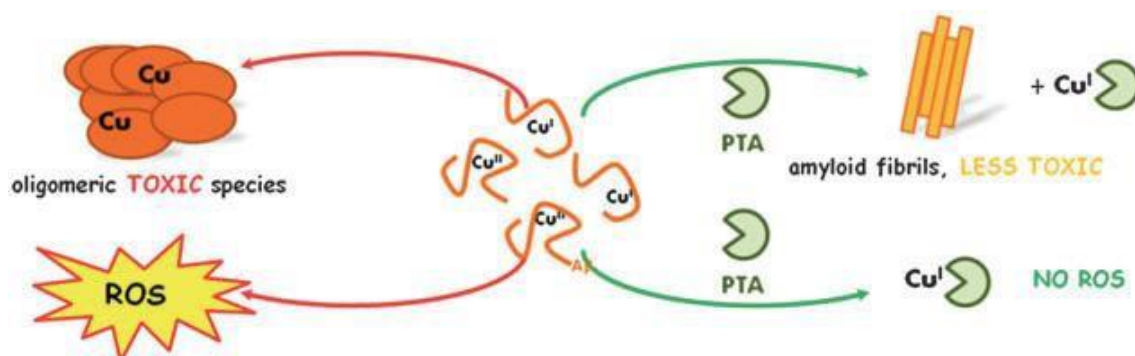
Línea de trabajo 4: Síntesis de complejos de metales de los grupos 7-10 con actividad antitumoral y/o de interés en procesos biológicos o industriales.

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: B/S/H, 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 Consolidado 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:

Línea de trabajo 1: Un paso en el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer (EA)



El uso de ligandos solubles en agua, en nuestro caso la fosfina PTA (1,3,5-triaza-7-fosfaadamantano) es capaz de “secuestrar” el cobre, presente en las placas amiloides características de la EA, en forma de $[Cu(PTA)_4]^+$ y disminuir la formación de ROS que son una de las causas de destrucción de las neuronas. El trabajo se ha desarrollado por el grupo de Química Organometálica Aplicada (QOA) (E. Atrian, E. Cerrada y M. Laguna) del Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH) en colaboración con la Dr. Christelle Hureau y el Prof. Peter Faller, del Laboratoire de Chimie de Coordination (LCC) de Toulouse y representa una visión original y un gran avance en el posible tratamiento de la enfermedad de Alzheimer.

Si bien los iones de Zn(II) pueden jugar un papel importante en el desarrollo de la enfermedad, interviniendo en la agregación de los péptidos, el Cu y el Fe no solo modulan la agregación sino que determinan la toxicidad de los oligómeros debido a su actividad redox. La interacción de Cu con $A\beta$ lleva a un incremento de la producción de ROS en presencia de agentes reductores (p.ej.: ascorbato).

Numerosos estudios se están centrando en la coordinación de los iones metálicos, en especial el Cu, a los péptidos $A\beta$, y toda su implicación en el desarrollo de Alzheimer, así como el desarrollo de nuevos ligandos que sean capaces de rescatar el Cu de los agregados, estabilizando uno de los estados de oxidación para inhibir la producción de ROS, y transferirlo a las metalotioneínas encargadas de su transporte en el organismo.

Nuestro trabajo en *Metalomics* 2015, DOI: 10.1039/C5MT00077G es el primer trabajo en la dirección de “secuestrar” el cobre como Cobre (I) lo que hemos conseguido con la fosfina PTA (1,3,5-triaza-7-fosfaadamantano), con la que hemos conseguido retirar el cobre como $[Cu(PTA)_4]^+$ y disminuir la formación de ROS, como se ha confirmado mediante estudios “in vitro” con la $A\beta_{16}$.

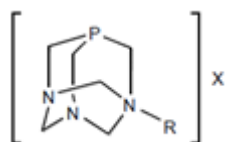
Línea de trabajo 2: Complejos metálicos contra el cáncer

Desde el descubrimiento casual de la quimioterapia, con la aplicación del agente naranja contra la leucemia y la introducción de metales como el *cis*-platino en el tratamiento del cáncer, se están ensayando numerosos compuestos frente a diferentes cepas de cáncer humano.

El grupo de Química Organometálica Aplicada (QOA) viene trabajando en esta área desarrollando ligandos solubles en agua que terminan confiriendo a compuestos de coordinación y organometálicos de Oro, Paladio y Platino esta solubilidad acuosa, y como consecuencia de ella una buena relación entre hidro y liposolubilidad. Esta relación se mide mediante logP que es el coeficiente de reparto entre agua y octanol, que debe de ser próximo a cero para que los compuestos puedan ser transportados por el plasma sanguíneo hasta las células cancerosas (hidrosolubles) pero puedan atravesar las membranas celulares (liposolubles). Varios de los compuestos sintetizados cumplen con esta propiedad y presentan prometedoras propiedades impidiendo la proliferación de células cancerosas mejor que lo que hace el *cis*-platino que es el que se usa como referencia.

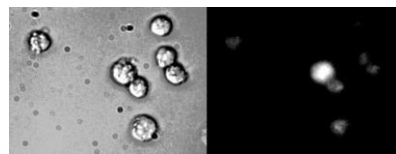
Se han presentado varias publicaciones en los años anteriores con la colaboración con institutos internacionales de prestigio como los dirigidos por Paul Dyson en Suiza y Angela Casini en Holanda. Este año han sido tres, "In vitro and in vivo evaluation of organometallic gold(I) derivatives as anticancer agents" en Dalton Transactions que es nuestra segunda aportación al estudio "in vivo" y que mereció la contraportada de la revista, "Synthesis of Gold(I) derivatives bearing alkylated 1,3,5-triaza-7-phosphaadamantane as selective anticancer metallodrugs" en Eur. J. Inorg. Chem y "Rosa Canina Extracts Have Antiproliferative and Antioxidant Effects on Caco-2 Human Colon Cancer", esta última en PLoS ONE.

Los principales hitos de estas publicaciones son

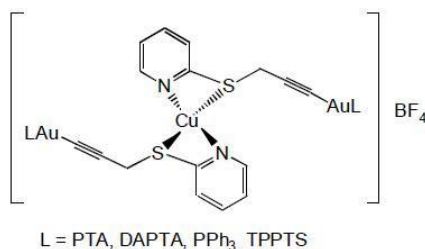
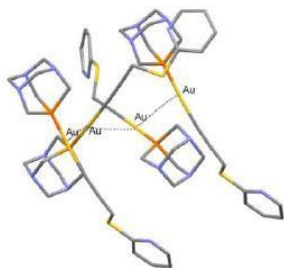


1.- Mediante modificación del ligando PTA (1,3,5-triaza-7-fosfaadamantano) podemos modificar "a la carta" las propiedades de solubilidad de nuestros compuestos

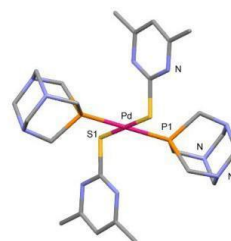
2.- La preparación de alquil derivados de Oro luminiscentes nos ha permitido poder ver, mediante epifluorescencia, como nuestros productos de Oro penetran en las células cancerosas y ver donde se fijan.



3.- La utilización de compuestos conteniendo dos metales diferentes (Oro y Cobre) nos permite estudiar la sinergia de los dos centros metálicos ya que su actividad anticancerígena es mucho mayor que la simple suma de los efectos de los dos metales por separado.



4.- La actividad encontrada en los compuestos de Paladio, incluso superior a los de Platino y sobre todo en cepas resistentes al cis-platino, abre un vía a la síntesis de fármacos más baratos y con menor dosis de aplicación, para aquellos casos de reincidencia después de la quimioterapia con cis-platino.



Línea de trabajo 3: Líquidos Iónicos Luminiscentes



El grupo de Química Organometálica Aplicada ha participado durante 4 años (Marzo 2010-diciembre 2013) en el Proyecto CENIT (Consortios Estratégicos Nacionales de Investigación Técnica) LIQUION con el objetivo general de Investigación en Tecnologías de Líquidos Iónicos para Aplicaciones Industriales. En este CENIT, que fue financiado con 17,5 millones de euros, han participado el elenco de empresas que figuran al margen. Entre empresas de talla internacional figuran también algunas pymes, pero con un extraordinario empuje en investigación. Este es el caso de la aragonesa IMPLASER con la que hemos realizado la preparación de LIQUIDOS IONICOS LUMINISCENTES para la implementación de las señales de seguridad que fabrica la empresa.

La investigación ha permitido la preparación de numerosos líquidos iónicos que conteniendo lantánidos, fundamentalmente Europio, Terbio y Disproseo mejoran las propiedades luminiscentes tanto en intensidad de la luminiscencia inicial como en el tiempo de decaimiento de la señal. Esta colaboración se ha extendido durante los últimos años desarrollando con la empresa IMPLASER nuevas y fructíferas colaboraciones que en el 2016 se han plasmado en el comienzo de una tesis de master para el desarrollo de nuevos pigmentos luminiscentes encapsulados con mejores propiedades. En la actualidad se está preparando un proyecto CIEN con IMPLASER y algunas de las compañías que ya formaron consorcio en el CENIT LIQUION y que figuran abajo.





Apartado 3. Estructura de financiación

3.1 Ingresos. Captación de recursos

Gobierno de Aragón

La financiación del Instituto para gasto corriente y de personal viene, en parte, determinada por la subvención concedida al amparo del Decreto 160/2009, de 9 de septiembre, del Gobierno de Aragón, por el que se modifica el Decreto 183/2006, de 5 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 propios de la Universidad de Zaragoza.

En el año 2017, la financiación obtenida por el ISQCH como Instituto Universitario de Investigación Mixto ascendió a **114.348,79 €**, concedida por la **ORDEN IJU/1381/2017, de 28 de agosto del Departamento de Innovación, Investigación y Universidad**. Este importe ha sido gestionado por el ISQCH a través del Servicio de Gestión de la Investigación de la Universidad de Zaragoza.

Universidad de Zaragoza

La financiación basal proporcionada en 2017 por la Universidad de Zaragoza (UZ) asciende a 2.338.655,44 €, correspondiente al coste de su personal permanente y personal contratado indefinido que son miembros del Instituto. Al respecto, se han incluido todos los conceptos retributivos realmente percibidos en el año 2017, así como las correspondientes cuotas patronales.

Personal UZ	Coste (€)
FUNCIÓNARIOS	
Catedrático de Universidad	530.694,06
Catedrático de Escuela Universitaria	55.374,94
Profesor Titular Universidad	1.081.054,89
Profesor Emérito	109.829,88
PAS	34.750,22
CONTRATADOS INDEFINIDOS	
Prof. Contratado Doctor	414.829,55
Prof. Ayudante Doctor	34.750,22
TOTAL	2.261.283,76

Existen otros conceptos (programas de formación, costes de mantenimiento, equipamiento, etc.) que son satisfechos bien por la UZ o bien por el CSIC, sin que hayan sido objeto de Convenio específico, ni la forma de cuantificar sus costes, ni la cuota o participación de cada Institución.

Agencia Estatal “Consejo Superior de Investigaciones Científicas”

Los costes totales del personal permanente del ISQCH perteneciente al Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), miembros del Instituto, ascienden a 1.619.217,49 €, incluyendo todos los conceptos retributivos realmente percibidos en el año 2017, así como las correspondientes cuotas patronales.

Personal CSIC	Coste total (€)
<u>Funcionarios</u>	
Profesor de investigación	595.490,54
Investigador científico	588.762,07
Científico titular	434.964,88
TOTAL	1.619.217,49

Asimismo, el coste del personal permanente técnico y de administración del CSIC destinado en el CEQMA asciende a 449.742,90 €, conforme al siguiente detalle:

Personal CSIC en CEQMA	Coste total (€)
Administración	227.144,45
Técnico	222.598,45
TOTAL	449.742,90

Por otro lado, el CEQMA recibió del CSIC en 2017 un importe de 24.126,21 € para gastos de funcionamiento.

Funcionamiento CEQMA	24.126,21 €
-----------------------------	--------------------

Considerando que un 45% de los ingresos obtenidos por el CEQMA son imputados al ISQCH (correspondiendo el 55% restante al ICMA). Este porcentaje es el que representa el personal investigador permanente de cada Instituto respecto el total de ambos.

	CSIC
Personal ISQCH	1.619.217,49 €
45% de funcionamiento CEQMA	10.856,79 €
45% de personal CEQMA	202.384,30 €
TOTAL	1.832.458,59 €

Resumen de ingresos por financiación basal

Conforme a lo expuesto hasta ahora, la financiación del ISQCH aportada por sus Instituciones cotitulares (CSIC y UZ) supone los siguientes importes:

Ingresos directos ISQCH		
CSIC	UZ	Total
1.832.458,59 €	2.261.283,76€	4.093.742,35 € €

Convocatorias públicas competitivas

Financiación obtenida en convocatorias competitivas de carácter público concedidas en 2017 agrupadas por ámbito del proyecto. Se han incluido aquellos proyectos en los que el IP es del Instituto y cuyo primer ingreso se realizó en 2017. Se han contabilizado por el importe total de la subvención concedida (incluyendo costes indirectos).

Ámbito del Proyecto	CSIC	UZ	Total
Europeo	0,00 €	0,00 €	0,00 €
Nacional	0,00 €	114.043,29 €	114.043,29 €
Autonómico	14.032,00 €	174.807,35 €	188.839,35 €
Otros proyectos	85.360,39 €	15.525 €	100.885,39 €
TOTAL	99.392,39 €	304.375,64 €	403.768,03 €

Investigación contratada

Financiación obtenida en 2017 de contratos con empresas, gestionada por la OTRI (UZ) o por la OTT (CSIC). Estas cifras incluyen los fondos obtenidos en el año (sin incluir el IVA) por:

- la facturación anual por venta de prestaciones de servicios realizadas por los investigadores del ISQCH;
- la facturación anual por venta de servicios científico-técnicos del CEQMA-CSIC, imputados al 45% al ISQCH;
- los contratos de investigación (o adendas) con IP del ISQCH cuyo primer ingreso se realizó en 2017, contabilizándose el importe total de cada proyecto.

Contratos con empresa	CSIC	UZ	Importe Total
TOTAL	30.000,00 €	440.676,16 €	470.676,16 €

Resumen de Financiación en 2017

Resumen de la financiación del ISQCH en el año 2017 según la institución gestora de los mismos.

Resumen Ingresos	CSIC	UZ	Total
Personal Fijo ISQCH	1.619.217,49 €	2.261.283,76 €	3.880.501,25 €
45% Personal CEQMA	202.384,30 €	0,00 €	202.384,30 €
45% Funcionamiento CEQMA	10.856,79 €	0,00 €	10.856,79 €
Financiación IUI-DGA	0,00 €	114.348,79 €	114.348,79 €
Convocatorias públicas	99.392,39 €	304.375,64 €	403.768,03 €
Investigación contratada	30.000,00 €	440.676,16 €	470.676,16 €
TOTAL	1.961.850,97 €	3.120.684,35 €	5.082.535,32 €

3.2 Estructura de gastos

Al ser el ISQCH un Instituto Mixto, es necesario distinguir entre los gastos del Instituto gestionados por UZ y por CSIC.

Respecto de los gastos ejecutados a través de UZ y CSIC en 2017 (incluidos los gastos del CEQMA imputados al ISQCH al 45%), la distribución del gasto en las diferentes partidas es la siguiente:

Concepto	CSIC	UZ	TOTAL
Personal Contratado	297.453,20 €	380.398,52 €	677.851,72 €
Fungible	239.857,32 €	70.008,70 €	309.866,02 €
Inventariable	95.222,01 €	61543,54 €	156.765,55 €
Viajes y Dietas	39.487,35 €	25.151,28 €	64.638,63 €
Reparaciones	36.438,97 €	(en gastos generales)	36.438,9 €7
Gastos generales y otros (conferencias, servicios, inscripciones...)	210.524,53 €	863.137,22 €	1.073.661,75 €
Total	918.983,38 €	1.400.239,26 €	2.319.222,64 €

Los gastos están recogidos sin incluir el importe del IVA soportado deducible por la respectiva Institución (CSIC o UZ).

No se incluyen los gastos correspondientes al personal de plantilla que se han detallado con anterioridad al cuantificar la financiación basal por Institución.

Apartado 4. Actividad Científica, Innovadora y Tecnológica

4.1. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Proyectos Internacionales

Proyecto: C-H Activation in Organic Synthesis (CHAOS).

I.P.: Michael Schnürch (Vienna University of Technology) (Esteban P. Urriolabeitia: miembro del Management Committee y participación como "secondary proposer" en el ISQCH)

Entidad financiadora: European Research Council, programa COST 2015 (CA15106)

Fecha de inicio: 21/03/2016 **Fecha de fin:** 20/03/2020

Proyecto: SOE1/P1/E0123. ALIANZA TECNOLÓGICA PARA COMPLETAR EL CICLO DE PRODUCCIÓN AGROINDUSTRIAL Y FORESTAL

I.P.: Responsable del grupo de la Univ. de Zaragoza: M^a Jesús Rodríguez Yoldi (Elena Cerrada en el ISQCH)

Entidad financiadora: SUDOE (Fondos FEDER)

Fecha de inicio: 01/01/2016 **Fecha de fin:** 31/12/2019

Importe: 1.011.000 € (125.000 euros/grupo UZ)

Proyecto: STARCELL: Advances STRategies foR substitution of Critical raw matERIALs in photovoltaics **Grant Agreement:** 720907

I.P.: Eduardo Saucedo, IREC (Mariano Laguna Castrillo en el ISQCH)

Entidad financiadora: Unión Europea Horizonte 2020. EU NMBP-03-2016

Fecha de inicio: 01/12/2016 **Fecha de fin:** 01/12/2019.

Importe: 4.832.189,00 €

Proyecto: PTDC/QEQ-QIN/3414/2014. MULTIFUNCTIONAL LUMINESCENT SPIN LABILE HYBRID MATERIALS

I.P.: Martínho, Paulo Nuno. Universidad de Lisboa (M. Concepción Gimeno Floría en el ISQCH)

Entidad financiadora: Fundação para a Ciência e Tecnologia

Fecha de inicio: 01/01/2016 **Fecha de fin:** 31/12/2018

Importe: 191.879,00 €

Proyecto: INV.1104-01-007-11. COMPUESTOS TRICOORDINADOS DE ORO(I) CON LIGANDOS NHC. APLICACIÓN EN EL DISEÑO DE OLEDs E IMAGEN CELULAR

I.P.: Visbal Acevedo, Renso. U de la Costa, Colombia (M. Concepción Gimeno Floría en el ISQCH)

Entidad financiadora: Universidad de la Costa (Colombia)

Fecha de inicio: 31/08/2016 **Fecha de fin:** 30/08/2018

Importe: 72.000,00 \$

Proyectos Nacionales



Proyecto: AYUDA ADICIONAL RAMON Y CAJAL RYC-2013-13800

I.P.: Rodríguez Martínez, Ricardo

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 01/09/2015 **Fecha de fin:** 31/08/2019

Importe: 40.000 €

Proyecto: (Retos de la Sociedad: BIO2015-69887-R) Biocatalizadores heterogéneos multifuncionales para la biosíntesis de 2-aminoalcoholes en un único reactor. Nuevos horizontes para la biología sintética en estado sólido

I.P.: Fernando López Gallego

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 01/01/16 **Fecha de fin:** 31/12/18

Importe: 95.590,00 €

Proyecto: CTQ2014-52367-R CATÁLISIS Y DISOLVENTES PARA PROCESOS DE BIORREFINERÍA SOSTENIBLES

I.P.: García Laureiro, Jose Ignacio

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 01/01/2015 **Fecha de fin:** 31/12/2017

Importe: 134.310 €

Proyecto: CTQ2014-52799-P COMPLEJOS DE METALES DE LOS GRUPOS 8 Y 9 PARA LA ACTIVACIÓN Y FORMACIÓN DE ENLACES SIGMA: DESHIDROGENACIÓN DE AMONIACO-BORANO Y BORILACIÓN DE MOLECULAS ORGÁNICAS

I.P.: Esteruelas Rodrigo, Miguel Ángel

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 01/01/2015 **Fecha de fin:** 31/12/2017

Importe: 272.250 €

Proyecto: CTQ2014-53033-P MODELOS FUNCIONALES EN ACTIVACIÓN DE OXÍGENO, ENLACES MÚLTIPLES METAL-LIGANDO Y NANOESTRUCTURAS METALORGANICAS

I.P.: Tejel Altarriba, Maria Cristina

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 01/01/2015 **Fecha de fin:** 31/12/2017

Importe: 181.500 €

Proyecto: CTQ2015-70371-REDT. RED DE EXCELENCIA EN METALES EN TERAPIA Y DIAGNÓSTICO

I.P.: Gámez, Patrick (en el ISQCH María Concepción Gimeno, María Dolores Villacampa, Vanesa Fernández Moreira, Lourdes Ortego)

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 01/10/2015 **Fecha de fin:** 31/12/2017

Importe: 30.000 €

Proyecto: CTQ2015-64486-R CATALIZADORES DE OXIGENACIÓN Y DE OXID. DE AGUA

I.P.: Martínez Martínez, Jesús Ignacio. Sola Larraya, Eduardo

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 01/01/2016 **Fecha de fin:** 31/12/2018

Importe: 127.050,00 €

Proyecto: CTQ2015-66079-P NUEVAS ESTRATEGIAS DE ACTIVACIÓN CATALÍTICA ENANTIOSELECTIVA BASADAS EN COMPLEJOS DE METALES DE TRANSICIÓN

I.P.: Lahoz Diaz, Fernando. Carmona Gascon, Jose Daniel

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 01/01/2016 **Fecha de fin:** 31/12/2018

Importe: 129.228,00 €

Proyecto: CTQ2015-67366-P: ACTIVACIÓN DE NH₃ Y CO₂ POR COMPLEJOS DE RODIO E IRIDIO Y SU APLICACIÓN EN EL DESARROLLO DE PROCESOS CATALÍTICOS PARA LA SÍNTESIS DE COMPUESTOS DE ALTO VALOR AÑADIDO

I.P.: Casado Lacabra, Miguel Ángel. Polo Ortiz, Victoriano

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 01/01/2016 **Fecha de fin:** 31/12/2018

Importe: 112.651,00 €

Proyecto: CTQ2015-67461-P COMPUESTOS ORGANOMETALICOS IMPLICADOS EN PROCESOS REDOX Y/O FOTOINDUCIDOS

I.P.: Menjon Ruiz, Babil

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 01/01/2016 **Fecha de fin:** 31/12/2018

Importe: 193.237,00 €

Proyecto: MAT2015-68200-C2-1-P: MATERIALES MOLECULARES MAGNÉTICOS MULTIFUNCIONALES PARA CONDUCCIÓN EN CRISTALES FLEXIBLES Y CONTROL DE QUIRALIDAD MAGNÉTICA

I.P.: Tomas Lisbona, Milagros. Falvello, Lawrence Rocco

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 01/01/2016 **Fecha de fin:** 31/12/2018

Importe: 71.148,00 €

Proyecto: CTQ2016-75816-C2-1-P APLICACIONES DE COMPUESTOS DE ORO EN FOTOFISICA, MEDICINA Y CATÁLISIS

I.P.: Gimeno Floría, María Concepción

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 30/12/2016 **Fecha de fin:** 29/12/2019

Importe: 180.290 €

Proyecto: CTQ2016-75884-P: ARQUITECTURAS METAL-LIGANDO CON APLICACIÓN AL DISEÑO DE CATALIZADORES HOMOGÉNEOS E HÍBRIDOS

I.P.: Pérez Torrente, Jesús Julián y Jiménez Rupérez, M. Victoria

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 30/12/2016 **Fecha de fin:** 29/12/2019

Importe: 165.770,00 €

Proyecto: CTQ2016-76155-R: DISEÑO RACIONAL DE GLICOMIMÉTICOS INHIBIDORES DE GLICOSILTRANSFERASAS

I.P.: Merino Filella, Pedro

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 30/12/2016 **Fecha de fin:** 29/12/2019

Importe: 174.240,00 €

Proyecto: CTQ2013-40855-R. AMINOÁCIDOS NO PROTEICOS Y DERIVADOS PARA APLICACIONES EN AGROQUÍMICA Y BIOMEDICINA

I.P.: Jimenez Sanz, Ana Isabel. Cativiela Marín, Carlos Alberto

Entidad financiadora: MINECO

Fecha de inicio: 01/01/2014 **Fecha de fin:** 31/12/2017

Importe: 131.890 €

Otros proyectos

Proyecto: Dotación adicional ayuda Juan De La Cierva incorporación

I.P.: Di Giuseppe, Andrea

Entidad financiadora: (JCI-2015-27029 Ministerio de Economía y Competitividad)

Fecha de inicio: 12/1/2017 **Fecha de fin:** 11/1/2019

Importe: 6.000,00 €

Proyecto: Biosensores para el diagnóstico y pronóstico de enfermedades neurodegenerativas

I.P.: Rosario Osta Pinzolas, en el ISQCH Mariano Laguna

Entidad financiadora: Consorcio Campus Iberus

Fecha de inicio: 01/01/2017 **Fecha:** 31/12/2018

Importe: 17.500,00 €

Proyecto: UZ2015-CIE-04: FIJACIÓN Y TRANSFORMACIÓN CATALÍTICA DE CO₂

I.P.: Fernández Álvarez, Francisco José

Entidad financiadora: VIC. INV. - APOYO INV.

Fecha de inicio: 01/10/2017 **Fecha de fin:** 30/09/2018

Importe: 2.250 €

Proyecto: PTAUZ-2016-CIE-02: CONTRATACIÓN DE UN LICENCIADO PARA EL SERVICIO DE CROMATOGRAFÍA Y ESPECTROSCOPIA DEL ISQCH

I.P.: Lahoz Diaz, Fernando

Entidad financiadora: UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

Fecha de inicio: 01/12/2016 **Fecha de fin:** 31/01/2018

Importe: 9.000,00 €

Proyecto: HYSTORAGE

I.P.: Mariano Laguna

Entidad financiadora: Universidad Pública de Navarra (CEQMA)

Fecha de inicio: 01/05/2017 **Fecha de fin:** 31/12/2017

Importe: 4.840 €

Proyecto: (OTRI 2017/1038) SENSORES

I.P.: Mariano Laguna

Entidad financiadora: Universidad Pública de Navarra

Fecha de inicio: 01/05/2017 **Fecha de fin:** 31/12/2017

Importe: 6.800 €

Proyecto: Estudio estructural (I, II)

I.P.: Mariano Laguna

Entidad financiadora: Universidad Pública de Navarra (CEQMA 2017)

Fecha de inicio: 01/05/2017 **Fecha de fin:** 31/12/2017

Importe: 7.140 €

Proyecto: PIE 201680I011. PREPARACIÓN DE COMPLEJOS DE RODIO CON LIGANDOS N-HETEROCICLOS Y SU ESTUDIOS COMO CATALIZADORES EN REACCIONES DE ACOPLAMIENTO C-C Y C-X

I.P.: Castarlenas Chela, Ricardo

Entidad financiadora: CSIC

Fecha de inicio: 06/07/2016 **Fecha de fin:** 05/07/2017

Importe: 9.000,00 €

Proyecto: PIE 20160E084102 MEJORA DE LA EFICIENCIA DE ESPECTRÓMETROS DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR EN INSTITUTOS DE INVESTIGACIÓN

I.P.: Díaz De Villegas Solans, María Dolores

Entidad financiadora: CSIC

Fecha de inicio: 01/11/2016 **Fecha de fin:** 31/10/2017

Importe: 24.450 €

Proyecto: UZCUD2016-CIE-05: CATALIZADORES METÁLICOS ENANTIOSELECTIVOS BASADOS EN LIGANDOS TETRADENTADOS.

I.P.: Rodríguez Martínez, Ricardo (UZ), Vincenzo Passarelli (CUD)

Entidad financiadora: CUD

Fecha de inicio: 01/11/2016 **Fecha de fin:** 30/09/2017

Importe: 2.250,00 €

Proyecto: PIE 201380E077. ADAPTACIÓN DE LOS SISTEMAS DE CALIDAD PARA LA MEJORA EN COMPETITIVIDAD CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA DE LOS LABORATORIOS DE INVESTIGACIÓN Y DE LOS SERVICIOS CIENTÍFICO-TÉCNICOS DEL CEQMA

I.P.: Lahoz Díaz, Fernandol

Entidad financiadora: CSIC

Fecha de inicio: 16/05/2013 **Fecha de fin:** 15/05/2017

Importe: 143.898,49 €

Proyectos Empresas

Proyecto: AMINOÁCIDOS PARA APLICACIONES FARMACEÚTICAS Y AGROALIMENTARIAS

I.P.: Cativiela Marín, Carlos Alberto

Entidad financiadora: VARIOS

Fecha de inicio: 01/11/2015 **Fecha de fin:** 31/10/2020

Proyecto: MEJORA Y CARACTERIZACIÓN DE POLÍMEROS Y MATERIALES LUMINISCENTES PARA LEDS Y SENSORES ÓPTICOS

I.P.: Casas del Pozo, José María

Entidad financiadora: VARIOS

Fecha de inicio: 01/11/2015 **Fecha de fin:** 31/10/2020

Proyecto: QUÍMICA ORGANOMETÁLICA APLICADA

I.P.: Castrillo, Mariano

Entidad financiadora: VARIOS

Fecha de inicio: 01/11/2015 **Fecha de fin:** 31/10/2020

Proyecto: SÍNTESIS QUÍMICA Y CATÁLISIS

I.P.: Cativiela Marín, Carlos Alberto

Entidad financiadora: VARIOS

Fecha de inicio: 01/11/2015 **Fecha de fin:** 31/10/2020

Proyecto: TRANSFORMACIONES DE MATERIAS PRIMAS RENOVABLES

I.P.: Mayoral Murillo, José Antonio

Entidad financiadora: VARIOS

Fecha de inicio: 01/11/2015 **Fecha de fin:** 31/10/2020

Proyecto: ESTUDIO Y DESARROLLO DE VIDRIOS FOTOCATALÍTICOS PARA LA ELIMINACIÓN DE CONTAMINANTES

I.P.: Pérez Torrente, Jesús Julián. Iglesias Alonso, Manuel

Entidad financiadora: ARIÑO DOUGLASS

Fecha de inicio: 09/09/2016 **Fecha de fin:** 08/09/2019

Importe: 20.000,00 €

Proyecto: Desarrollo de nuevas tecnologías de decoración en el sector cerámico

I.P.: Mayoral Murillo, José Antonio

Entidad financiadora: DECOROIL, S.L.

Fecha de inicio: 01/01/2017 **Fecha de fin:** 31/12/2018

Proyecto: (OTRI 2017/0377) Obtención de sal de evaporación de elevada pureza y alto valor añadido a partir de fracción de rechazo

I.P.: Lahoz Díaz, Fernando J. y Pérez-Torrente, Jesús J.

Entidad financiadora: Ibérica de Sales S. A.

Fecha de inicio: 01/05/2017 **Fecha de fin:** 30/06/2018

Importe: 41.745,00 €

Proyecto: (OTRI 2017/0286) Optimización sintética de un aminoácido bioactivo

I.P.: Cativiela Marín, Carlos

Entidad financiadora: Just Global Communication & International Marketing

Fecha de inicio: 01/06/2017 **Fecha de fin:** 31/05/2018

Importe: 14.520,00 €

Proyecto: (OTRI 2015/0231) CONFIDENCIAL

I.P.: Herrerías Larripa, Clara Isabel

Entidad financiadora: Solutex S.L., Soluciones Extractivas Alimentarias, S.L. Univ. de Zaragoza

Fecha de inicio: 15/05/2015 **Fecha de fin:** 14/05/2018

Importe: 20.000,00 €

Proyecto: Amendment N° 2 to the research project in the area of osmium- based phosphorescent emitter oled materials

I.P.: Esteruelas Rodrigo, Miguel Ángel

Entidad financiadora: UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION

Fecha de inicio: 01/04/2016 **Fecha de fin:** 31/03/2018

Importe: 418.934,00 €

Proyecto: Nuevas formulaciones metálicas basadas en ligandos activos LAM

I.P.: Laguna Castrillo, Mariano

Entidad financiadora: TORRECID, S.A.

Fecha de inicio: 16/11/2015 **Fecha de fin:** 15/02/2018

Importe: 72.600,00 €

Proyecto: (OTRI 2017/0061) Trabajos de investigación en química orgánica

I.P.: Catiuela Marín, Carlos

Entidad financiadora: Rolabo

Fecha de inicio: 01/01/2017 **Fecha de fin:** 31/12/2017

Importe: 51.158,00 €

Proyecto: (OTRI 2017/1094) DESARROLLO DE INSTRUMENTACIÓN PARA EL SEGUIMIENTO CINÉTICO DE REACCIONES

I.P.: Sola Larraya, Eduardo

Entidad financiadora: Varias empresas

Fecha de inicio: 01/01/2017 **Fecha de fin:** 31/12/2017

Proyecto: (OTRI 2017/0168) CERTIFICACIÓN DE PROYECTOS DE I+D+I

I.P.: Laguna Castrillo, Mariano

Entidad financiadora: AENOR

Fecha de inicio: 01/01/2017 **Fecha de fin:** 31/12/2017

Importe: 600 €

Proyecto: AFFINITY COATINGS

I.P.: Baya García, Miguel

Entidad/es financiadora: BSH ELECTRODOMESTICOS ESPAÑA, S.A.

Fecha de inicio: 01/01/2017 **Fecha de fin:** 21/12/2017

Importe: 41.994,26 €

Proyecto: (OTRI 2017/0284) Servicio de apoyo tecnológico: Caracterización de productos químicos para uso antimicrobiano

I.P.: Fernández Álvarez, Francisco J. y Pérez-Torrente, Jesús J.

Entidad financiadora: BSH Electrodomésticos España S. A.

Fecha de inicio: 14/06/2017 **Fecha de fin:** 14/12/2017

Importe: 14.235,00 €

Proyecto: Preparación de nuevos materiales con aplicaciones tecnológicas (Verónica Iguarbe)

I.P.: Ana Isabel Elduque Palomo

Entidad financiadora: Cátedra IQE (Industrias Químicas del Ebro)

Fecha de inicio: 01/09/2014 **Fecha de fin:** 31/07/2017

Proyecto: (OTRI 2016/0528) CONFIDENCIAL

I.P.: Pires Ezquerro, María Elisabet

Entidad financiadora: BIOSYNCAUCHO, S.L.

Fecha de inicio: 04/11/2016 **Fecha de fin:** 03/05/2017

Importe: 10.890,00 €

Proyecto: Síntesis de compuestos orgánicos de interés farmacéutico

I.P.: Catiuela Marín, Carlos Alberto

Entidad financiadora: INDUSTRIAL FARMACEÚTICA CANTABRIA, S.A.

Fecha de inicio: 01/03/2016 **Fecha de fin:** 28/02/2017

4.2. PUBLICACIONES

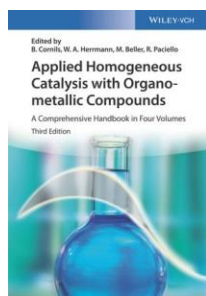
Libro



Autores: Ana I. Elduque y Concepción Aldea
Libro: Científicamente OBJETIVO
Ed.: Facultad de Ciencias. Universidad de Zaragoza
ISBN: 978-84-16723-09-6.
Depósito Legal: Z-397-2017.
e-book: ISBN: 978-84-16723

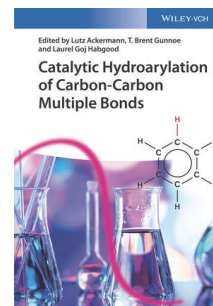
https://ciencias.unizar.es/sites/ciencias.unizar.es/files/users/fmlou/pdf/Proyeccion_social/cientificamente_objetivo.pdf

Capítulo de libro



Autores: M. A. Esteruelas, M. Oliván
Capítulo: C-H Activation Coupling Reactions
Series: Applied Homogeneous Catalysis with Organometallic Compounds: A Comprehensive Handbook in Four Volumes 3rd Edition
Editores: B. Cornils, W. A. Herrmann, M. Beller, R. Paciello
Editorial: Wiley, 2017, capítulo 23, páginas 1307-1332
ISBN: 978-3-527-32897-0

Autores: Pedro Villuendas, Sara Ruiz, Esteban P. Urriolabeitia
Capítulo: Functionalization of Heteroaromatic Substrates using Group 9 and 10 Catalysts
Libro: Hydroarylation of multiple bonds.
Editores: Prof. Dr. Thomas Brent Gunnoe, Prof. Dr. Laurel Goj and Prof. Dr. Lutz Ackermann.
Editorial: WILEY-VCH. Diciembre 2017, pag 5-47
ISBN: 978-3-527-34013-2



Resumen Artículos

Artículos publicados en revistas científicas de carácter internacional.

Índice Impacto	Nº Art.
≥ 10	3
6 - 10	11
5-6	19
4-5	25
3-4	27
2-3	18
1-2	2
≤1	5
Sin Índice	5
Nº Artículos	116

F. Impacto 2016	Revista	Nº Art.
13.324	COORDINATION CHEMISTRY REVIEWS*	1
11.994	ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION*	1
10.614	ACS CATALYSIS*	1
9.446	APPLIED CATALYSIS B-ENVIRONMENTAL*	1
9.125	GREEN CHEMISTRY*	2
8.668	CHEMICAL SCIENCE*	2
8.640	SMALL*	1
7.226	CHEMSUSCHEM*	1
6.337	CARBON*	1
6.319	CHEMICAL COMMUNICATIONS*	3
5.951	ACS SUSTAINABLE CHEMISTRY & ENGINEERING*	2
5.773	CATALYSIS SCIENCE & TECHNOLOGY*	1
5.646	ADVANCED SYNTHESIS & CATALYSIS*	3
5.401	SENSORS AND ACTUATORS B-CHEMICAL*	1
5.317	CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*	12
4.955	ORGANIC CHEMISTRY FRONTIERS*	1
4.857	INORGANIC CHEMISTRY*	7
4.849	JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*	3
4.803	CHEMCATCHEM*	2
4.536	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C*	1
4.211	JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A-CHEMICAL*	1
4.208	CHEMOSPHERE*	1
4.123	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*	1
4.099	ACTA CRYSTALLOGRAPHICA SECTION C- STRUCTURAL CHEMISTRY*	1
4.055	CRYSTAL GROWTH AND DESIGN*	1
4.029	DALTON TRANSACTIONS*	6
3.862	ORGANOMETALLICS*	12

3.855	CHEMICAL RECORD	1
3.833	LANGMUIR*	1
3.615	MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS*	1
3.564	ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY*	3
3.516	ENVIRONMENTAL CHEMISTRY*	1
3.348	JOURNAL OF INORGANIC BIOCHEMISTRY*	2
3.226	INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES	1
3.225	CHEMMEDCHEM	1
3.108	RSC ADVANCES	2
3.082	CATALYSTS	1
3.075	CHEMPHYSICHEM	1
2.894	JOURNAL OF BIOLOGICAL INORGANIC CHEMISTRY	1
2.861	MOLECULES	2
2.834	EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY	1
2.651	TETRAHEDRON	2
2.650	SYNTHESIS-STUTT GART	3
2.444	EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY	4
2.337	BEILSTEIN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY	1
2,238	CURRENT EYE RESEARCH	1
2.126	TETRAHEDRON ASYMMETRY	1
2.047	FOOD ADDITIVES AND CONTAMINANTS PART A	1
2.002	INORGANICA CHIMICA ACTA	1
1.879	COMPTES RENDUS CHIMIE	1
1.860	JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE	1
0.763	POWDER DIFFRACTION	1
0.710	JOURNAL OF THE MEXICAN CHEMICAL SOCIETY	1
0.493	SOLID STATE PHENOMENA	2
0.327	JOURNAL OF THE CHEMICAL SOCIETY OF PAKISTAN	1
	Nº Total Artículos Indexados 2017	110

* Revistas incluidas en el primer cuartil de su campo científico

Sin factor de impacto	Revista	Nº Art.
	ACS OMEGA	1
	SEGURIDAD Y SALUD EN EL TRABAJO	1
	PHYSICAL REVIEW B	1
	JOURNAL OF ANIMAL BEHAVIOUR AND BIOMETEOROLOGY	1
	EDUCACIÓN QUÍMICA	1
	Nº Total Artículos no Indexados 2017	5

Artículos

Monoanionic NSiN-type ligands in transition metal coordination chemistry and catalysis

Fernández-Alvarez, F.J.; Lalrempuia, R.; Oro, L.A.
 Coord. Chem. Rev. 2017. F. I.: 13.324

A Stable Monomeric SiO₂ Complex with Donor-Acceptor Ligands

Rodríguez, R.; Gau, D.; Saouli, J.; Baceiredo, A.; Saffon-Merceron, N.; Branchadell, V.; Kato, T.
 Angew. Chem. 14 - 56. 3935-3939. 2017. F. I.: 11.994

“Push–Pull π^+/π^- ” (PPpp) systems in catalysis

Alegre-Requena, Juan V.; Marqués-López, Eugenia; Herrera, Raquel P.
 ACS Catal. 7. 6430-6439. 2017. F. I.: 10.614. (Cover under invitation)

Catalytic steam reforming of the aqueous fraction of bio-oil using

Bimbela, F.; Ábrego, J.; Puerta, R.; García, L.; Arauzo, J.
 Appl Catal. B-Environ. 209. 346-357. F. I.: 9446

Fatty acid based biocarbonates: Al-mediated stereoselective preparation of mono-, di- and tricarbonates under mild and solvent-less conditions

Carrodegua, L.P.; Cristòfol, À.; Fraile, J.M.; Mayoral, J.A.; Dorado, V.; Herrerías, C.I.; Kleij, A.W.
 Green Chem. 15 - 19. 3535-3541. 2017. F. I.: 9.125

Synthesis of 3-alkoxypropan-1,2-diols from glycidol: experimental and theoretical studies for the optimization of the synthesis of glycerol derived solvents

Leal-Duaso, Alejandro; Caballero, M.; Urriolabeitia, Asier; Mayoral Murillo, José Antonio; García Laureiro, José Ignacio; Pires Ezquerro, María Elisabet
 Green Chem. 17 - 19. 4176–4185. 2017. F. I.: 9.125

A well-defined NHC-Ir(III) catalyst for the silylation of aromatic C-H bonds: Substrate survey and mechanistic insights

Rubio-Pérez, L.; Iglesias, M.; Munárriz, J.; Polo, V.; Passarelli, V.; Pérez-Torrente, J.J.; Oro, L.A.
 Chem. Sci. 7 - 8. 4811-4822. 2017. F. I.: 8.668

Racemic hemiacetals as oxygen-centered pronucleophiles triggering cascade 1, 4-addition/Michael reaction through dynamic kinetic resolution under iminium catalysis. Development and mechanistic insights

Orue, A.; Uria, U.; Roca-López, D.; Delso, I.; Reyes, E.; Carrillo, L.; Merino, P.; Vicario, J. L.
 Chem. Sci. 4 - 8. 2904-2913. 2017. F. I.: 8.668

Multistimuli response micro- and nanolayers of a coordination polymer based on Cu₂I₂ chains linked by 2-aminopyrazine

J. Conesa-Egea, J. Gallardo-Martínez, S. Delgado, J. I. Martínez, J. González-Platas, V. Fernández-Moreira, U. R. Rodríguez-Mendoza, P. Ocón, F. Zamora, P. Amo-Ochoa
 Small, 2017, 13, 1700965. 2017. F. I.: 8.640

Origin of the excellent performance of Ru on nitrogen-doped

Roldán, L.; Marco, Y.; García-Bordejé, E.
 Chemsuschem. 10-6. 1139–1144. 2017. F. I.: 7.226

Parametric study of the hydrothermal carbonization of cellulose and effect of acidic conditions

García-Bordejé, E.; Pires, E.; Fraile, J.M.
 Carbon. 123. 421-432. 2017. F. I.: 6.337

A route to small clusters: a twisted half-hexagram-shaped M₄(OH)₄ cluster and its capacity for hosting closed-shell metals

Ara, M. A. García-Monforte, R. González, L. R. Falvello, M. Tomás

Chem. Commun. 53. 13121-13124. 2017. F. I.: 6.319

Efficient preparation of carbamates by Rh-catalysed oxidative carbonylation: Unveiling the role of the oxidant

Iturmendi, A.; Iglesias, M.; Munárriz, J.; Polo, V.; Pérez-Torrente, J. J.; Oro, L. A.

Chem. Commun. 2 - 53. 404-407. 2017. F. I.: 6.319

A stable gold(I)-enyne species obtained by alkyne carboauration in a complex rearrangement

Cámara, J.; Blanco, M. C.; Laguna, A.; Naumov, P.; Gimeno, M. C.

Chem. Commun. 53. 9202-9205. 2017. F. I.: 6.319

Metal-free [2 + 2]-photocycloaddition of (z)-4-arylidene-5(4h)-oxazolones as straightforward synthesis of 1, 3-diaminotruaxillic acid precursors: synthetic scope and mechanistic studies

García-Montero, A.; Rodríguez, A.M.; Juan, A.; Velders, A.H.; Denisi, A.; Jiménez-Osés, G.; Gómez-Bengoa, E.; Cativiela, C.; Gómez, M.V.; Urriolabeitia, E.P.

ACS Sust. Chem. & Eng. 9 - 5. 8370-8381. 2017. F. I.: 5.951

Role of substituents in the solid acid-catalyzed cleavage of the β -O-4 linkage in lignin models

J. M. Fraile, J. I. García, Z. Hormigón J. A. Mayoral, C. J. Saavedra, L. Salvatella

ACS Sust. Chem. & Eng. 6-2. 1837-1847. 2017. F. I.: 5.951

Iridium-NSiN catalyzed formation of silylphosphinecarboxylates from the reaction of CO₂ with P(SiMe₃)R₂ (R = Ph, Cy)

Julián, A.; Polo, V.; Fernández-Alvarez, F.J.; Oro, L.A.

Catal. Sci. Technol. 6 - 7. 1372-1378. 2017. F. I.: 5.773

Organocatalytic enantioselective synthesis of 1, 4-dihydropyridines

Auria-Luna, F.; Marqués-López, E.; Herrera, R.P.

Adv. Synth. Catal. 13 - 359. 2161-2175. 2017. F. I.: 5.646

Organocatalytic enantioselective synthesis of trifluoromethyl-containing tetralin derivatives by sequential (hetero)Michael reaction-intramolecular nitrone cycloaddition

Rabasa-Alcañiz, F.; Torres, J.; Sánchez-Roselló, M.; Tejero, T.; Merino, P.; Fustero, S.; del Pozo, C.

Adv. Synth. Catal. 21 - 359. 3752-3764. 2017. F. I.: 5.646

A case study of thiourea-assisted iminium formation by hydroxyl anion binding: kinetic, spectroscopic and computational evidences

Juste-Navarro, V.; Prieto, L.; Delso, I.; Manzano, R.; Tejero, T.; Reyes, E.; Vicario, J.L.; Merino, P.

Adv. Synth. Catal. 359, 4122-4128. F. I.: 5.646

Magnetite as a platform material in the detection of glucose, ethanol and cholesterol

Jaime, J.; Rangel, G.; Muñoz-Bonilla, A.; Mayoral, A.; Herrasti, P.

Sens. Actuators, B, Chem. 238. 693-701. 2017. F. I.: 5.401

(CF₃)₃Au as a highly acidic organogold(III) fragment

Pérez-Bitrián, A.; Baya, M.; Casas, J.M.; Falvello, L.R.; Martín, A.; Menjón, B.

Chemistry (Weinh.). 59 - 23. 14918-14930. 2017. F. I.: 5.317

Anionic derivatives of perfluorinated trimethylgold

Pérez-Bitrián, A.; Martínez-Salvador, S.; Baya, M.; Casas, J.M.; Martín, A.; Menjón, B.; Orduna, J.

Chemistry (Weinh.). 28 - 23. 6919-6929. 2017. F. I.: 5.317

Catalytic dehydrogenative coupling of hydrosilanes with alcohols for the production of hydrogen on-demand: application of a silane/alcohol pair as a liquid organic hydrogen carrier

Ventura-Espinosa, D.; Carretero-Cerdán, A.; Baya, M.; García, H.; Mata, J.A.

Chemistry (Weinh.). 45 - 23. 10815-10821. 2017. F. I.: 5.317

Elongated dihydrogen versus compressed dihydride in osmium complexes

Eguillor, B.; Esteruelas, M. A.; Lezáun, V.; Oliván, M.; Oñate, E.
Chemistry (Weinh.). 7 - 23. 1526-1530. 2017. F. I.: 5.317

Mechanistic Insights on the reduction of CO₂ to silylformates catalyzed by Ir-NSiN species

Julián, A.; Guzmán, J.; Jaseer, E.A.; Fernández-Alvarez, F.J.; Royo, R.; Polo, V.; García-Orduña, P.; Lahoz, F.J.; Oro, L.A.
Chemistry (Weinh.). 49 - 23. 11898-11907. 2017. F. I.: 5.317

Arene complexes as intermediates in the preparation of molecular phosphorescent iridium(III) complexes

Esteruelas, M.A.; Gómez-Bautista, D.; López, A.M.; Oñate, E.; Tsai, J.-Y.; Xia, C.
Chemistry (Weinh.). 62 - 23. 15729-15737. 2017. F. I.: 5.317.

Optimizing accuracy and computational cost in theoretical squaramide catalysis: the Henry reaction

Alegre-Requena, Juan Vicente; Marqués López, María Eugenia; Pérez Herrera, Raquel
Chemistry (Weinh.). 61 - 23. 15336-15347. 2017. F. I.: 5.317.

Regioselectivity change in the organocatalytic enantioselective (3+2) cycloaddition with nitrones through cooperative hydrogen-bonding catalysis/iminium activation

Prieto, L.; Juste-Navarro, V.; Uria, U.; Delso, I.; Reyes, E.; Tejero, T.; Carrillo, L.; Merino, P.; Vicario, J.L.
Chemistry (Weinh.). 12 - 23. 2764-2768. 2017. F. I.: 5.317

Rhodium complexes promoting C-O bond formation in reactions with oxygen: The role of superoxo species

Vilella-Arribas, L.; García-Melchor, M.; Balcells, D.; Lledós, A.; López, J.A.; Sancho, S.; Villarroya, B.E.; Del Río, M.P.; Ciriano, M.A.; Tejel, C.
Chemistry (Weinh.). 22 - 23. 5232-5243. 2017. F. I.: 5.317

Synthesis and oxidation of a paddlewheel-shaped Rhodium/Antimony complex featuring Pyridine-2-Thiolate ligands

Wächtler, E.; Oro, L. A.; Iglesias, M.; Gerke, B.; Pöttgen, R.; Gericke, R.; Wagler, J.
Chemistry (Weinh.). 14 - 23. 3447-3454. 2017. F. I.: 5.317

The stepwise reaction of rhodium and iridium complexes of formula [MCl₂(K⁴C, N, N', P-L)] with silver cations: A case of trans-influence and chiral self-recognition

Carmona, María; Tejedor, Leyre; Rodríguez, Ricardo; Passarelli, Vincenzo; Lahoz, Fernando J.; García-Orduña, Pilar; Carmona, Daniel
Chemistry (Weinh.). 58 - 23. 14532-14546. 2017. F. I.: 5.317

Gold(I) fluorohalides: Theory and experiment

Baya, Miguel; Pérez-Bitrián, Alberto; Martínez-Salvador, Sonia; Casas, José María; Menjón, Babil; Orduna, Jesús
Chemistry (Weinh.). 7 - 23. 1512-1515. 2017. F. I.: 5.317

Introducing topology to assess the synchronicity of organic reactions. Dual reactivity of oximes with alkenes as a case study

Merino, Pedro; Chiacchio, María A.; Legnani, Laura; Delso, Ignacio; Tejero, Tomas
Org. Chem. Front. 8. 1541-1554. 2017. F. I.: 4.955

Cationic, neutral, and anionic hydrides of iridium with PSiP pincers

Suárez, E.; Plou, P.; Gusev, D.G.; Martín, M.; Sola, E.
Inorg. Chem. 12 - 56. 7190-7199. 2017. F. I.: 4.857

Heteroleptic cycloplatinated N-heterocyclic carbene complexes: A new approach to highly efficient blue-light emitters

Fuertes, S.; Chueca, A.J.; Arnal, L.; Martín, A.; Giovanella, U.; Botta, C.; Sicilia, V.
Inorg. Chem. 9 - 56. 4829-4839. 2017. F. I.: 4.857

Mer, Fac, and Bidentate coordination of an Alkyl-POP ligand in the chemistry of nonclassical osmium hydrides

Esteruelas, Miguel A.; García-Yebra, Cristina; Martín, Jaime; Oñate, Enrique
Inorg. Chem. 1 - 56. 676-683. 2017. F. I.: 4.857

Mixed-substituent cyclophosphazenes with calamitic and polycatenar mesogens

Jiménez, J.; Callizo, L.; Serrano, J.L.; Barberá, J.; Oriol, L.
Inorg. Chem. 14 - 56. 7907-7921. 2017. F. I.: 4.857

Novel Gold(I) thiolate derivatives synergistic with 5-fluorouracil as potential selective anticancer agents in colon cancer

Atrián-Blasco, E.; Gascón, S.; Rodríguez-Yoldi, M.J.; Laguna, M.; Cerrada, E.
Inorg. Chem. 14 - 56. 8562-8579. 2017. F. I.: 4.857

Trackable metallodrugs combining luminescent Re(I) and bioactive Au(I) fragments

Luengo, A.; Fernández-Moreira, V.; Marzo, I.; Gimeno, M. C.
Inorg. Chem. 2017, 56, 15159-15170. 2017. F. I.: 4.857

Tailor-made luminescent polymers through unusual metallophilic interaction arrays Au...Au...Ag...Ag

Gil-Moles, M.; Gimeno, M.C.; López-De-Luzuriaga, J.M.; Monge, M.; Olmos, M.E.; Pascual, D.
Inorg. Chem. 15 - 56. 9281-9290. 2017. F. I.: 4.857

Asymmetric organocatalytic synthesis of substituted chiral 1, 4-dihydropyridine derivatives

Auria-Luna, F.; Marqués-López, E.; Gimeno, M.C.; Heiran, R.; Mohammadi, S.; Herrera, R.P.
J. Org. Chem. 11 - 82. 5516-5523. 2017. F. I.: 4.849

Diastereoselective construction of the 6-oxa-2-azabicyclo[3.2.1]octane scaffold from chiral α -hydroxyaldehyde derivatives by the aza-prins reaction

Mahía, Alejandro; Badorrey, Ramón; Gálvez, José A.; Díaz-de-Villegas, María D.
J. Org. Chem. 15 - 82. 8048-8057. 2017. F. I.: 4.849

One-pot synthesis of functionalized carbazoles via a CAN-catalyzed multicomponent process comprising a C-H activation step

González, J.F.; Rocchi, D.; Tejero, T.; Merino, P.; Menéndez, J.C.
J. Org. Chem. 14 - 82. 7492-7502. 2017. F. I.: 4.849

Gold(I)-mediated thiourea organocatalyst activation: A synergic effect for asymmetric catalysis

Izaga, A.; Herrera, R. P.; Gimeno, M. C.
ChemCatChem. 7 - 9. 1313-1321. 2017. F. I.: 4.803

Reactivity of Ir-NSiN complexes: Ir-catalyzed dehydrogenative silylation of carboxylic acids

A. Julián, K. Garcés, R. Lalrempuia, E. A. Jaseer, P. García-Orduña, F. J. Fernández-Alvarez, F. J. Lahoz, L. A. Oro
ChemCatChem. DOI: 10.1002/cctc.201701488. 2017. F. I.: 4.803

Computational modeling and inelastic neutron scattering contributions to the study of methyl-silica xerogels: A combined theoretical and experimental analysis

I. Ospino, A. Luquin, M. Jiménez-Ruiz, I. Pérez de Landazábal, V. Recarte, J. Echeverría, M. Laguna, J. Garrido
J. Phys. Chem., C. 41 - 121. 22836-22845. 2017. F. I.: 4.536

Ru-catalyzed C-H functionalization of phenylglycine derivatives: Synthesis of isoquinoline-1-carboxylates and isoindoline-1-carboxylates

Ruiz, S.; Sayago, F. J.; Cativiela, C.; Urriolabeitia, E. P.
J. Mol. Catal., A Chem. 426. 407-418. 2017. F. I.: 4.211

Ecotoxicity and QSAR studies of glycerol ethers in *Daphnia magna*

Perales, E.; García, J.I.; Pires, E.; Aldea, L.; Lomba, L.; Giner, B.
Chemosphere. 183. 277-285. 2017. F. I.: 4.208

Glycerol as a source of designer solvents: Physicochemical properties of low melting mixtures containing glycerol ethers and ammonium salts

A. Leal-Duaso, P. Pérez, J. A. Mayoral, E. Pires, J. I. García.
Phys. Chem. Chem. Phys. 41 - 19. 28302–28312. 2017. F. I.: 4.123

A phase transition caught in mid-course: Independent and concomitant analyses of the monoclinic and triclinic structures of $(^{\text{m}}\text{Bu}_4\text{N})[\text{Co}(\text{orotate})_2(\text{bipy})]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$

Castro, Miguel; Falvello, Larry R.; Forcén-Vázquez, Elena; Guerra, Pablo; Al-Kenany, Nuha A.; Martínez, Gema; Tomás, Milagros
Acta Crystallogr. C Struct. Chem. 9 - 73. 731-742. 2017. F. I.: 4.099

Pt₂TI building blocks for two-dimensional extended solids: synthesis, crystal structures, and luminescence

Fuertes, S.; Chueca, A.J.; Martín, A.; Sicilia, V.
Cryst. Growth des. 8 - 17. 4336-4346. 2017. F. I.: 4.055

Correction: Preparation of Pt-TI clusters showing new geometries. X-ray, NMR and luminescence studies (Dalton Transactions (2014) 43 (10828–10843) DOI: 10.1039/C4DT00536H)

Belío, Ú.; Fuertes, S.; Martín, A.
Dalton Trans. 3 - 46. 995-. 2017. F. I.: 4.029

Half-sandwich complexes of iridium and ruthenium containing cysteine-derived ligands

Carmona, M.; Rodríguez, R.; Lahoz, F.J.; García-Orduña, P.; Cativiela, C.; López, J. A.; Carmona, D.
Dalton Trans. 3 - 46. 962-976. 2017. F. I.: 4.029

Polynuclear cage-like Au(I) phosphane complexes based on a S²⁻ template: observation of multiple luminescence in coordinated polyaromatic systems

Shakirova, J. R.; Grachova, E. V.; Sizov, V. V.; Starova, G. L.; Koshevoy, I. O.; Melnikov, A. S.; Gimeno, M. C.; Laguna, A.; Tunik, S. P.
Dalton Trans. 8 - 46. 2516-2523. 2017. F. I.: 4.029

Reactivity of the parent amido complexes of iridium with olefins: C–NH₂ bond formation versus C–H activation

Mena, I.; García-Orduña, P.; Polo, V.; Lahoz, F.J.; Casado, M.A.; Oro, L.A.
Dalton Trans. 46. 11459-11468. 2017. F. I.: 4.029

Stereospecific control of the metal-centred chirality of rhodium(III) and iridium(III) complexes bearing tetradentate CNNP ligands

Carmona, M.; Rodríguez, R.; Méndez, I.; Passarelli, V.; Lahoz, F.J.; García-Orduña, P.; Carmona, D.
Dalton Trans. 22 - 46. 7332-7350. 2017. F. I.: 4.029

Highly active group 11 metal complexes with α -hydrazidophosphonate ligands

Salvador-Gil, D.; Ortego, L.; Herrera, R. P.; Marzo, I.; Gimeno, M. C.
Dalton Trans. 40 - 46. 13745-13755. 2017. F. I.: 4.029

Alkenyl-assisted C³-C bond activation of acetylacetonate coordinated to iridium

Esteruelas, M.A.; Oñate, E.; Palacios, A.U.
Organometallics. 22 - 36. 4344-4347. 2017. F. I.: 3.862

Cycloaurated phosphinothioic amide complex as a precursor of gold(i) nanoparticles: Efficient catalysts for A³ synthesis of propargylamines under solvent-free conditions

Belmonte Sánchez, E.; Iglesias, M.J.; El Hajjoui, H.; Roces, L.; García-Granda, S.; Villuendas, P.; Urriolabeitia, E.P.; López Ortiz, F.

Organometallics. 10 - 36. 1962-1973. 2017. F. I.: 3.862

Design of highly selective alkyne hydrothiolation RhI-NHC catalysts: Carbonyl-triggered nonoxidative mechanism

Palacios, L.; Meheut, Y.; Galiana-Cameo, M.; Artigas, M.J.; Di Giuseppe, A.; Lahoz, F.J.; Polo, V.; Castarlenas, R.; Pérez-Torrente, J.J.; Oro, L.A.

Organometallics. 11 - 36. 2198-2207. 2017. F. I.: 3.862

Elongated s-borane versus s-borane in pincer-POP-osmium complexes

Esteruelas, Miguel A.; Fernández, Israel; García-Yebra, Cristina; Martín, Jaime; Oñate, Enrique

Organometallics. 12 - 36. 2298-2307. 2017. F. I.: 3.862

Formation of dinuclear iridium complexes by NHC-supported C-H bond activation

Esteruelas, M.A.; López, A.M.; Oñate, E.; San-Torcuato, A.; Tsai, J.Y.; Xia, C.

Organometallics. 3 - 36. 699-707. 2017. F. I.: 3.862

Osmium hydride acetylacetonate complexes and their application in acceptorless dehydrogenative coupling of alcohols and amines and for the dehydrogenation of cyclic amines

Esteruelas, M.A.; Lezáun, V.; Martínez, A.; Oliván, M.; Oñate, E.

Organometallics. 15 - 36. 2996-3004. 2017. F. I.: 3.862

Preparation of phosphorescent osmium(IV) complexes with N, N', C- and C, N, C'-pincer ligands

G. Alabau, R.; Esteruelas, M.A.; Oliván, M.; Oñate, E.

Organometallics. 9 - 36. 1848-1859. 2017. F. I.: 3.862

Selective C-Cl bond oxidative addition of chloroarenes to a POP- rhodium complex

Curto, S. G.; Esteruelas, M. A.; Oliván, M.; Oñate, E.; Velez, A.

Organometallics. 1 - 36. 114-128. 2017. F. I.: 3.862

Selective synthesis and photophysical properties of phosphorescent heteroleptic Iridium(III) complexes with two different bidentate groups and two different monodentate ligands

Esteruelas, M.A.; Oñate, E.; Palacios, A.U.

Organometallics. 9 - 36. 1743-1755. 2017. F. I.: 3.862

Solvent-driven P-S vs P-C bond formation from a diplatinum(III) complex and sulfur-based anions

Fortuño, C.; Martín, A.; Mastroilli, P.; Gallo, V.; Todisco, S.

Organometallics. 21 - 36. 4325-4337. 2017. F. I.: 3.862

Synthesis of propargyl-functionalized NHC gold complexes

Johnson, A.; Gimeno, M.C.

Organometallics. 7 - 36. 1278-1286. 2017. F. I.: 3.862

Hydrogenation to formate by a carboxylate- functionalized bis(N-heterocyclic carbene) zwitterionic iridium(i) compound

R. Puerta-Oteo, M. Hölscher, M. V. Jiménez, W. Leitner, V. Passarelli, J. J. Pérez-Torrente

Organometallics, 5 – 37. 684–696 2017. F. I.: 3.862

Organocatalytic hydrophosphonylation reaction of carbonyl groups

Herrera, R.P.

Chem. Rec. 17. 833-840. 2017. F. I.: 3.855

Diversity and hierarchy in supramolecular assemblies of triphenylalanine: From laminated helical ribbons to toroids

Mayans, E.; Casanovas, J.; Gil, A.M.; Jiménez, A.I.; Cativiela, C.; Puiggali, J.; Alemán, C. *Langmuir*. 16 - 33. 4036-4048. 2017. F. I.: 3.833

New bis(oxazoline)-vanadyl complexes, supported by electrostatic interaction in Laponite clay, as heterogeneous catalysts for asymmetric oxidation of methyl phenyl sulfide

Ben Zid, T.; Fadhli, M.; Khedher, I.; Fraile, J. M. *Micropor. Mesopor. Mater.* 239. 167-172. 2017. F. I.: 3.615

A molecular electron density theory study of the [3 + 2] cycloaddition reaction of nitrones with ketenes

Ríos-Gutiérrez, M.; Darù, A.; Tejero, T.; Domingo, L.R.; Merino, P. *Org. Biomol. Chem.* 7 - 15. 1618-1627. 2017. F. I.: 3.564

New mechanistic interpretations for nitrene reactivity

Merino, P.; Tejero, T.; Delso, I.; Matute, R. *Org. Biomol. Chem.* 16 - 15. 3364-3375. 2017. F. I.: 3.564

Ru-Catalysed synthesis of fused heterocycle-pyridinones and pyrones

S. Ruiz, C. Carrera, P. Villuendas, E. P. Urriolabeitia *Org. Biomol. Chem.* 16 - 15. 8904-8913. 2017. F. I.: 3.564

Comparative ecotoxicity study of glycerol biobased solvents

E. Perales, C. B. García, L. Lomba, J. I. García, E. Pires, M. C. Sancho, E. Navarro, B. Giner *Environ. Chem.* 14. 370-377. 2017. F. I.: 3.516

Alkynyl gold(I) complex triggers necroptosis via ROS generation in colorectal carcinoma cells

Mármol, I.; Virumbrales-Muñoz, M.; Quero, J.Sánchez-de-Diego, C.; Fernández, L.; Ochoa, I.; Cerrada, E.; Rodríguez-Yoldi, M. J. *J. Inorg. Biochem.* 176. 123-133. 2017. F. I.: 3.348

The anticancer effect related to disturbances in redox balance on Caco-2 cells caused by an alkynyl gold(I) complex

Sánchez-de-Diego, C.; Mármol, I.; Pérez, R.; Gascón, S.; Rodríguez-Yoldi, M.; Cerrada, E. *J. Inorg. Biochem.* 166. 108-121. 2017. F. I.: 3.348

Colorectal carcinoma: A general overview and future perspectives in colorectal cancer

Mármol Peguero, I.; Sánchez-de-Diego, C.; Pradilla, A.; Cerrada, E.; Rodríguez Yoldi, M. J. *Int. J. Mol. Sci.* 1 - 18. 197-236. 2017. F. I.: 3.226

Steroid-Au-NHC complexes: Synthesis and antibacterial activity

Vellé, A.; Maguire, R.; Kavanagh, K.; Sanz Miguel, P.J.; Montagner, D. *ChemMedChem*. 11 - 12. 841-844. 2017. F. I.: 3.225

Challenging cyclopropanation reactions on non-activated double bonds of fatty acids

Angulo, B.; Fraile, J. M.; Herrerias, C. I.; Mayoral, J. A. *RSC Adv.* 32 - 7. 19417-19424. 2017. F. I.: 3.108

Chemical approaches to inhibitors of isoprenoid biosynthesis: targeting farnesyl and geranylgeranyl pyrophosphate synthases

Merino, P.; Maiuolo, L.; Delso, I.; Algieri, V.; De Nino, A.; Tejero, T. *RSC Adv.* 18 - 7. 10947-10967. 2017. F. I.: 3.108

Application of heterogeneous catalysts in the synthesis of oseltamivir

J. M. Fraile, C. J. Saavedra *Catalysts*. 7, 393. 2017. F. I.: 3.082

Effect of solvent choice on the self-assembly properties of a diphenylalanine amphiphile stabilized by an ion pair

Mayans, E.; Ballano, G.; Sendros, J.; Font-Bardía, M.; Campos, J.L.; Puiggali, J.; Cativiela, C.; Alemán, C.

ChemPhyschem. 18. 1888-1896. 2017. F. I.: 3.075

The exocyclic amino group of adenine in PtII and PdII complexes: a critical comparison of the X-ray Crystallographic structural data and gas phase calculations

Silaghi-Dumitrescu, R.; Mihály, B.; Mihály, T.; Attia, A. A. A.; Sanz Miguel, P. J.; Lippert, B.

J. Biol. Inorg. Chem. 1-13. 567-579. 2017. F. I.: 2.894

BET & ELF quantum topological analysis of neutral 2-aza-cope rearrangement of gamma-alkenyl nitrones

Merino, P.; Chiacchio, M.A.; Legnani, L.; Tejero, T.

Molecules. 8 - 22. 1371. 2017. 2017.F. I.: 2.861

Direct substitution of alcohols in pure water by brønsted acid catalysis

Ortiz, R.; Pérez Herrera, R.

Molecules. 4 - 22. 574. 2017. F. I.: 2.861. (Invitation special issue "Women in Organic Chemistry")

Pivotal neighboring-group participation in substitution versus elimination reactions – computational evidence for ion pairs in the thionation of alcohols with lawesson's reagent

Chiacchio, M.A.; Legnani, L.; Caramella, P.; Tejero, T.; Merino, P.

Eur. J. Org. Chem. 14. 1952-1960. 2017. F. I.: 2.834

An expedient synthesis of resveratrol through a highly recoverable palladium catalyst

Martínez, Alejandro V.; García, José I.; Mayoral, José A.

Tetrahedron. 38 - 73. 5581-5584. 2017. F. I.: 2.651

Exploratory spectroscopic and computational studies of the anion binding properties of methyl hyocholate in organic solvent

Fantin, G.; Fogagnolo, M.; Delso, I.; Merino, P.

Tetrahedron. 13 - 73. 1698-1704. 2017. F. I.: 2.651

Stereoselective synthesis of α -amino- β -phosphinic acids and derivatives

Ordóñez, M.; Viveros-Ceballos, J.; Sayago, F. J.; Cativiela, C.

Synthesis (Stuttgart). 5 - 49. 987-997. 2017. F. I.: 2.650

Synergistic catalysis: Asymmetric synthesis of cyclopentanes bearing four stereogenic centers

Zhang, K.; Meazza, M.; Izaga, A.; Contamine, C.; Gimeno, M. C.; Herrera, R. P.; Rios, R.

Synthesis (Stuttgart). 1 - 49. 167-174. 2017. F. I.: 2.650

Synthetic transformations for the valorization of fatty acid derivatives

Fraile, J. M.; García, J. I.; Herrerías, C. I.; Pires, E.

Synthesis (Stuttgart). 7 - 49. 1444-1460. 2017. F. I.: 2.650

(N, Se) and (Se, N, Se) ligands based on carborane and pyridine fragments – reactivity of 2,6-[(1'-Me-1', 2'-closo-C₂B₁₀H₁₀)SeCH₂]₂C₅H₃N towards copper and silver

Ilie, A.; Crespo, O.; Gimeno, M.C.; Holthausen, M.C.; Laguna, A.; Diefenbach, M.; Silvestru, C.

Eur. J. Inorg. Chem. 20. 2643-2652. 2017. F. I.: 2.444

Group 11 metal complexes with unsymmetrical bifunctional ferrocene ligands

Shi, Y.J.; Laguna, A.; Villacampa, M.D.; Gimeno, M.C.

Eur. J. Inorg. Chem. 2. 247-255. 2017. F. I.: 2.444. (Hot paper)

Regioselective C–H bond activation of asymmetric bis(ylide)s promoted by Pd

Serrano, E.; Soler, T.; Urriolabeitia, E.P.

Eur. J. Inorg. Chem. 15 - 2017. 2220-2230. 2017. F. I.: 2.444

Reversible small-molecule interactions with coordinatively unsaturated metal centers held in metallathiaborane clusters

Bould, Jonathan; Passarelli, Vincenzo; Oro, Luis A.; Macías, Ramón

Eur. J. Inorg. Chem. 38 - 2017. 4599-4617. 2017. F. I.: 2.444

Synthesis of new pyrrolidine-based organocatalysts and study of their use in the asymmetric Michael addition of aldehydes to nitroolefins

Castán, A.; Badorrey, R.; Gálvez, J.A.; Díaz de Villegas, M.D.

Beilstein J. Org. Chem. 13. 612-619. 2017. F. I.: 2.337

Determination of three corticosteroids in the biologic matrix of vitreous humor by HPLC-tandem mass spectrometry: Method development and validation

E. Prieto, E. Vispe, S. Otín-Mallada, E. Garcia-Martin, V. Polo-Llorens, J. M. Fraile, L. E. Pablo, J. A. Mayoral

Curr. Eye Res. 2017, 42, 244-251. 2017. F. I.: 2,238

Pd(II) complexes of monodentate deoxycholic acid derived binaphthyl diamido phosphites as chiral catalysts in the asymmetric Suzuki-Miyaura cross-coupling

Iannucci, G.; Passarelli, V.; Passera, A.; Iuliano, A.

Tetrahedron: Asymmetry. 11 - 28. 1618-1625. 2017. F. I.: 2.126

Chemical composition of rosehips from different Rosa species: an alternative source of antioxidants for the food industry

Jiménez, S.; Jiménez-Moreno, N.; Luquin, A.; Laguna, M.; Rodríguez-Yoldi, M.J.; Ancín-Azpilicueta, C.

Food Addit. Contam. Part A, 1-10. 1121-1130. 2017. F. I.: 2.047

Photophysical and bioactivity behavior of fac-rhenium(I) derivatives containing ditopic sulfurpyridine ligands

V. Fernández-Moreira, H. Sastre-Martín

Inorg. Chim. Acta. 460. 127-133. 2017. F. I.: 2.002

Comparison of Ta–MCM-41 and Ti–MCM-41 as catalysts for the enantioselective epoxidation of styrene with TBHP

Fadhli, M.; Khedher, I.; Fraile, J.M.

C. R. Chim. 8 - 20. 827-832. 2017. F. I.: 1.879

Biodegradable nanofibrous scaffolds as smart delivery vehicles for amino acids

Maione, Silvana; Pérez-Madrigal, María M.; Valle, Luis J. del; Díaz, Angélica; Franco, Lourdes; Cativiela, Carlos; Puiggali, Jordi; Alemán, Carlos

J. Appl. Polym. Sci. 22 - 134. 44883. 2017. F. I.: 1.860

Dynamic characterization of structural changes in vapochromic compounds by pair distribution function

Caliandro, R.; Belviso, B.D.; Cuocci, C.; Fuertes, S.; Sicilia, V.; Hanson, J.C.; Tutuncu, G.; Doorhyee, E.; Altomare, A.

Powder Diffr. 1-5. 2017. F. I.: 0.763

Divergent reactivity of 2-vinylpyridine and 1-vinylpyrazole in rhodium-phosphine systems: C-H activation and dinuclear chemistry

Azpíroz, R.; Passarelli, V.; Castarlenas, R.; Pérez-Torrente, J.J.; Oro, L.A.

J. Mex. Chem. Soc. 2 - 61. 138-145. 2017. F. I.: 0.710

A series of [Ln(NO₃)₃(4'-(4-bromophenyl)-2, 2':6', 2''-terpyridine)] lanthanide derivatives

Gallardo, P.; Abas, E.; Buceta, A.; Merchán, F.; Luquin, A.; Haque, S. A.; Laguna, M.
Diffus. Defect Data Solid State Data, Pt. B Solid State Phenom. 257. 160-164. 2017. F. I.: 0.493

Magnetic interaction between d1 [MOR4]- units of molybdenum and tungsten

García-Monforte, M. Á.; Alonso, P. J.; Arauzo, A. B.; Baya, M.; Luis, F.; Martín, A.; Menjón, B.; Rillo, C.
Diffus. Defect Data Solid State Data, Pt. B Solid State Phenom. 257. 223-226. 2017. F. I.: 0.493

Determination of lanthanides in fossil samples using laser induced breakdown spectroscopy

J.M. Anzano, J. Cajal, R.J. Lasheras, M. Escudero, I. Canudo, M. Laguna, J.O. Cáceres, J. Anwar
J. Chem. Soc. Pak., 39, 516-523. 2017. F. I.: 0.327

Climate zone influences the effect of temperature on the day of artificial insemination on fertility in two Iberian sheep breeds

Abecía, J.A.; Máñez, J.; Macías, A.; Laviña, A.; Palacios, C.
J. Anim. Behav. Biometeorol. 4 - 5. 124-131. 2017

From Imidazole toward imidazolium salts and n-heterocyclic carbene ligands: Electronic and geometrical redistribution

Vellé, A.; Cebollada, A.; Macías, R.; Iglesias, M.; Gil-Moles, M.; Sanz Miguel, P.J.
ACS Omega. 4 - 2. 1392-1399. 2017

La formación en prevención de riesgos laborales en el laboratorio en el grado en química

Elduque Palomo, Ana I.; Blein Sánchez de León, Antonio; García Yebra, Cristina
Segur. Salud Trab. 12 - 89. 30-37. 2017

Magnetic order and magnetoelectric properties of R₂CoMn O₆ perovskites (R=Ho, Tm, Yb, and Lu)

Blasco, J.; García-Muñoz, J.L.; García, J.; Subías, G.; Stankiewicz, J.; Rodríguez-Velamazán, J.A.; Ritter, C.
Phys. Rev. B. 2 - 96. 024409. 2017

The alkyl group is a -I + R substituent

Salvatella, L.
Educ. Quím. 4 - 28. 232-237. 2017

Synthesis of isosorbide esters from sorbitol with heterogeneous catalysts

J. M. Fraile, C. J. Saavedra
Chem. Select. 2, 1013–1018. 2017

4.3. COMUNICACIONES A CONGRESOS

Tipo de Comunicación	Nº Total
Conferencias Invitadas	22
Conferencia Semi-Plenaria	1
Comunicaciones Orales	28
Comunicaciones Pósters	37

Conferencias Invitadas

Química y Desarrollo Sostenible

Luis A. Oro

Fundación Juan March. Madrid, 31 de enero

Impacto humano en el medio ambiente

Luis A. Oro

Fundación Juan March. Madrid, 2 de febrero

Metals in medicine (Curso 9h)

M. Concepción Gimeno

XXXVII Escola de Verão em Química, 2017. Química e Saúde!

Universidade Federal de São Carlos (Brasil) 9-16 de febrero

Metals in Therapy and Diagnosis (Workshop)

M. Concepción Gimeno

XXXVII Escola de Verão em Química, 2017. Química e Saúde!

Universidade Federal de São Carlos (Brasil) 9-16 de febrero

Hydrothiolation of Alkynes Promoted by Rhodium N-Heterocyclic Carbene Catalysts

Luis A. Oro

Green Catalysis Symposium, Rennes, Francia, 23 de marzo

Compuestos de Cobre, Plata y Oro con Actividad Biológica

M. Concepción Gimeno

IES Ramón Pignatelli (Zaragoza) 6 de abril

Química y Cristalografía: dos eternas aliadas

Fernando J. Lahoz

Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas, Químicas y Naturales de Zaragoza, 3 de mayo

Política Científica: De Ramón y Cajal a Nuestros Días

Luis A. Oro

Real Academia de Medicina de Zaragoza, 4 de mayo

Inverse coordination in gold chemistry

Antonio Laguna

Acad. Ionel Haiduc at the age of 80. A life dedicated to science

Cluj-Napoca University (Rumanía), 10 de mayo

Development of NHC-based molecular and hybrid transition-metal catalysts

Jesús J. Pérez Torrente

Universidad de Barcelona, Barcelona, 19 de mayo

Materiales de Oro para Diagnóstico y Terapia

M. Concepción Gimeno

Universidad Autónoma de Almería (España) 26 de mayo

Espectrometría de masas. Nueva herramienta para la caracterización de sólidos y catalizadores

Mariano Laguna

Jarandilla de la Vera (Cáceres). Universidad de Extremadura. 9 junio

Pathways from O-O bond cleavage to C-O bond formation mediated by Rh and Ir complexes

Cristina Tejel

XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ

Sitges (España) 25-29 junio

Symposium Women in Chemistry

M. Concepción Gimeno (speaker)

IUPAC 2017 46th World Chemistry Congress

Sao Paulo (Brasil) 9-14 julio

Design of iridium NHC-based molecular and hybrid catalysts for hydrogen transfer reactions

Jesús J. Pérez Torrente

Leibniz Institute for Catalysis (LIKAT), Rostock (Germany), 20 de julio

From Parent Amido-Bridged Polynuclear Complexes to Imido Iridium Clusters

Luis A. Oro

2nd International Conference on Advanced Materials, Irbid, Jordania, 11 de julio

Forty years of Platinum Group Metal Chemistry: From Organometallic Complexes to Homogeneous Catalysis

Luis A. Oro

6th Latin American Symposium on Coord. and Organom. Chemistry Iguazu, Argentina, 9 de agosto

Coordinación inversa: Calcogenuros y Calcogenatos de oro

Antonio Laguna

Organometallic Chemistry Day

Universidad de Alcalá, 22 de septiembre

Aplicaciones catalíticas de complejos de rodio e iridio con ligandos monoaniónicos tridentados de tipo NSiN

Francisco J. Fernández

Progr. de Conferencias y Seminarios de Investigación Univ. de la Rioja, Logroño, 5 de octubre

Química y Desarrollo Sostenible

Luis A. Oro

U. Complutense Madrid, Facultad de Química, 15 de noviembre

Du dissolvant au solvant: Le glycérol comme source de solvants verts

José I. García

Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Lille, 21 de noviembre

Materiales de Oro para Diagnóstico y Terapia

M. Concepción Gimeno

Ciclo de Conferencias Bioestética: Encuentros en el Museo

Paraninfo de la Universidad de Zaragoza, 8 de noviembre

Mesa Redonda Mujer y Ciencia

M. Concepción Gimeno

ERA CAREER DAY Zaragoza (España) 23 de noviembre

Conferencia Semi-Plenaria**Versatile Applications of Water soluble Gold Complexes**

M. Laguna, A. Mendia

Metals and Water 2017. II International conference on water soluble metal complexes

Jaca (Huesca-España) 13-15 junio

Comunicaciones Orales**Studying Computationally Anion- π Interactions for the First Time in Asymmetric Catalysis: Squaramide-Catalyzed Henry Reactions**

Juan V. Alegre-Requena, Eugenia Marqués-López, Raquel P. Herrera

8th European Symposium on Computing π -Conjugated Compounds

Málaga (España) 27-28 enero

Squaramides, Key Structures in Diverse Fields of Chemistry

Juan V. Alegre-Requena, Eugenia Marqués-López, Raquel P. Herrera

V Jornadas Doctorales G-9

Palma de Mallorca (España) 27-28 enero

Homogeneous N-H Activation of ammonia by iridium and rhodium organometallic complexes

Casado, M. A.

2nd European Organic Chemistry Congress

Amsterdam (Holanda) 2-3 marzo

Rigidified GFP-like 4-arylidene imidazolones fluorophores: Late-stage Pd(II)-catalyzed direct C-H/C-H cross-coupling with alkynes

C. Hoarau, E. P. Urriolabeitia

Second COST Action Meeting (Action CA15106)

Sofia (Bulgaria) 13-14 marzo

Glycerol ethers as green solvents: improved synthesis and ecotoxicity studies

J. I. García, E. Pires, E. Perales, B. Giner, L. Lomba, A. Leal-Duaso, M. Caballero

ISGC, The 4th International Symposium on Green Chemistry

La Rochelle (Francia), 13-17 mayo

Glycerol as a source of designer DES

Pires, D. Abad, A. Leal-Duaso, J. I. García, P. Pérez

ISGC, The 4th International Symposium on Green Chemistry

La Rochelle (Francia), 13-17 mayo

Addition of carboxylic acids to double bonds of fatty acids and derivatives using acid heterogeneous catalysts

C. I. Herrerías, J. M. Fraile, B. Angulo, A. Vera

ISGC 2017, the 4th International Symposium on Green Chemistry

La Rochelle (Francia), 13-17 mayo

Heterometallic Re(I)/Au(I) complexes as theranostic agents

M. Concepción, A. Luengo, V. Fernández-Moreira

14th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry –ISABC14

Toulouse (Francia) 7-10 junio

Necroptosis-induced by an alkynyl gold(I) complexInés Marmol, Javier Quero, Cristina Sánchez-de-Diego, Sonia Gascón, M^a Jesús Rodríguez-Yoldi, Elena Cerrada

14th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry –ISABC14

Toulouse (Francia) 7-10 junio

Water soluble gold(I) complexes with thiolate moieties as anticancer drugs

E. Abas, R. Pena-Martínez, L. Grasa, J. E. Mesonero, M. Laguna
Metals and Water 2017. II International conference on water soluble metal complexes
Jaca (Huesca-España) 13-15 junio

Efficient Pd(II) catalyst for C-C coupling reactions Recyclable in water

A. Buceta, R. Bayona, S. Juan-Perez, V. Elías, F. Merchán, M. Laguna
Metals and Water 2017. II International conference on water soluble metal complexes
Jaca (Huesca-España) 13-15 junio

Characterization of glacier lakes by laser-induced decomposition spectroscopy

J. del Valle, J. Berges, M. Escudero, R. J. Lasheras, J. J. Monge, M. Laguna, J. M. Anzano.
Metals and Water 2017. II International conference on water soluble metal complexes
Jaca (Huesca-España) 13-15 junio

Organocatalytic synthesis of chiral 1,4-dihydropyridines

Fernando Auria-Luna, Eugenia Marqués-López, Raquel P. Herrera
XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ
Sitges (España) 25-29 junio

HiScoreScience, una app móvil para aprender jugando

J. I. García, F. Lahoz, B. Latre, A. Camón, A. Angurel
XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ
Sitges (España) 25-29 junio

Iridium complexes with monoanionic tridentate NSiN ligands. Their potential as catalysts for CO₂-reduction processes

F. J. Fernández-Alvarez
XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ
Sitges (España) 25-29 junio

Acceptorless dehydrogenation reactions catalysed by a bimetallic complex

R. G. Alabau, M. A. Esteruelas, A. Martínez, M. Oliván, E. Oñate
X School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas
Ciudad Real (España) 6-8 julio

Blue-green phosphorescent heteroleptic iridium(III) complexes with N-heterocyclic carbene ligands

M. A. Esteruelas, A. M. López, E. Oñate, A. San-Torcuato, J.-Y Tsai, C. Xia
X School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas
Ciudad Real (España) 6-8 julio

Novel coordination modes of a BPI anion in osmium complexes

A. I. Nicasio, M. L. Buil, M. A. Esteruelas, E. Oñate
X School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas
Ciudad Real (España) 6-8 julio

Phosphorescent Ir(III) complexes with two different pincer ligands

M. A. Esteruelas, D. Gómez-Bautista, A. M. López, E. Oñate
X School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas
Ciudad Real (España) 6-8 julio

Osmium polyhydrides containing boron Ligands

J. C. Babón, M. A. Esteruelas, I. Fernández, A. M. López, E. Oñate
X School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas
Ciudad Real (España) 6-8 julio

Complejos luminiscentes de oro(i): citotoxicidad y biodistribución

Vanesa Fernández-Moreira, Andrés Luengo, Isabel Marzo, M. Concepción Gimeno
X Reunión Científica de Bioinorgánica (BioBilbao)
Bilbao (España) 9-12 julio

N-H Activation of ammonia by M(d8) organometallic complexes: Reactivity and catalysis

Casado, M. A.
EuCheMS International Organometallic Conference XXII
Amsterdam (Holanda) 9-13 julio

Laponite clay as a carrier for intravitreal dexamethasone release

J. M. Fraile, E. Garcia-Martin, C. Gil, J. A. Mayoral, L. E. Pablo, V. Polo, E. Prieto, E. Vispe
ICC 2017 (16th International Clay Conference)
Granada, 17-21 julio

Laponite clay as support for chiral catalysts: surface effects on stereoselectivities

J. M. Fraile, J. I. García, C. I. Herrerías, J. A. Mayoral, E. Pires
ICC 2017 (16th International Clay Conference)
Granada, 17-21 julio 2017

Synthesis of propargyl functionalised NHC gold complexes and study of their luminescent and biological properties

Alice Johnson, M. Concepción Gimeno
RSC Dalton Younger Members Event
Bath (Reino Unido) 7-8 septiembre

“Push-Pull” $\pi+\pi-$ (PP $\pi\pi$) System: a new type of interaction system in catalysis

Juan V. Alegre-Requena, Eugenia Marqués-López, Raquel P. Herrera
XIV Simposio Investigadores Jóvenes Real Sociedad Española Química
Badajoz (España) 7-10 noviembre

[2+2]-Photocycloaddition of (Z)-2-Aryl-4-Arylidene-5(4H)-Oxazolones Using Ruthenium Catalyst for the Stereo-selective Synthesis of 1,3-Diaminotruxilic Acid Precursors

J. M. Mateo, S. Sierra, E. P. Urriolabeitia, C. Cativiela, A. de la Hoz, M. V. Gómez
XIV Simposio Investigadores Jóvenes Real Sociedad Española Química
Badajoz (España) 7-10 noviembre

From waste to valuable products: making the most of glycerol

J. I. García, E. Pires, A. Leal-Duaso, J. A. Mayoral
Raw materials and energy in a circular and low-carbon economy
Cracovia (Polonia), 14-15 noviembre

Comunicaciones Pósters**A new approach for Helicobacter pylori eradication: In vivo assessment of novel flavodoxin inhibitors efficacy**

Salillas, S.; Alías, M.; Michel, V.; Bueno, J.; Arribas, J.; Lucía, A.; Rodrigues, L.; Mahía, A.; Sostres, C.; Aínsa, J. A.; Castillo, J.; Díaz-de-Villegas, M. D.; Lanás, A.; Touati, E.; Sancho J.

BIFI VIII National Conference

Zaragoza (España) 31 enero – 1 febrero

Design, synthesis and testing of a novel and efficient fluorescent compound for the staining of amyloid beta fibrillar aggregates

Mahía, A.; Díaz-de-Villegas, M. D.; Gálvez, J. A.; Sancho, J.

BIFI VIII National Conference

Zaragoza (España) 31 enero – 1 febrero

Studying the mechanism of action of novel stabilizing compounds of phenylalanine hydroxylase

Conde-Giménez, M.; Salillas, S.; Galano-Frutos, J. J.; Galiana, M.; Díaz-de-Villegas, M. D.; Sancho, J.

BIFI VIII National Conference

Zaragoza (España) 31 enero – 1 febrero

Selectivity issues in the Green synthesis of monoalkyl glycerol ethers. Experimental and computational mechanistic studies

Leal-Duaso, J. I. García, E. Pires, E. Urriolabeitia

ISGC 2017, The 4th International Symposium on Green Chemistry

La Rochelle (Francia), 13-17 mayo

Tandem reactions for the synthesis of fatty acids derivatives

V. Dorado, J. M. Fraile, C. I. Herrerías

ISGC 2017, The 4th International Symposium on Green Chemistry

La Rochelle (Francia), 13-17 mayo

Synthesis of propargyl functionalised NHC gold complexes with biological and luminescent

Alice Johnson, M. Concepción Gimeno

RSC Sir Geoffrey Wilkinson Dalton Poster Symposium

Londres (Reino Unido) 27 mayo

Síntesis y propiedades de nuevos disolventes verdes derivados de glicerol

J. I. García, A. Leal-Duaso, P. Pérez, E. Pires, D. Velázquez

XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ

Sitges (España) 25-29 junio

DFT Study of Ir(I) complexes for CO₂ and NH₃ activation

Hermosilla, P., Polo, V., Casado, M. A.

XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ

Sitges (España) 25-29 junio

Reactivity of a POP-rhodium(I) boryl complex

S. G. Curto, M. A. Esteruelas, M. Oliván, E. Oñate, A. Vélez

XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ

Sitges (España) 25-29 junio

Recent developments in the chemistry of osmium complexes with POP ligands

J. Martín, C. García-Yebra, E. Oñate, M. A. Esteruelas

XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ

Sitges (España) 25-29 junio

Blue-Green Phosphorescent Heteroleptic Iridium(III) Complexes with N-Heterocyclic Carbene Ligands

M. A. Esteruelas, A. M. López, E. Oñate, A. San-Torcuato, J.-Y Tsai, C. Xia

XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ

Sitges (España) 25-29 junio

Stereoisomerism in organopalladium(IV) derivatives

S. Rosoiu, M. Baya, B. Menjón

XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ

Sitges (España) 25-29 junio

Hydroperoxide-iridium complexes

P. Abril, M. P. del Río, A. Lledós, J. A. López, M. A. Ciriano, C. Tejel

XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ

Sitges (España) 25-29 junio

Combining nacnac and quinones on rhodium

V. Varela, J. A. López, M. A. Ciriano, C. Tejel

XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ

Sitges (España) 25-29 junio

First Synthesis of Group 11 Metal Complexes with α -Hydrazidophosphonate Ligands and Biological Study

Raquel P. Herrera, Daniel Salvador-Gil, Lourdes Ortego, M. Concepción Gimeno

14th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry –ISABC14

Toulouse (Francia) 7-10 junio

Reactivity of a POP-Rhodium(I) Boryl Complex

S. G. Curto, M. A. Esteruelas, M. Oliván, E. Oñate, A. Vélez

X School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas

Ciudad Real (España) 6-8 julio

Recent developments in the chemistry of osmium complexes with POP ligands

J. Martín, C. García-Yebra, E. Oñate, M. A. Esteruelas

X School on Organometallic Chemistry Marcial Moreno Mañas

Ciudad Real (España) 6-8 julio

New thermal sensors of Lanthanide complexes supported on TiO₂

A. Buceta, M. Laguna

ISPPCC 2017. 22nd International Symposium on Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds

Oxford (UK) 9-14 julio

Film-shaped inorganic-organic hybrid polymers with biological properties

E. Cerrada, M. Laguna, H. El Kaoutit, L. Medinilla, M. Trigo, S. Vallejos, F. García, J. M. García, A. Mendía

X Reunión Científica de Bioinorgánica (BioBilbao)

Bilbao (España) 9-12 julio

Propiedades biológicas de nuevos compuestos de Oro solubles en agua

E. Abas, R. Pena-Martinez, N. Espallargas, A. Rodriguez, L. Grasa y M. Laguna

II Congreso de Jóvenes químicos y bioquímicos terapéuticos. II ChemBioChem

Móstoles (Madrid-España) 4-5 octubre

Multifunctional coordination compounds based on lanthanide ions and 5-bromo nicotinic acid magnetic, luminescence and anti-tumoral properties

A. A. García-Valdivia, C. Ruiz, J. Cepeda, I. Oyarzabal, J. M. Seco, E. Abas, M. Laguna, S.

Gómez-Ruiz y A. Rodríguez-Diéguez
II Congreso de Jóvenes químicos y bioquímicos terapéuticos. II ChemBioChem
Móstoles (Madrid-España) 4-5 octubre

Squaramides, Key Structures in Diverse Fields of Chemistry

Juan V. Alegre-Requena, Eugenia Marqués-López, Raquel P. Herrera
Cross-border Doctorials UPV/EHU-UPPA (International Congress)
Arantzazu (Gipuzkoa, España) 16- 19 octubre

Síntesis de ésteres de isosorbide a partir de sorbitol usando catalizadores heterogéneos

C. J. Saavedra, J. M. Fraile
XXI Semana Científica "Antonio González"
La Laguna, 24-27 octubre

Estudio de despolimerización de modelos de lignina en medio ácido

C. J. Saavedra, J. M. Fraile, Z. Hormigón, J. A. Mayoral, L. Salvatella
XXI Semana Científica "Antonio González"
La Laguna, 24-27 octubre

Síntesis organocatalítica de derivados de 4H-pirano.

Fernando Auria-Luna, Eugenia Marqués-López y Raquel P. Herrera
XIV Simposio Investigadores Jóvenes Real Sociedad Española Química
Badajoz (España) 7-10 noviembre

Síntesis de alquil β -nitrohidrazidas enantioméricamente enriquecidas

Isaac G. Sonsona, Juan V. Alegre-Requena, Eugenia Marqués-López y Raquel P. Herrera
XIV Simposio Investigadores Jóvenes Real Sociedad Española Química
Badajoz (España) 7-10 noviembre

Phenolic compounds from Rosa canina might improve chemotherapeutic treatment

I. Mármol, J. Quero, S. Gascón, N. Jimenez, C. Ancin-Azpilicueta, E. Cerrada M. J. Rodríguez-Yoldi
31st EFFoST International Conference (European Federation of Food Science and Technology)
Sitges (España) 13-16 noviembre

Rational design in gold complexes: induction of apoptosis or necroptosis in colorectal cancer cells

I. Mármol, J. Quero, C. Sanchez-Diego, S. Gascón, M. J. Rodríguez-Yoldi, E. Cerrada
The first European PhD & PostDoc Symposium
Barcelona (España) 15-17 noviembre

Rational drug design: comparison of the anticancer effect of two gold complexes on Caco-2 cell line

I. Mármol, J. Quero, C. Sanchez-Diego, S. Gascón, M. J. Rodríguez-Yoldi, E. Cerrada
II Congreso Nacional de Jóvenes investigadores en Biomedicina
Valencia (España) 23-24 noviembre

Synthesis of squaramides with anti-tumor activity

Juan V. Alegre-Requena, Mireia Quintana, Eugenia Marqués-López, Raquel P. Herrera y Gemma Triola
3rd International Electronic Conference on Medicinal Chemistry
Sciforum Electronic Conference Series, Vol. 3, 2017; doi:[10.3390/ecmc-3-04668](https://doi.org/10.3390/ecmc-3-04668)
On-line Fecha: 1-30 noviembre

Organocatalytic Synthesis of Chiral 1,4-Dihydropyridines with Potential Biological Properties

Fernando Auria-Luna, Eugenia Marqués-López, M. Concepción Gimeno, Raquel P. Herrera
3rd International Electronic Conference on Medicinal Chemistry

Sciforum Electronic Conference Series, Vol. 3, 2017; doi:[10.3390/ecmc-3-04671](https://doi.org/10.3390/ecmc-3-04671)

On-line Fecha: 1-30 noviembre

First Advances in the Asymmetric Synthesis of Biologically Active 2-Amino-3-cyano-4H-chromen-4-yl Phosphonates

Isaac G. Sonsona, Sandra Muñiz-Bustín, Eugenia Marqués-López and Raquel P. Herrera

3rd International Electronic Conference on Medicinal Chemistry

Sciforum Electronic Conference Series, Vol. 3, 2017; doi: [10.3390/ecmc-3-04692](https://doi.org/10.3390/ecmc-3-04692)

On-line Fecha: 1-30 noviembre

Synthesis of luminescent squaramide monoesters: cytotoxicity and cell imaging studies in HeLa cells

Vanesa Fernández-Moreira, Juan V. Alegre-Requena, Raquel P. Herrera, Isabel Marzo and M. Concepción Gimeno

3rd International Electronic Conference on Medicinal Chemistry

Sciforum Electronic Conference Series, Vol. 3, 2017; doi: [10.3390/ecmc-3-04667](https://doi.org/10.3390/ecmc-3-04667)

On-line Fecha: 1-30 noviembre

New thiourea-thiazolidine complexes and study of their biological activity

D. Salvador-Gil, M. Concepción

3rd International Electronic Conference on Medicinal Chemistry

Sciforum Electronic Conference Series, Vol. 3, 2017; doi: [10.3390/ecmc-3-04665](https://doi.org/10.3390/ecmc-3-04665)

On-line Fecha: 1-30 noviembre

Novel gold complexes with nitrogen acyclic carbenes and their applications as anticancer agents

M. Aliaga Lavrijsen, M. Dolores, M. Concepción Gimeno

3rd International Electronic Conference on Medicinal Chemistry

Sciforum Electronic Conference Series, Vol. 3, 2017; doi: [10.3390/ecmc-3-04656](https://doi.org/10.3390/ecmc-3-04656)

On-line Fecha: 1-30 noviembre

Synthesis of isosorbide esters from sorbitol with heterogeneous catalysts

J. M. Fraile, C. J. Saavedra

4th International Congress on Catalysis for Biorefineries (CatBior)

Lyon (Francia), 2017 11-15 diciembre

Solketal synthesis catalyzed by sulfonated hydrothermal carbons prepared from cellulose

J. M. Fraile, E. García-Bordejé, E. Pires

4th International Congress on Catalysis for Biorefineries (CatBior)

Lyon (Francia), 2017 11-15 diciembre

4.4 CONFERENCIAS IMPARTIDAS EN EL ISQCH

Ciclo de Conferencias ISQCH

A lo largo del año 2017 se ha organizado el **Ciclo de Conferencias ISQCH**. El ciclo ha sido coordinado por el profesor Eduardo Sola.

[Microbobinas de RMN: Una herramienta para la monitorización y optimización de reacciones químicas](#)

M^a. Victoria Gómez Almagro
Universidad de Castilla – La Mancha
26 de Enero de 2017

[CO₂ conversion using organometallic and organic molecular catalysts](#)

Thibault Cantat
CEA Saclay
21 de Febrero de 2017

[The role of metal-oxo clusters in energy and advanced materials](#)

May Nyman
Oregon State University
7 de Marzo de 2017

[Redox activity of carbene ligands: Convergent and divergent radical-type pathways of carbene radicals](#)

Bas de Bruin
University of Amsterdam
28 de Marzo de 2017

[Discovery of new catalytic reactions for generation of molecular complexity and diversity](#)

John Montgomery
University of Michigan
20 de Abril de 2017

[Organometallic compounds as potential anti-cancer agents. Towards targeted therapeutics](#)

María Contel
Brooklyn College, CUNY, New York
17 de Julio de 2017

[Supramolecular coordination chemistry with poly-NHC ligands](#)

F. Ekkehardt Hahn
Universität Münster
26 de septiembre de 2017

[Catalizadores homometálicos de aluminio vs heterometálicos en procesos de polimerización controlada](#)

Marta E. G. Mosquera
Universidad de Alcalá
30 de noviembre de 2017

[Stable carbenes & related species: Powerful tools in organic, inorganic and organometallic chemistry](#)

Guy Bertrand
University of California San Diego
20 de diciembre de 2017

Conferencias Programa Expertia

[Innovar en la empresa....Sí, pero ¿CÓMO?](#)

Piedraescrita Gallardo Gallardo
Implaser S.L. Programa Expertia
16 de febrero de 2017

[Open Innovation Drug Discovery \(OIDD\) Program Expansion and New Approaches for Collaboration](#)

María Ángeles Martínez-Grau
Senior Research Advisor, Eli Lilly
9 de marzo de 2017

[¿Se investiga en procesos catalíticos en la industria Química española?: El ejemplo del peróxido de hidrógeno y PeroxyChem](#)

Fernando Puente de Vera
PeroxyChem
30 de marzo de 2017

[Difracción de Rayos-X. De lo científico a lo tecnológico](#)

Fidel Sánchez Riaño
Innovation and Sales Manager
Bruker Española S.A. (Madrid)
11 de mayo 2017

4.5 PERTENENCIA COMITÉS CIENTÍFICOS

Irene Ara. Profesora Titular UZ

Coordinadora del Máster en Investigación Química
Miembro de la Junta de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza

Ramón Badorrey Miguel. Profesor Titular UZ

Miembro de la Comisión de Evaluación y Control de la Docencia de la Facultad de Ciencias

José María Casas. Profesora Titular UZ

Miembro de la Comisión de Garantías del Grado en Química de la Facultad de Ciencias, UZ.
Miembro de la Comisión de Garantías del Máster de Investigación en Síntesis Química y Catálisis Homogénea
Miembro Comisión de Estudios de Posgrado de la Universidad de Zaragoza
Miembro de la Subcomisión de docencia de la Universidad de Zaragoza
Miembro de la Junta de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza

Ana I Elduque. Catedrática UZ

Coordinadora del Máster en Química Industrial, Universidad de Zaragoza
Presidenta de la Comisión de Evaluación del Máster en Química Industrial, Universidad de Zaragoza
Presidenta de la Comisión de autoevaluación del Master en Química Industrial para la renovación de la acreditación, Universidad de Zaragoza

Francisco Fernández Álvarez. Profesor Contratado Doctor

Miembro electo de la comisión de estudios de grado de la Universidad de Zaragoza
Miembro designado de la comisión de calidad de la actividad docente de la Univer. de Zaragoza
Miembro electo de la comisión técnica de evaluación de la Universidad de Zaragoza

José María Fraile Dolado. Investigador Científico CSIC

Organizador del Ciclo de conferencias ISQCH en 2015
Miembro de la Comisión Académica de Doctorado en Química Orgánica

José Antonio Gálvez. Profesor Titular UZ

Coordinador de Prácticas en Empresas Titulaciones en Química de la Facultad de Ciencias

José Ignacio García. Profesor Investigación CSIC

Vocal de la Sección Territorial de Aragón de la RSEQ (hasta 15-06-2016) Presidente de la Sección Territorial de Aragón de la RSEQ (desde 16-06-2016)
Presidente del comité organizador 7ª Jornada de Jóvenes Investigadores de Q. y F. de Aragón
Miembro del Comité Científico Raw materials and energy in a circular and low-carbon economy. Cracovia, Septiembre 2017

M^a Concepción Gimeno. Profesora Investigación CSIC

Editora de la revista Gold Bulletin (Springer)
Editora de la revista E-Journal of Chemistry (Hindawi)
Miembro del International Advisory Board of Eur. J. Inorg. Chem. (Wiley)
Miembro del International Advisory Board of Current Inorganic Chemistry
Presidenta de la Comisión de Garantía y Calidad del Máster de Química Molecular y Catálisis Homogénea del ISQCH. Desde 2015
Vocal de la Sección Territorial de Aragón de la RSEQ

M^a. Victoria Jiménez Rupérez. Científico Titular CSIC

Coordinadora de la Comisión Académica del Programa de Doctorado de Química Inorgánica

Antonio Laguna. Profesor Emérito

Miembro del International Advisory Board of Gold Bulletin
Miembro del International Advisory Board of Current Inorganic Chemistry
Miembro del International Advisory Board of The Open Inorganic Chemistry Journal Miembro del International Advisory Board of Inorganics
Miembro del International Advisory Board of ISRN Biochemistry
Miembro del International Advisory Board of Studia Universitatis Babes-Bolyai Seria Chemia
Miembro del International Advisory Board of Naturaleza Aragonesa

Mariano Laguna. Profesor Investigación CSIC

Miembro del Editorial Board de Chemistry: An Indian Journal, seccion Organometallis 2006
Miembro del Editorial Board de Current Inorganic Chemistry 2009
Miembro del Editorial Board de Dataset Papers in Science (Hindawi Pub. Corpor.)
Vocal externo de la comision de Garantia de la Calidad del Master de Investigación en Síntesis Química y Catalisis Homogenea

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)
Advisor de la Commission on Structural Chemistry de la International Union of Crystallography (IUCr)
Miembro de la Real Academia de Ciencias de Zaragoza

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
Vocal de la Comisión Evaluadora para XXX Olimpiada Química de Aragón 2017 (7 abril 2017)
Participación en preparación de las pruebas para XXX Olimpiada Química de Aragón 2017

José Antonio Mayoral. Catedrático UZ

Miembro del Comité Organizador 10th Congress on Catalysis Applied to Fine Chemicals (CAFC10), Turku (Finlandia)

Eugenia Marqués López. Prof. Ayudante Dr.

Miembro del Claustro de la Universidad de Zaragoza
Adjunta a la Dirección para Relaciones Internacionales en la Escuela Politécnica Superior desde Diciembre 2016-Actual
Presidenta de la Comisión de Movilidad de la Escuela Politécnica Superior de Huesca y vocal del Comité de Calidad de la Escuela Politécnica Superior de Huesca

Marta Martín Casado. Científica Titular

Coordinadora de la Comisión Académica del Programa de Doctorado de Química Inorgánica

Pedro Merino. Catedrático UZ

Chairman del Panel CHEM. Acciones Marie Curie. ITN. Horizon 2020. Miembro del panel de evaluación nacional FCT (Portugal)
Miembro del comité de alegaciones de proyectos de excelencia (DEVA)

Luis A. Oro. Catedrático UZ

Comités

Consejo Rector de la Agencia Estatal de Investigación
Consejo Asesor De Ciencia, Tecnología e Innovación
Comité Científico, IKERBASQUE
Alto Consejo Consultivo I+D+i de la Generalitat Valenciana
Advisory Board, Institute of Advanced Materials, Universitat Jaume I
Co-presidente de ChemPubSoc Europe
External Advisory Committee, Catalysis and Sustainability PhD Program, Portugal
Editorial Board, Inorganica Chimica Acta
Pertenece a Academias Científicas
German National Academy of Sciences Leopoldina.
Académie de Sciences, Francia
European Academy of Sciences
Hungarian Academy of Sciences
Academia Europaea
Real Academia de Ciencias de Zaragoza

Raquel Pérez Herrera. Científico Titular CSIC

Secretaria de la Comisión Académica de Doctorado en Química Orgánica (Dpto. Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza). 2014-Actual
Miembro del Editorial Board en Molecules en la sección de "Organic Synthesis"
Editor Invitado de la Revista Molecules para un número especial permanente titulado "Recent Advances in Organocatalysis"
Editor Invitado de la Revista Catalysts para un número especial (2017-2018) titulado "Hydrogen Transfer Reactions"
Editor Invitado de la Revista Catalysts para un número especial (2017-2018) titulado "Hydrogen Bonding Activation"

Jesús Pérez Torrente. Catedrático UZ

Coordinador del Máster en Química Molecular y Catálisis Homogénea

Elísabet Pires. Profesora Titular UZ

Miembro asociado de BIC (Biobased Industry Consortium)
Public-private Partnership (PPP) entre Comisión Europea y Biobased Industry Consortium (BIC)
Miembro de EERA (European Energy Research Alliance) en el Joint program de Bioenergy
Miembro de la plataforma Suschem
Vicedecana de Proyección Científica y Social de la Facultad de Ciencias Adjunta al Director de Departamento de Química Orgánica
Presidenta de la Comisión de Garantía de la Calidad del máster de Materiales Nanoestructurados para Aplicaciones Nanotecnológicas

Luis Salvatella. Profesor Titular UZ

Miembro del Consejo Gestor de la Plataforma Tecnológica Suschem-España

Eduardo Sola Larraya. Investigador Científico CSIC

Organizador del Ciclo de conferencias ISQCH en 2017
Vocal de la junta de gobierno del Grupo Especializado de Química Organometálica de la RSEQ
Coordinador del simposio: S19. Reacciones de formación y ruptura de enlaces inducidas por metales. Diseño de ligandos en la XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ, Sitges 25-29 Junio 2017

Esteban Urriolabeitia. Investig. Científico CSIC

Miembro del Editorial Board de la revista *Journal of Chemistry* (Hindawi Publishing Corporation) en la sección de: *Organometallic Chemistry*

Representante de España en el Management Committee del citado proyecto 2016-actualidad

Violeta Sicilia. Profesora Titular UZ

Vocal de la Comisión A3 del Programa ACADEMIA de ANECA

4.6 PATENTES

Patentes Internacionales

Inventores: J.-Y. Tsai, P.-L. Boudreault, C. Xia, M. A. Esteruelas, A. M. López, E. Oñate, A. San Torcuato

Título: Organic electroluminescent materials and devices

N. de solicitud: 15/248,317 Países de prioridad: USA

Fecha de prioridad: 26 agosto 2016

N. de publicación: US2017/0084849 A1

Fecha publicación: 23 marzo 2017

Entidad titular: Universal Display Corporation

Inventores: J.-Y. Tsai, C. Xia, C. Lin, A. U. Palacios, E. Oñate, M. A. Esteruelas, P.-L. Boudreault

Título: Organic electroluminescent materials and devices

N. de solicitud: 15/407,337

Países de prioridad: USA

Fecha de prioridad: 17 enero 2017

N. de publicación: US2017/0229663 A1 Fecha publicación: 10 agosto 2017

Entidad titular: Universal Display Corporation

Patentes Nacionales

Mariano Laguna Castrillo, Maria Nera Tejedor Serrano y Jesus Julian Diez Alonso
Procedimiento para la recuperación de tantalato metal de condensadores electroquímicos
Solicitud PCT P201631166 del 7 septiembre 2017

Mata, J. A.; Ventura-Espinosa, D.; Carretero, A.; Baya, M.; García, H.

Procedimiento para la producción y almacenamiento de hidrógeno mediante deshidrogenación catalítica, y uso de un catalizador de un metal de transición anclado sobre un soporte de un material de carbono para la obtención de hidrógeno mediante reacciones de deshidrogenación catalítica

Nº solicitud: 201730918

Pais de prioridad: España

Entidad titular: Universitat Jaume I, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Universitat Politècnica de València, Universidad de Zaragoza



Apartado 5. Formación

DOCENCIA EN MÁSTERES

Los miembros del Instituto imparten docencia en cinco másteres oficiales impartidos por la Universidad de Zaragoza. Éstos, están dirigidos a licenciados y graduados 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.

Curso 2017-18

Máster Universitario en Química Molecular y Catálisis Homogénea

http://titulaciones.unizar.es/mas_quimimol/

El objetivo del Máster es la formación en diseño molecular aplicado a la preparación de nuevos compuestos con propiedades específicas y al desarrollo de catalizadores para llevar a cabo transformaciones de un modo eficiente, limpio y selectivo. El Máster proporciona al estudiante la formación adecuada para:

- Diseñar nuevas rutas de síntesis y aplicar las metodologías sintéticas necesarias para la preparación de nuevos productos con propiedades o funciones predeterminadas, implicando, en ocasiones, la aportación de los métodos computacionales.
- Familiarizarse con la utilización e interpretación de las técnicas de caracterización estructural de compuestos moleculares en disolución y fases condensadas.
- Entender y aplicar los principios de la catálisis al diseño de productos químicos a escala de laboratorio observando las normas de sostenibilidad y el respeto ambiental.

El Máster pretende facilitar la adquisición de conocimientos y destrezas que permitan la incorporación de los alumnos egresados en distintos ámbitos en el marco de la investigación y el desarrollo (I+D), tanto en centros de investigación públicos o privados, así como en el ámbito empresarial.

Máster Universitario en Química Industrial

http://titulaciones.unizar.es/mas_quim_indus/

El objetivo de este máster consiste en la formación de profesionales capacitados para la incorporación inmediata en instalaciones de la Industria Química. Las competencias generales que se adquieren en el mismo son las siguientes:

- Conocer con profundidad la fisicoquímica de los procesos industriales estudiados
- Describir y proponer aplicaciones de diversas metodologías avanzadas en la industria química.
- Reconocer el impacto de los productos y procesos químicos en el Medioambiente y proponer métodos para evaluarlo y reducirlo.
- Conocer y saber aplicar con detalle métodos y procedimientos avanzados de control de procesos y productos a escala industrial
- Conocer, implantar y desarrollar sistemas de gestión en la empresa.
- Aplicar la legislación existente en el uso de sustancias y preparados químicos.
- Identificar, analizar y definir los elementos principales de un problema para resolverlo con rigor en el entorno de la Química Industrial.
- Desarrollar un trabajo complejo en el entorno de la Química Industrial, participando en las etapas de búsqueda bibliográfica, planificación, obtención de resultados e interpretación y difusión de los mismos.

- Dominar las herramientas técnicas y de gestión para la investigación y el desarrollo de procesos, de productos y de servicios en la industria química y afín, incluyendo habilidades en la gestión de conocimiento y capacidad para desarrollar y aplicar ideas originales y para liderar proyectos

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

MASTER de Química Avanzada. Universidad de Burgos

Título: Espectrometría de masas en compuestos inorgánicos. (20 h)

Profesor: Mariano Laguna

Fecha: 29 Nov - 1 Dic. Curso 2017-2018

Otros Cursos de formación

Título del curso: Caracterización Químico-física de la superficie de los sólidos

Tipo de curso: Curso de Postgrado. Universidad: CSIC-Universidad de Extremadura

Facultad / Escuela: Universidad de Extremadura (Jarandilla de la Vega)

Horas: 20

Fecha: 6-9 junio 2017

Asistentes: 50

Director: Mariano Laguna y Julian Garrido (Directores), Asunción Luquín (Secretaria)

Impartido por: J. R. González, N. Homs, J. J. Garrido, J. M. Guil, J. L. García, A. Bernalte, V. Rives, C. Domingo, J. Sanz, F. J. Urbano, A. Martínez

Metals and Water 2017. II International conference on wáter soluble metal complexes

Organizer committee. Chairman Mariano Laguna

Secretary: Alicia Buceta and Elisa Abas

Participantes 60

Jaca (Huesca-España) 13-15 Junio 2017

<http://www2.ual.es/mws-2017/programa.html>

Título: Curso práctico de manejo de espectrómetros de RMN. Nivel básico

Tipo de actividad: Curso de postgrado. Consejo Superior de Investigaciones Científicas en el ISQCH (centro mixto CSIC-UZ)

Director: Esteban Urriolabeitia

Fecha: mayo 2017 (13 participantes)

Fecha: noviembre 2017 (18 participantes)

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, Ciencias Ambientales e Ingeniería Agroalimentaria y del Medio Rural.

PDI Dr.		
Profesor Emérito	UZ	5
Catedrático Universidad	UZ	7
Catedrática E.U.	UZ	1
Titular Universidad	UZ	19
Prof. Contratado Doctor	UZ	8
Prof. Contratado Doctor Inv.	UZ	2
Prof.Dr Vinculado	CUD	2
Inv. Contr. ARAID	DGA	1
C. Ramón y Cajal	UZ	1
C. Juan de la Cierva	UZ	1
PDI Dr. Total	UZ	47

TESIS DOCTORALES Y PROYECTOS FINAL DE MÁSTER

Nº Tesis Doctorales: 10

Nº Trabajos Fin de Máster (TFM): 13

Nº Trabajos Fin de Grado (TFG): 41

Tesis Doctorales

Título del trabajo: ACTIVACIÓN DEL ENLACE N.H DE AMONÍACO Y FUNCIONALIZACIÓN MEDIADA POR PRECURSORES ORGANOMETÁLICOS DE RODIO E IRIDIO: ESTUDIOS TEÓRICOS Y EXPERIMENTALES.

Doctorando-a/alumno-a: Betoré De Ulierte, María Pilar

Directores/as: Casado Lacabra, Miguel Ángel. Polo Ortiz, Victoriano

Calificación: Sobresaliente cum laude **Fecha de lectura:** 27/01/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS Y REACTIVIDAD DE NUEVOS COMPLEJOS MIXTOS FOSFINA-CARBONO N-HETEROCÍCLICO DE OSMIO.

Doctorando-a/alumno-a: Fernández Cardo, Juan José

Directores/as: Esteruelas Rodrigo, Miguel Ángel. Buil Juan, María Luisa

Calificación: Sobresaliente cum laude **Fecha de lectura:** 13/03/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS DE HETEROCICLOS MEDIANTE REACCIONES DE ACTIVACIÓN DE ENLACES C-H Y ACOPLAMIENTO CON ALQUENOS Y ALQUINOS CATALIZADA POR RU.

Doctorando-a/alumno-a: Ruiz Morte, Sara

Director/a: Urriolabeitia Arrondo, Esteban

Calificación: Sobresaliente cum laude **Fecha de lectura:** 27/04/2017

Título del trabajo: NEW GLYCOMIMETIC LIGANDS TARGETING HUMAN GLYCOSYLTRANSFERASES.

Doctorando-a/alumno-a: Ghirardello, Mattia

Directores/as: Tejero López, Tomás. Delso Hernández, José Ignacio

Calificación: Sobresaliente cum laude **Fecha de lectura:** 03/05/2017

Título del trabajo: FUNCTIONALIZED BIS (N-HETEROCYCLIC CARBENE) METAL COMPLEXES: SYNTHESIS, REACTIVITY AND CATALYTIC APPLICATIONS.

Doctorando-a/alumno-a: Puerta Oteo, Raquel

Directores/as: Pérez Torrente, Jesús Julián. Jimenez Ruperez, Maria Victoria

Calificación: Sobresaliente cum laude **Fecha de lectura:** 26/05/2017

Título del trabajo: DISEÑO Y SÍNTESIS DE INHIBIDORES DE TRANSGLICOSILASAS FÚNGICAS.

Doctorando-a/alumno-a: Gomollón Bel, Fernando

Directores/as: Tejero López, Tomás. Delso Hernández, José Ignacio

Calificación: Sobresaliente cum laude

Fecha de lectura: 29/05/2017

Título del trabajo: ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA IN VIVO Y ACENTUACIÓN DE LA METALOFILIA EN COMPUESTOS DE PLATA Y ORO CON LIGANDOS CARBENO N-HETEROCÍCLICOS.

Doctorando-a/alumno-a: Vellé Ruiz, Alba

Director/a: Sanz Miguel, Pablo José

Calificación: Sobresaliente cum laude **Fecha de lectura:** 29/09/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES FOTOFÍSICAS DE COMPLEJOS DE OSMIO(II) Y OSMIO(IV).

Doctorando-a/alumno-a: Gómez Alabau, Roberto

Directores/as: Oliván Esco, Montserrat. Esteruelas Rodrigo, Miguel Ángel

Calificación: Sobresaliente cum laude **Fecha de lectura:** 24/10/2017

Título del trabajo: SYNTHESIS OF SQUARAMIDES AND THEIR APPLICATION IN ORGANOCATALYSIS: COMPUTATIONAL AND EXPERIMENTAL STUDIES.

Doctorando-a/alumno-a: Alegre Requena, Juan Vicente

Directores/as: Pérez Herrera, Raquel. Marqués López, María Eugenia

Calificación: Sobresaliente cum laude (Mención Europea) **Fecha de lectura:** 15/12/2017

Título del trabajo: SELF-ASSEMBLY OF PHENYLALANINE DERIVATIVES.

Doctorando-a/alumno-a: Mayans Tayadella, Enric

Directores/as: Catiuela Marín, Carlos. Puiggalí Bellalta, Jorge (ETSEIB)

Universidad: Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial de Barcelona – ETSEIB)

Calificación: Sobresaliente cum laude **Fecha de lectura:** 18/12/2017

Trabajos Fin de Máster

Título del trabajo: NOMENCLATURA: EL LENGUAJE DE LA QUÍMICA

Doctorando-a/alumno-a: Larramona Asensio, Carmen

Directores/as: Ara Laplana, Irene Victoria. De Echave Sanz, Ana Carmen

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 06/07/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS DE COMPLEJOS DE METALES DEL GRUPO DEL PLATINO ESTABILIZADOS POR LIGANDOS TRIFLUOROMETILO: COMPLEJOS DE PD(IV)

Doctorando-a/alumno-a: Rosoiu, Sabrina Patricia

Director/a: Baya García, Miguel

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 12/07/2017

Título del trabajo: TAUTOMERIZACIÓN DE LA DIALILAMINA EN COMPLEJOS CATIONICOS DE IR(III)

Doctorando-a/alumno-a: Salom Català, Antoni

Director/a: Martín Casado, Marta

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 12/07/2017

Título del trabajo: RECUPERACIÓN DE METALES EN EQUIPOS ELECTRÓNICOS

Doctorando-a/alumno-a: Narimán Ruiz, Santiago

Director/a: Laguna Castrillo, Mariano

Calificación: Aprobado **Fecha de lectura:** 17/07/2017

Título del trabajo: COMPLEJOS DE IRIDIO CON LIGANDOS BIFUNCIONALES DE TIPO NSI: ESTUDIO DE SU REACTIVIDAD

Doctorando-a/alumno-a: Guzmán Velasco, Jefferson

Director/a: Fernández Álvarez, Francisco José

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 29/09/2017

Título del trabajo: DISEÑO DE COMPLEJOS DE ORO PARA EL TRATAMIENTO ANTITUMORAL POR HIPERTERMIA

Doctorando-a/alumno-a: Alconchel Sánchez, Adrián

Director/a: Cerrada Lamuela, Elena

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 29/09/2017

Título del trabajo: DISEÑO DE COMPLEJOS EMISORES DE LUZ Y SU COMPORTAMIENTO EN MATERIALES COMPUESTOS

Doctorando-a/alumno-a: Vázquez Sánchez, Maitane

Director/a: Crespo Zaragoza, Olga

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 29/09/2017

Título del trabajo: ENCAPSULACIÓN DE PIGMENTOS LUMINISCENTES PARA MEJORAR SUS PROPIEDADES Y APLICACIONES

Doctorando-a/alumno-a: Pereira Esclapés, Rafael

Director/a: Laguna Castrillo, Mariano

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 29/09/2017

Título del trabajo: PIRAZOLATO-COMPLEJOS DEL GRUPO DEL ORO CON PROPIEDADES LUMINISCENTES

Doctorando-a/alumno-a: Rubio Lacruz, Helena

Directores/as: Elduque Palomo, Ana Isabel. Giménez Soro, Raquel

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 29/09/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS CON ESQUELETO CICLOBUTANO A TRAVÉS DE REACCIONES DE FOTOCICLOADICIÓN [2+2] COMBINADAS CON INTERMEDIOS ORGANOMETÁLICOS

Doctorando-a/alumno-a: Cortés García, Darío

Directores/as: Urriolabeitia Arrondo, Esteban. Cativiela Marín, Carlos Alberto

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 29/09/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS Y REACTIVIDAD DE NUEVOS COMPLEJOS DE PT (II) CON CARBENOS N-HETEROCÍCLICOS CICLOMETALADOS: UNA NUEVA ESTRATEGIA HACIA EMISORES FOSFORESCENTES ALTAMENTE EFICIENTES

Doctorando-a/alumno-a: Arnal Valles, Lorenzo

Directores/as: Sicilia Martínez, María Violeta. Fuertes Lorda, Sara

Calificación: Matrícula de honor **Fecha de lectura:** 29/09/2017

Título del trabajo: VALORIZACIÓN DE SUBPRODUCTOS EN INDUSTRIAS QUÍMICAS DEL EBRO A TRAVÉS DE HERRAMIENTAS DE CONTROL DE PROCESO

Doctorando-a/alumno-a: Fernández Palacio, Pablo

Directores/as: Elduque Palomo, Ana Isabel. Cavero Menéndez, Emma

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 29/09/2017

Título del trabajo: EVALUACIÓN IN VITRO DE LA ACTIVIDAD ANTITUMORAL DE COMPLEJOS DE ORO CON LIGANDOS DITIOCARBAMATO

Doctorando-a/alumno-a: Quero Bellido, Luis Javier

Directores/as: Cerrada Lamuela, Elena. Rodríguez Yoldi, María Jesús

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 02/10/2017

Trabajos Fin de Grado

Título del trabajo: REACCIONES DE ACOPLAMIENTO CARBONO-CARBONO CON CATALIZADORES RECICLABLES

Doctorando-a/alumno-a: Elía Lorente, Víctor

Director/a: Merchán Álvarez, Francisco Luis

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 27/02/2017

Título del trabajo: REACTIVIDAD DEL DECABORANO CON BASES DE BRONSTED Y COMPUESTOS DE PLATA: ESTUDIOS ESTRUCTURALES Y ESPECTROSCÓPICOS

Doctorando-a/alumno-a: Pérez Domínguez, Sandra

Directores/as: Sanz Miguel, Pablo José. Macías Maza, Ramón

Calificación: Matrícula de honor **Fecha de lectura:** 27/02/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS DE COMPUESTOS DE ORO CON ACTIVIDAD ANTICANCERÍGENA Y ESTUDIO DE SUS PROPIEDADES

Doctorando-a/alumno-a: Pascual Cebrian, Miriam

Directores/as: Gimeno Floría, María Concepción. Marzo Rubio, Isabel

Calificación: Matrícula de honor **Fecha de lectura:** 27/02/2017

Título del trabajo: COMPUESTOS ANTITUMORALES DE COBRE, PLATA Y ORO Y ESTUDIO DE SUS PROPIEDADES

Doctorando-a/alumno-a: Porta Velilla, Luis

Directores/as: Gimeno Floría, María Concepción. Marzo Rubio, Isabel

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 12/07/2017

Título del trabajo: ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ANTICANCERÍGENAS DE COMPLEJOS METÁLICOS DEL ORO

Doctorando-a/alumno-a: Álvarez Urdiola, Raquel

Directores/as: Cerrada Lamuela, Elena. Rodríguez Yoldi, María Jesús

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 12/07/2017

Título del trabajo: AISLAMIENTO Y DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS CON ACTIVIDAD ANTITUMORAL EN MUESTRAS DE IBC

Doctorando-a/alumno-a: Bascuas Jiménez De Bagüés, Isabel

Directores/as: Tejero López, Tomás. Carrodegua Villar, José Alberto

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: ALFA, BETA-DESHIDROAMINOFOSFONATOS COMO SUSTRATOS EN LA REACCIÓN DE DIELS-ALDER

Doctorando-a/alumno-a: Royo Val, Irene

Directores/as: Sayago García, Francisco Javier. Cativiela Marín, Carlos Alberto

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: AMIDATO COMPLEJOS DE PLATINO (II): SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL Y ESTUDIO DE SUS PROPIEDADES

Doctorando-a/alumno-a: Meelker Gonzalez, Rebecca

Directores/as: Casas del Pozo, José María. Baya García, Miguel

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: BENZOILACIÓN SELECTIVA DE UN DERIVADO DE GLICEROL UTILIZANDO ORGANOCATÁLISIS

Doctorando-a/alumno-a: Pola Garcia, Alejandro

Director/a: López Ram De Viu, María Pilar

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: COMPLEJOS ORGANOMETÁLICOS DE METALES DEL GRUPO 8 ESTABILIZADOS CON LIGANDOS ARENO Y CARBENO N-HETEROCÍCLICO

Doctorando-a/alumno-a: Gutierrez Salafranca, Javier

Director/a: Baya García, Miguel

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: COMPUESTOS DE PALADIO SOLUBLES EN AGUA COMO CATALIZADORES RECICLABLES EN REACCIONES DE SONOGASHIRA

Doctorando-a/alumno-a: Joan Pérez, Raúl

Director/a: Merchán Álvarez, Francisco Luis y Lagun Castrillo, Mariano

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: Compuestos de Paladio y Platino solubles en agua y sus aplicaciones en catálisis

Doctorando-a/alumno-a: Bayona Ramon y Cajal, Rocio

Director/a: Falvello, Larry y Lagun Castrillo, Mariano

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: COMPUESTOS METÁLICOS LUMINISCENTES PARA IMAGEN Y TERAPIA

Doctorando-a/alumno-a: Redrado Domingo, Marta

Directores/as: Gimeno Floría, María Concepción. Fernández Moreira, Vanesa

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: DISEÑO DE CATALIZADORES RH-NHC SOPORTADOS EN ÓXIDO DE GRAFENO PARA HIDRÓLISIS DE SILANOS

Doctorando-a/alumno-a: García Temprado, Vanesa

Director/a: Jimenez Ruperez, Maria Victoria

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: DISEÑO DE LIGANDOS Y COMPLEJOS METÁLICOS SOLUBLES EN AGUA COMO AGENTES TERAPÉUTICOS CONTRA CÁNCER Y ALZHEIMER

Doctorando-a/alumno-a: Espallargas Añón, Natalia

Director/a: Laguna Castrillo, Mariano

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: ESTUDIO DE LAS REACCIONES DE EPOXIDACIÓN Y TRANSPOSICIÓN DE MEINWALD EN ÉSTERES GRASOS: OPTIMIZACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE LOS PRODUCTOS

Doctorando-a/alumno-a: Gil Llamas, Lena

Directores/as: Herrerías Larripa, Clara Isabel. Fraile Dolado, Jose Maria

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: DESARROLLO DE NUEVOS CATALIZADORES ORGANOMETÁLICOS BASADOS EN METALES DE TRANSICIÓN PARA LA SÍNTESIS SOSTENIBLE DE COMPUESTOS DE ALTO VALOR AÑADIDO

Doctorando-a/alumno-a: Urriolabeitia Rodrigo, Asier

Director/a: Castarlenas Chela, Ricardo

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: ESTUDIO LA ACTIVIDAD CATALÍTICA EN AMINOCARBONILACIÓN DE ALQUINOS DE NUEVOS COMPLEJOS DE RODIO-QUINOLINOLATO-CARBENO-N-HETEROCÍCLICO

Doctorando-a/alumno-a: Marina Borraz Casanova

Director/a: Di Giuseppe, Andrea

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: ESTUDIOS DE REACTIVIDAD DE COMPLEJOS DE OSMIO CON UN LIGANDO POP

Doctorando-a/alumno-a: García Palacín, Marta

Director/a: García Yebra, María Cristina

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: FUNCIONALIZACIÓN DE AMINOÁCIDOS A TRAVÉS DE PROCESOS DE ACTIVACIÓN DE ENLACES C-H CATALIZADA POR RUTENIO

Doctorando-a/alumno-a: Guerrero Belza, Jaime

Director/a: Urriolabeitia Arrondo, Esteban

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: LIGANDOS Y COMPLEJOS METÁLICOS SOLUBLES EN AGUA: SÍNTESIS, ESTRUCTURA Y PROPIEDADES BIOLÓGICAS

Doctorando-a/alumno-a: Gómez Bachiller, María

Director/a: Laguna Castrillo, Mariano

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS ASIMÉTRICA DE COMPUESTOS DE INTERÉS BIOLÓGICO

Doctorando-a/alumno-a: Orta Navarro, Sara

Directores/as: Merino Filella, Pedro. Delso Hernández, José Ignacio

Calificación: Matrícula de honor **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS DE BIS-AMINOÁCIDOS CON ESQUELETO DE TIPO CICLOBUTANO FOTOCATALIZADA POR RUTENIO

Doctorando-a/alumno-a: Sierra Sainz-Aja, Sonia

Directores/as: Urriolabeitia Arrondo, Esteban. Cativiela Marín, Carlos Alberto

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS DE INHIBIDORES ENZIMÁTICOS

Doctorando-a/alumno-a: Pedrón Laserna, Jose Manuel

Directores/as: Tejero López, Tomás. Delso Hernández, José Ignacio

Calificación: Matrícula de honor **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS ESTEREOSELECTIVA DE PIRROLIDINAS POLISUSTITUIDAS POR REACCIÓN DE CICLOADICIÓN [3+2] CON ILUROS DE AZOMETINO QUIRALES DERIVADOS DE (R)-GLICERALDEHÍDO

Doctorando-a/alumno-a: Pascual Gascón, David

Director/a: Gálvez Lafuente, José Antonio

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPLEJOS DE IRIDIO ESTABILIZADOS CON UN LIGANDO PINZA PNHP: ACCESO A LA ACTIVACIÓN DE ENLACES C-H MEDIANTE COOPERACIÓN METAL-LIGANDO

Doctorando-a/alumno-a: López Nieto, Pablo

Director/a: Casado Lacabra, Miguel Ángel

Calificación: Matrícula de honor **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS DE ORO Y PLATA CON POTENCIALES PROPIEDADES ANTITUMORALES

Doctorando-a/alumno-a: Arteta Ciauriz, Maite

Director/a: Villacampa Pérez, María Dolores

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: TRANSFORMACIÓN DE DERIVADOS DE ÁCIDOS GRASOS PARA LA OBTENCIÓN DE COMPUESTOS DE INTERES INDUSTRIAL

Doctorando-a/alumno-a: Rincón Parra, Raquel del

Directores/as: Herrerías Larripa, Clara Isabel. Fraile Dolado, Jose Maria

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 14/07/2017

Título del trabajo: EFICIENCIA ENERGÉTICA Y ENERGÍAS ALTERNATIVAS EN CAMPAMENTOS.

Doctorando-a/alumno-a: Fernández-Llebrez Panizzoli, Álvaro

Directores/as: Passarelli, Vincenzo. Francisco Javier Sanmartín Sánchez

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 23/08/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPLEJOS DE ORO, PLATA O COBRE CON POTENCIALES PROPIEDADES ANTITUMORALES Y/O CATALÍTICAS

Doctorando-a/alumno-a: González Villa, Raquel

Director/a: Villacampa Pérez, María Dolores

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 06/09/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS Y DESCOMPOSICIÓN DE TRIFLUOROMETIL DERIVADOS DE ORO CON GRUPOS CARBOXILATO

Doctorando-a/alumno-a: González Díaz, Sergio

Directores/as: Casas del Pozo, José María. Menjón Ruiz, Babil

Calificación: Matrícula de honor **Fecha de lectura:** 06/09/2017

Título del trabajo: COMPLEJOS METÁLICOS DEL GRUPO 11 CON PROPIEDADES ANTITUMORALES

Doctorando-a/alumno-a: Abadía Sanz, Patricia

Directores/as: Blanco Ortiz, María del Carmen. Ortego Cañaveras, M^a Lourdes

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 02/10/2017

Título del trabajo: DESARROLLO DE POTENCIALES AGENTES ANTICANCERÍGENOS

Doctorando-a/alumno-a: Azcárate Sedano, Paula

Director/a: Cerrada Lamuela, Elena

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 02/10/2017

Título del trabajo: EMPLEO DE ORGANOCATALIZADORES QUIRALES EN DIVERSAS REACCIONES DE ADICIÓN MICHAEL

Doctorando-a/alumno-a: Martín Martín, Javier

Directores/as: Pérez Herrera, Raquel. Marqués López, María Eugenia

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 02/10/2017

Título del trabajo: NUEVOS COMPUESTOS ORGANOMETÁLICOS DE IRIDIO CON LIGANDOS FOSFANO

Doctorando-a/alumno-a: Pardo Rodríguez, Antonio

Director/a: Passarelli, Vincenzo

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 02/10/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS Y APLICACIÓN DE CATALIZADORES M(BIS-NHC) (M=RH, IR) EN PROCESOS QUÍMICOS SOSTENIBLES

Doctorando-a/alumno-a: Alamán Valtierra, Pablo

Directores/as: Pérez Torrente, Jesús Julián. Fernández Álvarez, Francisco José

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 02/10/2017

Título del trabajo: COMPUESTOS DE ENLACE PT-M: PREPARACIÓN, ESTUDIO ESTRUCTURAL Y DE SUS PROPIEDADES

Doctorando-a/alumno-a: Benito Pérez, Luis

Director/a: Martín Tello, Antonio Jesús

Calificación: Notable **Fecha de lectura:** 03/10/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS DE HIDROSILANOS FUNCIONALIZADOS. ESTUDIO DE SU ACTIVIDAD EN HIDROSILILACIÓN DE CO₂ CATALIZADA POR ESPECIES IR-NSIN

Doctorando-a/alumno-a: Berdonces Layunta, Alejandro

Director/a: Fernández Álvarez, Francisco José

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 03/10/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS SOSTENIBLE DE DISOLVENTES DERIVADOS DE GLICEROL POR ALCOHOLISIS DE EPÓXIDOS CATALIZADA POR ÁCIDOS DE BRÖNSTED

Doctorando-a/alumno-a: Velázquez Ojeda, David

Directores/as: Pires Ezquerro, María Elisabet. García Laureiro, José Ignacio

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 03/10/2017

Título del trabajo: PREPARACIÓN DE COMPLEJOS DE IRIDIO Y ESTUDIO DE SU REACTIVIDAD CON DIAZOALCANOS

Doctorando-a/alumno-a: Estaún Panzano, Juan Antonio

Director/a: Martín Casado, Marta

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 14/09/2017

Título del trabajo: REACTIVIDAD DE DECABORANO CON ACRIDINA: ACTIVACIÓN MECÁNICA E HIDROGENACIÓN

Doctorando-a/alumno-a: Torguet Forradellas, Adrián

Directores/as: Macías Maza, Ramón. Fernández Moreira, Vanesa

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 06/10/2017

Título del trabajo: SÍNTESIS DE COMPLEJOS DE METALES DE TRANSICIÓN CON LIGANDOS POLIFUNCIONALES

Doctorando-a/alumno-a: Marcuello Garcia, Sergio

Director/a: Ara Laplana, Irene Victoria

Calificación: Sobresaliente **Fecha de lectura:** 06/10/2017



Apartado 6. Proyección internacional

Investigación en colaboración con centros extranjeros**Grupo de investigación:** Aminoácidos y péptidos

- Universidad de Padua, Padua (Italia)
- Universidad de Regensburg, Regensburg (Alemania)
- Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca (México)
- Instituto Nacional del Cáncer - NIH (Estados Unidos)

Grupo de investigación: Activación molecular a través de organometálicos

- Brooklyn College and the Graduate Center of the City, University of New York (USA)
- University and INSA of Rouen - UMR 6014 - Rouen (Francia)

Grupo de investigación: Arquitectura molecular inorgánica y aplicaciones

- Centre for Theoretical and Computational Chemistry (CTCC) and Department of Chemistry, University of Oslo (Norway)

Grupo de investigación: Catálisis heterogénea en síntesis orgánicas selectivas

- Universidad de Aveiro (Portugal). Prof. João Coutinho
- ICIQ, Institut Català d'Investigació Química. Dr. Arian Kleij

Grupo de investigación: Catálisis homogénea por compuestos organometálicos

- King Fahd University Of Petroleum & Minerals (Arabia Saudi)

Grupo de investigación: Catalizadores y mecanismos

- Universidad Wilfrid Laurier, Waterloo, Ontario (Canadá)

Grupo de investigación: Química inorgánica y de los compuestos organometálicos

- Departamento DICATECh del Politecnico de Bari y del Istituto CNR-ICCOM de Bari (Italia)
- Institute of Crystallography, Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR), Bari, Italy
- Optoelectronic group, Istituto per lo Studio delle Macromolecole (ISMAC), Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR), Milano Italy

Grupo de investigación: Química de oro y plata

- University of Cagliari (Italy)
- Universidad Autónoma de Madrid
- University of Southampton. Highfield Campus. Southampton (UK)
- Universidad de La Rioja
- Universidad de Lisboa (Portugal)
- Universidad de la Costa (Colombia)

Grupo de investigación: Organometálicos y catálisis

- Universal Display Corporation, Ewing, New Jersey (USA)
- Università di Pisa, Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale
- Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Institut des Sciences et Ingénierie Chimiques

Grupo de investigación: Organocatálisis Asimétrica

- Universität Regensburg. Fakultät für Chemie und Pharmazie. Institut für Organische Chemie. Regensburg (Germany)
- University of Southampton. Highfield Campus. Southampton (UK)
- Université de Sfax. Laboratoire Physico-chimie de l'Etat Solide. Département de Chimie, Faculté des Sciences de Sfax (Tunisie)

Estancias de investigación en centros extranjeros

Grupo de investigación: Organocatálisis asimétrica

Investigador: Fernando Auria Luna

Centro extranjero: Programa Ibercaja-CAI de Estancias de Investigación 2017

Fechas de la estancia: 1 de febrero - 31 de marzo 2017

Estancias de investigadores extranjeros en el Instituto

Grupo de investigación: Activación molecular a través de organometálicos

Sandra Collado Ruiz

University and INSA of Rouen - UMR 6014 - Rouen (Francia)

Del 21 de febrero al 31 de marzo

Grupo de investigación: Catálisis homogénea por compuestos organometálicos

Investigador: Abdul-Ghani Issam Kamel Taher

Centro de procedencia: University of L'Aquila (Italia)

Fechas de la estancia: 1 de septiembre – 31 de octubre

Grupo de investigación: Química de oro y plata

Investigador: Mary Jones. Estudiante Erasmus

Centro de procedencia: Heriot-Watt University

Fechas de la estancia: 1 de octubre 2016 - 31 Marzo de 2017

Estancias de investigadores en el Instituto

Grupo de investigación: CEPS: Compuestos enantiopuros y procesos sostenibles

Luis Izquierdo Aranda

3-27 de julio de 2017

Patricia Bruñén Fau

Del 26 de junio al 31 julio

Grupo de investigación: Química organometálica aplicada

Agustin Bruno del Castillo Martinez

3 meses Prácticas de Formacion Profesional de grado superior de Media ambiente

Sara Snchez Martinez

3 meses Prácticas de Formacion Profesional de grado superior de Media ambiente

Pablo Angel Romea Ariño

2 meses Prácticas de Formacion Profesional de grado superior de Media ambiente



Apartado 7. Interacción con la sociedad

Conferencias de divulgación científica

En 2016 nuestros investigadores ofrecieron conferencias divulgativas en varios emplazamientos:

Mariano Laguna

Luz en la oscuridad: Luminiscencia

9 Marzo 2017. Centro Cultural del Corte Inglés. Zaragoza

13 Noviembre de 2017. II semana de la ciencia del valle de Benasque (Huesca)

14 Noviembre de 2017. UNED Barbastro (Huesca)

Mariano Laguna

Luminiscencia: Luz nocturna en el planeta de AVATAR (Pandora)

23 Noviembre 2017. Cárcel de Zuera (Zaragoza)

21 Diciembre 2017. Copas con ciencia. Sótano Mágico (Zaragoza).

Mariano Laguna

Economía circular. Investigación Circular.

7 Noviembre 2017. QUIMIARAGÓN 2017. CREA Zaragoza

20 Noviembre 2017. Universidad S. Jorge. Villanueva de Gallego (Zaragoza)

19 Diciembre 2017. Consentino S.A. Cantoria (Almería)

Alicia Buceta

Semana de Inmersión (20h). Universidad de Zaragoza

Manuel Iglesias

“Taller sobre Química”

Escuela Infantil Dadá (Zaragoza) 9 de junio

Organización y dirección de actividades

- Directora de la Cátedra Savirón de Divulgación científica de la Universidad de Zaragoza (Ana I Elduque)
- Directora de la revista de divulgación científica conCIENCIAS de la Universidad de Zaragoza (Ana I Elduque)
<https://divulgacionciencias.unizar.es/conciencias/>
- Editora de conCIENCIAS (en 2017, nº: 19 Y 20) (Ana I Elduque)
<http://divulgacionciencias.unizar.es/revistas/web/revistas/revista/19>
<http://divulgacionciencias.unizar.es/revistas/web/revistas/revista/20>
- Directora de la revista Quimicosas del Colegio oficial de Químicos de Aragón y Navarra (Ana I Elduque).
<http://www.quimicosaragonavarra.org/quimicosas.html>
- Organizadora del ciclo de charlas “Encuentros con la Ciencia” en Ámbito cultural de El Corte Inglés (Zaragoza) (Ana I Elduque)
- Miembro del Consejo de Redacción de la Revista ARMAS y CUERPOS (ISSN: 2445-0359) de la Academia general Militar de Zaragoza (Ana I Elduque)
<https://publicaciones.defensa.gob.es/armas-y-cuerpos-revistas-pdf-19517.html>

Artículos de divulgación científica

Miguel Baya, Jose A. mata

"Economía del hidrógeno: ¿una alternativa energética viable?"

Colaboración con Tercer Milenio (suplemento de divulgación científica del Heraldo de Aragón, 14-11-2017)

[Heraldo.es](http://heraldo.es)

Una nueva política académica

Ana I. Elduque

conCIENCIAS.digital nº 19, mayo 2017, pág 30. Ed. Facultad de Ciencias-Universidad de Zaragoza.

Depósito Legal: Z-1942-08, ISSN: 1888-7848. Clave: A

<https://divulgacionciencias.unizar.es/conciencias/>

<http://divulgacionciencias.unizar.es/revistas/web/revistas/revista/19>

La formación en Prevención de Riesgos en el laboratorio en el Grado en Química

A. Elduque, A. Blein y C. García Yebra

Quimicosas nº 24, octubre 2017, Ed. Colegio Oficial de Químicos de Aragón y Navarra.

http://www.quimicosaragonavarra.org/docs/quimicosas/QC_24.pdf

Artículos de divulgación científica internacional

Esteban P. Urriolabeitia, miembro del equipo de Divulgame.org (ver <http://divulgame.org/equipo>), participa como traductor habitual de artículos del Chemical&Engineering News al español, dentro de la campaña de la American Chemical Society de difusión y divulgación de la ciencia, y que ha llevado a un acuerdo de colaboración entre C&EN y divulgame.org.

Más detalles en la página web: <https://cen.acs.org/sections/espanol.html>

7.1. ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN DEL ISQCH

El Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH) es un instituto comprometido con la cultura científica, en una sociedad que demanda, cada vez más, conocer el trabajo de los investigadores y los beneficios que estas investigaciones les aportan como ciudadanos.

La Unidad de Cultura Científica del ISQCH ha sido en 2017 **reconocida como Unidad de Cultura Científica y de la Innovación (UCC+i) por parte de Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología (FECYT)** por su trabajo en el fomento de la cultura científica, tecnológica y de la innovación a través de diversas actividades.

En esta línea, se ha creado la **Unidad de Cultura Científica (UCC)** encargada de las actividades de divulgación y difusión del instituto y cuyos principales objetivos son:

- Dar a conocer las líneas básicas del trabajo desarrollado en el ISQCH de un modo sencillo y fácilmente entendible, sin perder por ello, rigor en la información científica
- Fomentar la creación de la cultura científica en la sociedad, aproximando la sociedad al saber científico y sus aplicaciones prácticas
- Despertar nuevas vocaciones científicas entre los más jóvenes
- Aumentar la visibilidad y el reconocimiento del trabajo de investigación realizado en el instituto a nivel local, nacional e internacional
- Mejorar la preparación de profesionales en el ámbito de la Química gracias a la oferta formativa del Instituto

Para cumplir con su función, la UCC desarrolla, de manera anual, un Plan de divulgación y difusión científica en el que se establecen, de modo sistemático, las actividades que se llevarán a cabo a lo largo del año y que se presenta en una sesión abierta al público.

El ISQCH cuenta con:

Página Web (<http://www.isqch.unizar-csic.es/ISQCHportal/>)

Página en Facebook (<https://www.facebook.com/ISQCHdivulga>)

Cuenta en twitter (https://twitter.com/ISQCH_Divulga)

Blog "Moléculas a reacción" (<https://isqch.wordpress.com/>).

IV Concurso Cristalización en la Escuela (FCT-16-10906)

El Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH, CSIC-UNIZAR), el Instituto Universitario de Investigación en Ciencias Ambientales de Aragón (IUCA), la Facultad de Ciencias y la Facultad de Educación de la Universidad de Zaragoza, con la colaboración del programa Ciencia Viva del Gobierno de Aragón organizan el IV Concurso de Cristalización en la Escuela en Aragón dirigido a alumnos de secundaria y cuyo principal objetivo es la divulgación de la importancia del mundo de los cristales en la sociedad moderna. A la vez se pretende, aprovechando experimentos atractivos de crecimiento de cristales, fomentar el estudio, el trabajo sistemático, el pensamiento racional y la comunicación entre los jóvenes estudiantes, para fomentar las vocaciones científicas entre los estudiantes pre-universitarios y dar a conocer cómo se trabaja y compete en ámbitos científicos.

El concurso tiene tres fases. En la primera de ellas, personal investigador de la Universidad de Zaragoza y del Consejo Superior de Investigaciones Científicas formarán a los profesores participantes para dotarles de **herramientas científico-didácticas** para la realización de los experimentos de cristalización con sus alumnos. Estas jornadas de formación, **de asistencia obligatoria para todos los profesores** que participen en el concurso, tuvieron lugar a finales del 2016.

La segunda fase del concurso englobó la realización de experimentos en la escuela, en la

que se utilizó inicialmente un kit didáctico,- suministrado por la organización,- que permite crecer cristales de ADP (fosfato amónico), que son visualmente impactantes, y con suficiente contenido científico para atraer la atención de los alumnos y potenciar su espíritu investigador. Para ello los participantes contarán con una guía didáctica, de manera que a través de una actividad de aprendizaje entretenida y estimulante, los alumnos desarrollaron una comprensión con profundidad de los conceptos implicados en los experimentos, al tiempo que se fomenta su interés general por la Ciencia. El material necesario (ADP) para crecer los cristales es proporcionado por la organización. El centro debe facilitar las instalaciones para la realización de las experiencias.



La tercera fase tuvo lugar el pasado 5 de mayo de 2017 celebrándose la final de la cuarta edición del concurso que contó con alrededor de 1500 estudiantes y 80 profesores de 50 centros de Educación Secundaria repartidos a lo largo de 23 localidades diferentes de toda la geografía aragonesa (Aínsa, Alagón, Almudévar, Ateca, Binéfar, Borja, Calatayud, Cariñena, Castejón de Sos, Ejea de los Caballeros, Épila, Huesca, Maella, Mallén, Monreal del Campo, Sabiñánigo, Sariñena, Tarazona, Teruel, Utebo, Utrillas, Valderrobres y Zaragoza). Durante la final los alumnos participantes expusieron (en español o inglés) el trabajo realizado en estos meses como si de un congreso científico se tratara. Para ello los alumnos mostraron a un jurado multidisciplinar los cristales que habían obtenido y explicaron el trabajo

que habían realizado y cómo habían seguido el método científico con su cuaderno de laboratorio, apoyándose en un poster y exponiendo un video que ellos mismos habían realizado. Como novedad en esta edición, los estudiantes presentaron los blogs científicos que habían creado para el concurso.

El acto de presentación de los resultados, abierto al público, se desarrolló en el hall de la Facultad de Educación de la Universidad de Zaragoza. La entrega de premios transcurrió en el Aula Magna de la Facultad de Ciencias y este año además tuvo lugar un concurso presencial utilizando la aplicación para móviles “Hi Score Science”, en el que los alumnos pusieron a prueba sus conocimientos científicos.



A lo largo de todo el desarrollo del Concurso de Cristalización se mantiene activa una comunidad virtual que actúe paralela e integrada a la comunidad presencial (con su página de Facebook <https://goo.gl/3jrRKC> y el canal de YouTube <https://goo.gl/fD1ZBp>). Esta comunidad permite intercambiar comentarios/imágenes entre los participantes, así como recibir soporte por parte de los organizadores del Concurso. Se habilita, asimismo, una cuenta de e-mail para realizar cualquier tipo de consultas a los organizadores.

acompañados por su profesor.

En la edición 2016-2017, **la participación se limitó a 40 centros**, teniendo en cuenta que en la final formó parte un máximo de 40 equipos formados por 3 alumnos,

La actividad cuenta con el patrocinio de la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología (FECYT), la Universidad de Zaragoza, El Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), la Facultad de Ciencias, el Instituto Universitario de Ciencias Ambientales (IUCA), el Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH), la Facultad de Educación, el Dpto. de Ciencias de la Tierra, el Dpto. de Ciencias Experimentales, la Real Sociedad de Química, la Sociedad Española de Mineralogía, la Catedra IQE, el Grupo Especializado en Cristalografía, la Factoría de Cristalización y la delegación del CSIC en Aragón.



V Concurso Cristalización en la Escuela (FECYT FCT-15-9866)

El Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH, CSIC-UNIZAR), el Instituto Universitario de Investigación en Ciencias Ambientales de Aragón (IUCA), la Facultad de Ciencias y la Facultad de Educación de la Universidad de Zaragoza, con la colaboración del programa Ciencia Viva del Gobierno de Aragón organizan el V Concurso de Cristalización en la Escuela en Aragón dirigido a alumnos de secundaria y cuyo principal objetivo es la divulgación de la importancia del mundo de los cristales en la sociedad moderna. A la vez se pretende, aprovechando experimentos atractivos de crecimiento de cristales, fomentar el estudio, el trabajo sistemático, el pensamiento racional y la comunicación entre los jóvenes estudiantes, para fomentar las vocaciones científicas entre los estudiantes pre-universitarios y dar a conocer cómo se trabaja y compete en ámbitos científicos. Y que tiene lugar en el curso académico 2017-2018.

Durante el año 2017 tienen lugar la mitad del proyecto: una primera fase que comenzó en

noviembre con un curso de formación dirigido al profesorado de Educación Secundaria en el que el personal docente e investigador de la Universidad de Zaragoza y el Consejo Superior de Investigaciones Científicas abordaron los conceptos básicos de la Cristalografía, la presencia de cristales en nuestro mundo cotidiano y las técnicas básicas de crecimiento cristalino, dotando a los profesores de las herramientas científico-didácticas para la realización de experimentos de



de cristalización con sus alumnos. El pasado jueves 16 de noviembre de 2017 tuvo lugar la primera sesión del curso de formación. La jornada incluyó una conferencia abierta al público que fue ofrecida por el Profesor Juan Jiménez Millán de la Universidad de Jaén: *“Evolución y diversidad... Mineral”* y la presentación del concurso por parte de Pilar García y la charla *“Simetría y Cristalización”* por Blanca Bauluz. La segunda sesión del curso para los profesores aceptados en el concurso tuvo lugar el jueves 23 de noviembre y contó con las siguientes sesiones formativas: *“El maravilloso mundo de los cristales”* - Fernando Lahoz; *“Recursos didácticos”* - Pilar García; *“Análisis del impacto del Concurso de Cristalización”* - M^a Eugenia Dies; *“Protocolo de cristalización”* - M^a José Mayo; *“Una experiencia de participación”* - Manuel Buil.



La segunda fase del concurso ha comenzado posteriormente en los centros educativos con la realización de experimentos en la escuela con la ayuda de una guía didáctica en la que se utilizará inicialmente el kit didáctico suministrado por la organización que permite crecer cristales de ADP (fosfato amónico), que son visualmente impactantes, y con suficiente contenido científico para atraer la atención de los alumnos y potenciar su espíritu investigador.

Durante la final del concurso ya en el 2018 los alumnos participantes expondrán el trabajo realizado durante el curso escolar a modo de congreso científico real. Para ello los alumnos muestran a un jurado multidisciplinar los cristales que han ido obteniendo y explicarán el trabajo realizado, cómo han seguido el método científico con su cuaderno de laboratorio, y el póster y el video que hayan realizado.

El Concurso está organizado por personal de la [Universidad de Zaragoza](#) y el Consejo Superior de Investigaciones Científicas ([CSIC Divulga](#)), pertenecientes a los Instituto Universitarios [ISQCH - Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea](#) y el [Instituto de Investigación en Ciencias Ambientales IUCA](#) y cuenta con la colaboración de la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología (Fecyt), del Departamento de Educación del Gobierno de Aragón (a través del Programa Ciencia Viva), así como con un número de instituciones, empresas y asociaciones científicas.

El concurso dispone de página en Facebook (<http://goo.gl/7Stalo>), canal de youtube (<http://goo.gl/aesC8r>) y twitter (@CristalizAragon) e Instagram (@concursocristalizacionaragon).

Además el Concurso se presentó en las XI Jornadas de Innovación Docente e Investigación Educativa de la Universidad de Zaragoza.

Exposición “Cristales. Un mundo por descubrir” en Huesca y en Teruel

En el 2017 la Exposición “Cristales. Un mundo por descubrir” se expuso desde el 25 de octubre al 10 de diciembre en el Planetario de Huesca. Una vez finalizada en la capital oscense se ha trasladado a la Cámara de Comercio de Teruel donde estará desde el 20 de diciembre al 26 de enero de 2018.

Esta exposición recoge una selección de los cristales más destacados preparados en los laboratorios de distintos centros educativos aragoneses por alumnos de secundaria durante el desarrollo del IV Concurso de Cristalización en la Escuela, que tuvo lugar en el curso académico 2016-2017. Esta exposición se complementa con una muestra de espectaculares cristales naturales (minerales), con una serie de paneles educativos que hablan de la presencia y relevancia de los cristales en nuestro mundo cotidiano (con conexiones QR a internet), así como con un conjunto de vídeos que muestran la experiencia del Concurso de Cristalización contada por sus protagonistas.



Hi Score Science (FCT-15-10220)



Hi Score Science es un juego, en español e inglés, para dispositivos móviles, iOS y Android que nace a partir de un proyecto de divulgación científica FCT-15-10220 "Hi Score Science". El proyecto ha sido desarrollado por dos institutos de investigación, Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH) y el Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA). En el 2017 se contó con la financiación de la Diputación General de Aragón (DGA).

Este juego gratuito sobre preguntas ciencia, en español e inglés está disponible para dispositivos móviles, iOS y Android en las plataformas Play Store (<https://goo.gl/GgWq6N>) y Apple Store (<https://goo.gl/R8inSu>). **Hi Score Science** se ha convertido ya en una herramienta informática que ayudará a los profesores a aumentar la cultura y la vocación científica de sus estudiantes.

El objetivo del proyecto es aumentar la cultura científica de sus usuarios de un modo divertido, **acercando a los jugadores la Química y la Ciencia de los Materiales con las que convivimos a diario**. Hi Score Science se proyecta no sólo como un juego de preguntas con respuestas con varias opciones sobre química y ciencia de materiales sino que quiere llegar más lejos y aumentar la cultura científica y el interés de los usuarios por la ciencia explicándoles qué hay detrás de los nuevos avances en estas temáticas. Para ello, y ya que es un proyecto de divulgación desarrollado entre dos institutos de investigación, **el juego incluye explicaciones divulgativas de la realidad científica que se esconde detrás de cada una de las respuestas buscando incentivar la curiosidad de los usuarios por la ciencia**. Además el proyecto busca que los usuarios se sientan partícipes de Hi Score Science para lo que **se anima a los usuarios a colaborar en la elaboración del contenido científico del juego** enviando preguntas y respuestas a través de la página web www.hiScoreScience.org habilitada para ello. **Además se creó un concurso** para premiar a los alumnos de secundaria de la Comunidad Autónoma de Aragón más activos con un regalo y una visita a las instalaciones del ISQCH y del ICMA para que se sientan verdaderos científicos por un día. La clase de secundaria de la Comunidad Autónoma de Aragón que más preguntas publicó también fue premiada con un viaje científico al Laboratorio Subterráneo de Canfranc, y al Herbario del Instituto Pirenaico de Ecología en Jaca del que disfrutaron en el mes de Enero de 2018.

Debido a lo ambicioso del proyecto, la aplicación se ha proyectado con una estructura que permitirá su mejora y el desarrollo de nuevas características en años sucesivos y cuyo objetivo final incluirá una herramienta que permita competiciones on-line con usuarios de cualquier parte del mundo, con una base de preguntas suficientemente amplia como para que los jugadores siempre descubran preguntas nuevas, e incluso puedan elegirse temáticas concretas al inicio del juego.



Coincidiendo con la entrega de premios del concurso, el pasado 27 de octubre de 2017 en el Aula Magna del Paraninfo de la Universidad de Zaragoza se organizó un concurso presencial donde se entregaron regalos a los estudiantes ganadores.



ISQCH - Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea
Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza - CSIC
C/ Pedro Cerbuna, 12. Zaragoza 50009. Spain

Además este año el Hi Score Science ha recibido el Primer Premio en el XVIII programa internacional **Ciencia en Acción** en la modalidad "Materiales Didácticos de Ciencias en Soporte Interactivo" (Premio IBM), el **Sello D+i TOP**, iniciativa lanzada por la Fundación Zaragoza Ciudad del Conocimiento en colaboración con Ibercaja Obra Social y la empresa Rafer, un reconocimiento a nivel nacional que premia a los mejores proyectos de divulgación científica inclusiva, accesible a todos los ciudadanos y orientada a la integración social y ha sido



finalista en los Premios Tercer Milenio que otorga el Heraldo de Aragón en la categoría “Divulgación en Aragón”.

Twitter: <https://twitter.com/HiScoreScience>

Proyecto CSI-Aragón (FCT-15-9552)

Por quinta vez se celebra en Aragón el proyecto CSI-Aragón co-financiado por Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología (FECYT) en el que alumnos de bachillerato de diferentes centros de Aragón se desplazan a nuestras instalaciones donde a partir de unas pruebas encontradas en un teórica escena de un crimen tienen que resolver un enigma como si de verdaderos técnicos del CSI se trataran.



Aunque surgió como un proyecto ideado por el Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH) y el Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA) desde el año pasado el proyecto fue solicitado desde la Delegación del Consejo Superior de Investigaciones Científicas-CSIC en Aragón incluyendo así no sólo al Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón y al Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea, sino abriéndose al resto de centros del CSIC – o mixtos CSIC Universidad de Zaragoza en Aragón: La Estación Experimental de Aula Dei, el Instituto Pirenaico de Ecología, el Instituto de Carboquímica y el Laboratorio

de Investigación en Fluidodinámica y Tecnologías de la Combustión.

El proyecto fue incluido por la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología (FECYT) en el Catálogo de Prácticas Inspiradoras en Cultura Científica. La FECYT reconociendo de esta manera el proyecto CSI-Zaragoza su formato renovador, su impacto en los participantes y la implicación de los agentes científicos y no científicos. En 2015 el proyecto CSI-Zaragoza fue finalista de los Premios Tercer Milenio, siendo ese año ganador del Premio Tercer Milenio del periódico Heraldo en la categoría Divulgación en Aragón.



La actividad comienza cuando en la escena de un crimen se encuentran varias muestras de origen desconocido y los alumnos deben averiguar su origen y composición realizando experimentos en los Centros/Institutos del CSIC en Aragón. De este modo, los estudiantes no sólo tienen la oportunidad de conocer de primera mano el método científico y algunas de sus técnicas, como la

difracción de rayos X, la microscopía, la cromatografía o la espectroscopia, sino que también son los protagonistas de resolver un misterio. Además cada una de las clases que participaron en el proyecto elaboraron un vídeo explicativo de las técnicas analíticas utilizadas y un póster científico.

El proyecto concluyó el pasado 19 de diciembre en el Patio de la Infanta de Ibercaja donde se clausuró la actividad en la Jornada de Clausura del proyecto de divulgación científica del CSI-Aragón, donde participó D. Eduardo Murcia, médico forense y director del Instituto de Medicina Legal de Aragón con su charla *Ciencia Forense: detectives de laboratorio*. Además se proyectaron los vídeos que habían creado los alumnos, y se realizó la entrega de premios. Posteriormente se visitó la exposición de los pósters realizados por los estudiantes.



De Copas con Ciencia



De copas con ciencia es una iniciativa de los **institutos de investigación, ISQCH** (Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea), e **ICMA** (Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón) que pretende saciar la curiosidad científica de la población en general de un modo distendido, ameno y divertido en el tiempo de ocio acercándola a los bares. La actividad está dirigida a toda la población con curiosidad científica desde estudiantes de instituto hasta adultos sin que sea necesaria una formación específica en ciencias.

Esta actividad se celebra de modo periódico los últimos jueves de cada mes, en **El Sótano Mágico, calle San Pablo 43**, Zaragoza (<http://elsotanomagico.com/>) y contó con aforo completo en su primera y segunda edición.

En el descanso tiene lugar el concurso presencial Hi Score Science, orientado al público general, donde se premia con un libro divulgativo el conocimiento científico de los asistentes.



Estas han sido las sesiones que tuvieron lugar en 2017:

ISQCH - Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea
Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza - CSIC
C/ Pedro Cerbuna, 12. Zaragoza 50009. Spain



26 DE ENERO:

- "Cómo la nanotecnología está cambiando nuestras vidas" – Fernando Palacio (ICMA).

23 DE FEBRERO:

- "Machacando microbios con nanomateriales" – Scott G Mitchell (ICMA).
- "Avogadro vs Hahnemann: el combate del siglo...XIX" – José Ignacio G. Laureiro (ISQCH).

23 DE MARZO:

- "Una historia triste, una dama obstinada y el éxito de los plásticos" – Luis Oriol (ICMA).
- "Dióxido de carbono: química, sociedad y progreso sostenible" – Francisco Fernández (ISQCH).
- "¡Hay un dinosaurio en mi whisky!" – José Edelstein (Universidad de Santiago de Compostela)

27 DE ABRIL:

- "¿Cuántos imanes necesitas para vivir?" – Julia Herrero (ICMA).
- "Cómo transformar el "Plomo" en "Oro": la magia de los catalizadores" – Andrea Di Guiseppe (ISQCH).

26 DE OCTUBRE:

- "Abejas Matemáticas" – Luis Rández (Instituto Universitario de Matemáticas y Aplicaciones - IUMA)
- "Hormigas Químicas" – José Igancio G Laureiro (ISQCH).

30 DE NOVIEMBRE:

- "Curvas y Arte" – Luis Rández (Instituto Universitario de Matemáticas y Aplicaciones - IUMA)
- "Rectas y Cristales" – Fernando Lahoz (ISQCH).

22 DE DICIEMBRE:

- "Sincrotrón: El Señor de los anillos" - Fernando Bartolomé Usieto (ICMA).
- "Luz en el planeta de Avatar (Polifemo)" - Mariano Laguna (ISQCH).

III Concurso de postales del Concurso de Cristalización en la Escuela

Este año se realizó el III Concurso de Postales del Concurso de Cristalización en la Escuela en el que participaron los centros educativos de Aragón. El que más votaciones obtuvo en las redes sociales (facebook e instagram) y que por lo tanto resultó ganador ha sido la del IES Zaurín de Ateca. Además la organización del Concurso, por votación, otorgó premios al IES Matarraña de Valderrobres y el IES Sierra de Guara de Huesca.



Actividades de divulgación en los centros educativos

El personal del ISQCH también realiza desplazamientos a los centros educativos para facilitar el acercamiento de la investigación a las aulas.

Durante el año 2017 el personal del ICMA ha realizado talleres en centros de educación infantil, primaria y secundaria llegando a más de 400 alumnos.



Semana de la Ciencia del CSIC en Aragón

Del 7 al 13 de noviembre de 2017 se celebró la Semana de la Ciencia del CSIC, actividad que se realiza anualmente y cuyo objetivo es presentar las diferentes líneas de investigación de los institutos del CSIC en Aragón a los alumnos de ESO y Bachillerato, posibles futuros investigadores. Se pretende despertar el interés y la curiosidad por la ciencia y la tecnología mediante la observación, la experiencia y el análisis. Para ello, desde los institutos se realizan explicaciones, con la ayuda de demostradores, sobre las líneas de investigación de los institutos.



Esta edición de la Semana de la Ciencia se enmarcó en la temática del Vino para ello contamos con la exposición “La vid, el vino y el CSIC. Dos siglos de investigación”.

La Semana de la Ciencia, es una iniciativa coordinada desde la Delegación del CSIC en Aragón, que cuenta con la participación de los seis institutos del CSIC en Aragón y con el apoyo de la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología (FECYT).



Noche de los investigadores

El pasado viernes 29 de septiembre del 2017, se celebró, por sexta vez en Zaragoza, "La noche de los investigadores" (<http://lanochedelosinvestigadores.esencia.es/>). Este evento, se celebra simultáneamente en 250 ciudades europeas, y está destinado a mostrar el trabajo diario de los investigadores a la sociedad general.

"La Noche de los Investigadores" en Aragón es un proyecto europeo liderado por el consorcio formado por Gobierno de Aragón ([Fundación ARAID](#)), la [Universidad de Zaragoza](#) y [ESCIENCIA](#). Este año la Noche de los Investigadores amplió sus ubicaciones y se realizaron actividades en el CaixaForum Zaragoza, Etopia y Centro Cívico Torrero.

En el 2017 el ISQCH participó en las siguientes actividades:

- Concurso de la APP para móviles #HiScoreScience (18:00h- Etopia)
- Stand del ISQCH con los demostradores de experimentos de nuestros investigadores (16:00h-19:30h -CaixaForum)
- Monólogos científicos con humor a cargo de grupo RISArchers donde participó Ramón Macías (20:00h a 21:00h- CaixaForum).



Divulgación Innovadora “También para todos los públicos”

El 10 de junio se celebró en el [Etopia Centro de Arte y Tecnología](#) en Zaragoza el encuentro temático D+i También para Otros Públicos que contó con el apoyo especial de ISQCH entre otros. Durante la Jornada las estudiantes Amina, Imane y su profesora Isabel del Colegio Santa Emerenciana (Teruel) ganadoras de la mención especial del jurado en el III Concurso de Cristalización en la Escuela presentaron el proyecto y su experiencia al resto de público.



Este año, D+i propone reflexionar y conocer cómo podemos llegar a esos otros públicos que tantas veces se quedan fuera del radio de acción de la divulgación de la ciencia: desde personas con discapacidad a habitantes del medio rural o población desfavorecida.

La jornada está organizada por la **Fundación Zaragoza Ciudad del Conocimiento**, en colaboración con el Ayuntamiento de la ciudad.



Semana de inmersión en ciencias

El ISQCH participó un año más en la Semana de Inmersión en Ciencias organizada por la Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza. La actividad está dirigida a los alumnos de 4º de ESO y 1º de Bachillerato y, en esta edición, tuvo lugar entre los días 12 y 16 de junio de 2017. La actividad tiene como objetivo ofrecer a los estudiantes la posibilidad de conocer directamente el trabajo que los científicos desarrollan en el día a día.

Este año la semana de inmersión recibió 389 de las distintas provincias (79% de Zaragoza, 17% de Huesca y 4% de Teruel) siendo seleccionados 114 estudiantes que se distribuyen en cinco secciones: 12 en Biotecnología, 12 en Geología, 20 en Matemáticas, 30 en Físicas y Óptica y 40 en Químicas.



ERA Career Day

El Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA) participó en el ERA Career Day, “Oportunidades profesionales en la carrera investigadora del siglo XXI”, que tuvo lugar el 23 y 24 de noviembre en el Edificio Betancourt del Campus Río Ebro de la Universidad de Zaragoza.

Se trata de unas jornadas de información universitaria sobre investigación científica dirigida a jóvenes investigadores (doctorandos) y estudiantes de Ciencias de último año en las que profesionales del sector pretenden mostrarles las posibilidades de la carrera profesional de investigador a través de su experiencia y la perspectiva que tienen desde dentro del campo. Esta iniciativa persigue el objetivo de aumentar la empleabilidad de los investigadores y mejorar su planificación en el desarrollo de su carrera profesional.



La subdirectora del ISQCH y profesora de investigación Concepción Gimeno participó el jueves 23 a las 12:45 horas en una mesa redonda sobre Mujeres y Ciencia. El pasado julio, la Unión Internacional para la Química Pura y Aplicada (IUPAC) distinguió a Gimeno, que trabaja en el grupo de investigación de Química de Oro y Plata del ISQCH, como una de las 12 mejores químicas del mundo.

Más información: <https://goo.gl/79HPWH>



II Semana de la Ciencia del Valle de Benasque

La Asociación [Benasque ConCiencia](#), el Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH) y el Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA), ambos centros mixtos entre el CSIC y la Universidad de Zaragoza organizaron la II Semana de la Ciencia del Valle de Benasque, que tuvo lugar del 13 al 19 de noviembre en el Centro de Ciencias de Benasque Pedro Pascual (Benasque Centro de Ciencias).

El programa, que trata de llevar la ciencia a los habitantes y visitantes del Valle de Benasque, incluía conferencias divulgativas impartidas por investigadores de alto nivel, realización de experimentos, concursos científicos, exposiciones y un viaje al Laboratorio Subterráneo de Canfranc.

Más información: <https://goo.gl/G4MAUN>

**II Semana de la Ciencia
Valle de Benasque**

Organiza:
ASOCIACIÓN BENASQUE CONCIENCIA
INSTITUTO DE CIENCIA DE MATERIALES DE ARAGÓN
INSTITUTO DE SÍNTESIS QUÍMICA Y CATALISIS HOMOGÉNEA

Lunes 13:
18:30 Inauguración de la II Semana de la Ciencia
19:00 Conferencia: Luz para cuando no hay luz: Luminiscencia, Dr. Mariano Laguna Castrillo, ISQCH.

Martes 14:
19:00 Conferencia: 007, Jodi, Mr. Spock y el LASER, Dr. Xermán de la Fuente Leis, ICMA.

Miércoles 15:
19:00 Conferencia: Iluminando la química, Dr. Pablo J. Sans Miguel, Universidad de Zaragoza.

Jueves 16:
19:30 Conferencia: La influencia de la luz en la alimentación, Dr. Pere Castell, Licenciado en Ciencias Químicas, Coordinador de la UERCC de la Universidad de Barcelona.

Viernes 17:
Viaje a Canfranc: visita al laboratorio subterráneo de Canfranc (LSC), donde se investiga sobre materia oscura.
19:00: Entrega de premios.
19:30 Conferencia: Los colores del planeta Tierra, Dr. Álvaro González Gómez, Universidad de Zaragoza.

Sábado 18:
19:00 Conferencia: Nanotecnología y su aplicación en la medicina, Eduardo García Rico, Dr. en Medicina, Oncólogo.
20:00 Clausura y aperitivo.

Centro de Ciencias de Benasque Pedro Pascual
Del 13 al 18 de noviembre de 2017

benasqueconciencia@gmail.com http://benasqueconciencia.blogspot.com.es

Logos of participating institutions: CSIC, ICMA, ISQCH, Universidad de Zaragoza, etc.

Jornadas de Puertas Abiertas de la Universidad de Zaragoza



El ISQCH participa en esta actividad organizada por la Universidad de Zaragoza que pretende facilitar a los estudiantes de 4º de la E.S.O., 1º y 2º curso de Bachillerato un conocimiento directo sobre el trabajo que se realiza en la Facultad de Ciencias y en los institutos que en ella trabajan.

Celebración del Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia

El día 11 de febrero fue proclamado en 2015 Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia por la Asamblea General de las Naciones Unidas. El propósito es lograr el acceso, la plena participación y el empoderamiento de las mujeres y las niñas en la ciencia y visibilizar el trabajo de las científicas, así como fomentar la vocación investigadora en las niñas a través de la creación de roles femeninos.

El ISQCH colabora en la jornada organizada por la Facultad de Ciencias que tuvo lugar el pasado viernes 10 de febrero de 2017 con las sesiones de mañanas abierta a alumnos de 3ª a 6º de Primaria y con una sesión de tardes de 16 a 19 horas abierta a familias en la que se explicará la importancia de la cristalización.



Jornadas de Puertas Abiertas ISQCH



El ISQCH ofrece la posibilidad a los centros de educación y asociaciones de visitar nuestras instalaciones.

En 2017 nos visitaron estudiantes de IES Ramón Pignatelli y del Lycée Francais Molière.

Quimiaragón – Foro de intercambio de experiencias entre científicos y empresas en el sector de la industria química aragonesa

El Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH), la Federación de Empresas Químicas y del Plástico de Aragón (FEQPA) y la Confederación de Empresarios de Aragón (CEOE Aragón), celebró el 7 de noviembre, Quimiaragón 2017, Foro de Química de Aragón.



Un encuentro que nace como foro de intercambio de experiencias entre el ámbito científico y el empresarial del sector de la industria química aragonesa. Este foro, que parte de la iniciativa del ISQCH busca tender puentes y crear sinergias para estimular la creación de colaboraciones que puedan incentivar y agilizar la innovación en el sector de la industria química aragonesa.

Quimiaragón 2017 ha contado con la participación de más de 60 personas donde investigadores y empresarios han presentado sus experiencias de colaboración, han puesto en valor el papel de los interlocutores y agentes de apoyo a la cooperación entre empresa y academia y han analizado varios casos de éxito surgidos de este tipo de experiencias, como los de Industrias Químicas del Ebro, Implaser o ROLABO.

Ponentes

Fernando José Lahoz Díaz - ISQCH (CSIC - UZ)

Título: "El ISQCH: un instituto de investigación en Química abierto a la empresa"

Mariano Laguna Castrillo - ISQCH (CSIC - UZ)

Título: "Química circular, Investigación circular"

José María Casas del Pozo - ISQCH (CSIC - UZ)

Título: " Retardantes de llama en espumas aislantes para usos diversos"

Ángel Millán Escolano - ICMA (CSIC- UZ)

Título: "Mi experiencia personal dentro del ámbito de las emulsiones fotográficas, frigoríficos y amoníaco, tintas cerámicas y nanotecnología"

Vicente Luis Cebolla Burillo - ICB (CSIC)

Título: "Fluorescencia generada por interacciones débiles: un viaje desde la investigación básica a la aplicación industrial"

José María Fraile - ISQCH (CSIC - UZ)

Título: "De lo simple a lo complicado. La Química entre Empresa y Academia"

Luis Alberto Alonso - INBIOTIC Esmedagro

Título: "El papel de las Consultoras en el establecimiento del puente empresa-investigador"

Raquel Rodríguez, Directora OTRI, Universidad de Zaragoza

Título: "Las Oficinas de Transferencias (OTRI) como activadoras de la colaboración científico-empresa"

Jorge Pérez, Responsable I+D, Industrias Químicas Del Ebro, S.A.

Título: "Avances en nuestra empresa fruto de la colaboración: problemas y oportunidades".

Piedraescrita Gallardo, Responsable I+D, IMPLASER 99 S.L.L.

Título: "En IMPLASER avanzamos juntos"

Premios y distinciones

M^a Concepción Gimeno nombrada entre las 12 mejores químicas del mundo.



M^a. Concepción Gimeno, investigadora del Instituto de investigación del ISQCH ha sido premiada con el reconocimiento “Mujer Distinguida en Química” en su convocatoria de 2017 por la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC). Cada dos años esta asociación, de envergadura mundial, que aglutina la mayoría de asociaciones científicas, empresas y centros públicos y privados de investigación de todo el mundo en el ámbito de la Química, reconoce la excelencia, la trayectoria y el liderazgo de 12 mujeres. En la presente edición, la profesora Gimeno, comparte premio con dos americanas, dos chinas y una representante de Japón, Alemania, Rusia, Brasil, Suiza, Puerto Rico y Australia.

La ceremonia de entrega de premios tuvo lugar el pasado domingo 9 de julio en el marco del Congreso mundial de Química en Sao Paulo (Brasil), haciéndolo coincidir con un simposio especial sobre el papel de la Mujer en el desarrollo de la Química. Sin duda todas las premiadas representan la punta de un iceberg que trabaja para acelerar la paridad de género en todos los aspectos de la vida.

M^a Concepción Gimeno nombrada entre las 12 mejores químicas del mundo – homenajeada por la Asociación Los sitios

El acto de homenaje a las heroínas de los Sitios de Zaragoza que se celebró en las fiestas del Pilar organizado por la Asociación Cultural los Sitios y la de Voluntarios de Aragón, también homenajeó a Concepción Gimeno que recogió el premio de manos de Gonzalo Aguado, presidente de la Asociación Los Sitios.



Premios Tercer Milenio: [El ISQCH gana en la categoría de “Investigación y Futuro” y queda finalista en “Divulgación en Aragón”](#)



Heraldo de Aragón, a través de los premios Tercer Milenio reconoce la labor de personas, centros y grupos de investigación, instituciones y empresas de Aragón en tres ejes principales, divulgación, investigación e innovación. En esta tercera edición el ISQCH resultó ganador en la categoría “Investigación y Futuro” y quedó finalista en la categoría “Divulgación en Aragón” con su proyecto de divulgación Hi Score Science.



El Premio Tercer Milenio reconoció al **grupo de Química de Oro y Plata E77** en la categoría **Investigación y Futuro** por el proyecto **“Compuestos de oro en fotofísica”**. Este proyecto se basa en la química de oro, fundamentalmente en la síntesis de nuevos derivados con estructuras novedosas y, en particular, de nuevos complejos de oro y del grupo 11 en general (cobre, plata y oro) con interesantes propiedades ópticas, biológicas o catalíticas. Destacan las propiedades biológicas encontradas con los compuestos estudiados.

M^a Concepción Gimeno finalista a los Premios ADEA a Directivos 2017 en la categoría de Premio a la Innovación

Los premios ADEA, de la Asociación de Directivos de Aragón premian la labor que desempeñan a los responsables de empresas y entidades radicadas en Aragón se celebró el pasado noviembre en el Palacio de Congresos de Zaragoza.

M^a Concepción Gimeno candidata a los Premios Aragoneses del Año categoría de Ciencia e Investigación

Los candidatos en la 24^a edición de los premios aragoneses del año de El Periódico de Aragón en la categoría de Ciencia e Investigación fueron Concepción Gimeno, profesora del CSIC e investigadora del ISQCH, el premio nacional de física Conrado Rillo, investigador del ICMA; Libelium, multinacional aragonesa que diseña y fabrica hardware, y Elena García Martín, oftalmóloga y premio Aragón Investiga 2016 resultando ganadora la empresa Libelium.

La actividad divulgativa del juego Hi Score Science recibe el premio Ciencia en Acción



El juego sobre ciencia para dispositivos móviles iOS y Android, **Hi Score Science**, ha sido galardonado con el **primer premio en el XVIII programa de Ciencia en Acción** en la modalidad **“Materiales Didácticos de Ciencias en Soporte Interactivo” (Premio IBM)**. Este programa pretende acercar la ciencia y la tecnología, en sus diferentes aspectos, al gran público. El programa Ciencia en Acción que este año celebraba su XVIII

edición trata de reconocer el trabajo de grupos escolares y profesores de todos los niveles educativos, investigadores, divulgadores científicos, así como de cualquier persona interesada en la enseñanza de la ciencia, en cualquiera de sus disciplinas, de **España, Portugal y latinoamérica**. El jurado de Ciencia en Acción en esta ocasión ha premiado a la app Hi Score Science “por ser un material muy interesante y didáctico que permite a través de un juego de preguntas y respuestas de contenido científico, complementado con información adicional rigurosa y más detallada sobre las temáticas tratadas, aprender y ampliar sobre diferentes conceptos científicos de forma divertida y amena”.

Hi Score Science – Ciencia Para Todos’ recibe el sello D+i TOP

D+i TOP es una iniciativa lanzada por la Fundación Zaragoza Ciudad del Conocimiento, en colaboración con Ibercaja Obra Social y la empresa Rafer. En esta primera edición, de la convocatoria Divulgación Innovadora También Para Otros Públicos, D+i TOP, se han presentado 90 proyectos procedentes de toda España, y que reconocen la divulgación científica inclusiva, accesible a todos los ciudadanos y orientada a la integración social.



El proyecto premiado busca ampliar el ámbito de aplicación del mismo para llegar al público más desfavorecido que habitualmente se queda fuera de las actividades de divulgación. En concreto, el público objetivo al que se trata de llegar es: pacientes jóvenes ingresados en hospitales, con los que se va a realizar un proyecto piloto, estudiantes adolescentes habitantes del mundo rural y adultos, un colectivo que suele estar alejado de los canales habituales de divulgación, principalmente de todos aquellos que permiten participar de manera activa y no como meros observadores.

La divulgación y difusión del ISQCH y del ICMA reconocida como Unidad de Cultura Científica y de la Innovación por la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología.

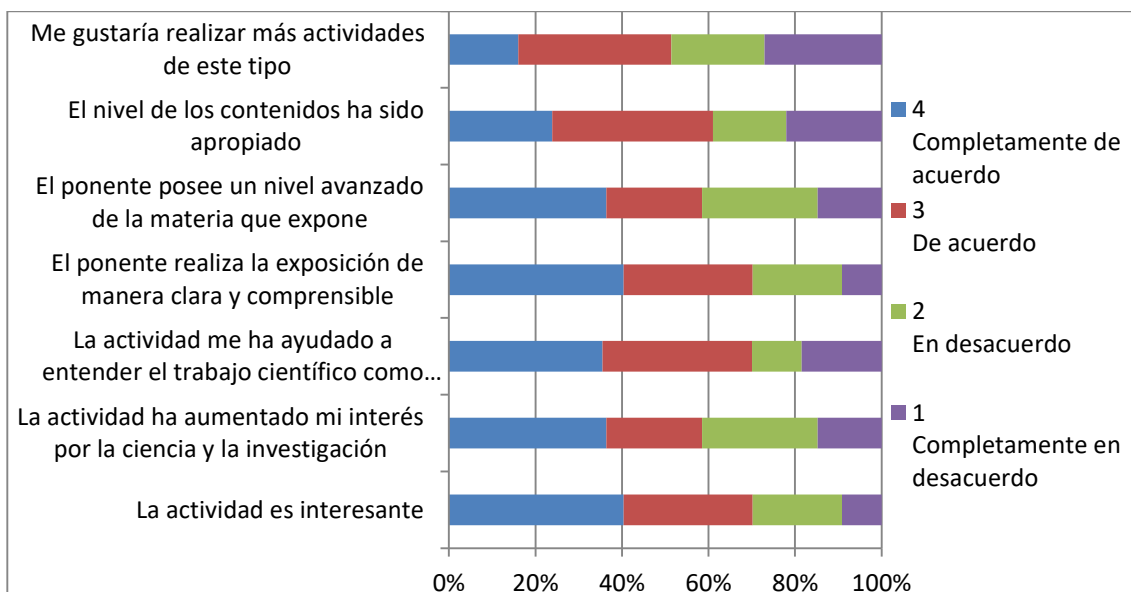


El departamento de divulgación y difusión del Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea, ISQCH y del Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón, ICMA, y el ha sido **reconocido como Unidad de Cultura Científica y de la Innovación (UCC+i) por parte de Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología (FECYT)** por su trabajo en el fomento de la cultura científica, tecnológica y de la innovación a través de diversas actividades.

Estudio y análisis de las actividades de divulgación organizadas por el Instituto

El ISQCH, es un Instituto referente en divulgación a nivel nacional. Para conseguir este nivel de calidad y ser capaces de adecuar las actividades de divulgación a las nuevas demandas de la sociedad, desde 2011, la Unidad de Cultura Científica del ISQCH evalúa, siguiendo el sistema de calidad, todas las actividades que organiza el Instituto.

Los resultados obtenidos muestran la satisfacción por las actividades realizadas tanto por los profesores como por los alumnos. Los alumnos consideran nuestras actividades interesantes, que aumentan su interés por la ciencia y la investigación, que les ha ayudado a entender el trabajo científico como una posible salida laboral y desearían hacer más actividades de este tipo. Además el 100% de los profesores encuestados considera que estas actividades aumentan el interés del alumnado por la ciencia y el trabajo científico, que los alumnos se encuentran motivados durante el desarrollo de la actividad y que las recomendaría a otros profesores.



7.2. ACTIVIDADES DE DIFUSIÓN DEL ISQCH

El ISQCH difunde todas las actividades de investigación y divulgación que desarrolla. En 2017 ha contado con 600 aparaciones en prensa nacional y regional y ha colaborado de manera periódica con diversos suplementos y publicaciones tecnológicas.

Además el ISQCH dispone de una página web (<http://www.isqch.unizar-csic.es/ISQCHportal/>), página en Facebook (<https://www.facebook.com/ISQCHdivulga>), twitter (https://twitter.com/ISQCH_Divulga) y el blog “Moléculas a reacción” (<https://isqch.wordpress.com/>), en las que se publican las principales noticias del Instituto incluyendo publicaciones más importantes, hitos, logros, conferencias, charlas, cursos, oferta divulgativa, formativa y laboral etc.

Blog de divulgación científica: Moléculas a reacción

El ISQCH dispone de un blog de divulgación científica llamado “moléculas a reacción” (<https://isqch.wordpress.com/page/2/>) en que investigadores del Instituto hablan de modo simple y claramente entendible de temas científicos de interés, que aparecen en los medios o que sugieren alguno de los seguidores del blog.

El blog comenzó su funcionamiento en 2012 y desde entonces ha parado de crecer el número de visitas, teniendo el año pasado un total de **153.519 visitas** en todo el mundo.

En 2017 hubo 3 entradas:

- 1.- [Calor y Temperatura \(V\). La calefacción por microondas](#) (11/01/2017)
- 2.- [Adopta una molécula: oxaliplatino](#) (27/01/2017)
- 3.- [Nobel de Química de 2017: Criomicroscopia electrónica](#) (15/10/2017)



Apariciones en radio y televisión:

QUIMARAGÓN 2017

Un foro para acercar investigación e industria

Más de medio centenar de personas participaron en la jornada

Se pretende que científicos y empresarios aúnen esfuerzos



El Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISOQCH) de la Universidad de Zaragoza, en colaboración con el Consorcio Aragonés de Innovación Tecnológica (CAIT) y el Consorcio Sectorial de Investigación Científica (CSIC) de la Universidad de Zaragoza, celebró el día 27 de noviembre de 2017, un foro de encuentro entre investigadores y empresarios en el ámbito de la síntesis química homogénea y catálisis.

El foro se celebró en el aula magna del edificio de la Facultad de Ciencias Exactas e Ingeniería de la Universidad de Zaragoza, con la participación de más de 50 personas, entre ellas representantes de la industria química y de la investigación científica.

El foro se centró en el intercambio de experiencias y conocimientos entre investigadores y empresarios, así como en la identificación de oportunidades de colaboración y financiación.

El foro se abrió con una presentación por parte del director del ISOQCH, el profesor Dr. Pedro Cerbuna, quien destacó la importancia de la colaboración entre la investigación y la industria para el desarrollo de nuevas tecnologías y productos.

El foro contó con la participación de expertos en el campo de la síntesis química homogénea y catálisis, así como de representantes de la industria química.

El foro se cerró con una sesión de preguntas y respuestas, en la que se abordaron algunas de las cuestiones más relevantes planteadas por los asistentes.

El foro se celebró en el aula magna del edificio de la Facultad de Ciencias Exactas e Ingeniería de la Universidad de Zaragoza, con la participación de más de 50 personas, entre ellas representantes de la industria química y de la investigación científica.

El foro se centró en el intercambio de experiencias y conocimientos entre investigadores y empresarios, así como en la identificación de oportunidades de colaboración y financiación.

El foro se abrió con una presentación por parte del director del ISOQCH, el profesor Dr. Pedro Cerbuna, quien destacó la importancia de la colaboración entre la investigación y la industria para el desarrollo de nuevas tecnologías y productos.

El foro contó con la participación de expertos en el campo de la síntesis química homogénea y catálisis, así como de representantes de la industria química.

El foro se cerró con una sesión de preguntas y respuestas, en la que se abordaron algunas de las cuestiones más relevantes planteadas por los asistentes.

SECCIONES

El evento desea focalizarse en la química pero no de una forma exclusiva

Jorge Valencia, responsable del Laboratorio de Enzimas, DQPI, y del Plan de Aragón Agrario, destacó la importancia de la química en el desarrollo de nuevas tecnologías y productos.

El evento desea focalizarse en la química pero no de una forma exclusiva, sino que también se abren espacios para otras disciplinas relacionadas con la química, como la biología, la física o la ingeniería.

El evento se celebró en un ambiente de colaboración y diálogo, en el que se abordaron algunas de las cuestiones más relevantes planteadas por los asistentes.

RETO QUÍMICO > ¿QUÉ ALIVIO DE MOLECULAR!

La última edición de esta serie de retos químicos, donde los lectores de esta revista se enfrentan a un reto químico, se celebró el día 27 de noviembre de 2017. El reto consistió en la síntesis de un compuesto orgánico a partir de reactivos sencillos.

H

Li

Be

Sc

Y

Zr

Cs

Hf



Una exposición acerca la ciencia a los jóvenes de Teruel

'Cristales: un mundo por descubrir', estará en Teruel hasta el próximo 26 de enero

El Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISOQCH) de la Universidad de Zaragoza, en colaboración con el Consorcio Aragonés de Innovación Tecnológica (CAIT) y el Consorcio Sectorial de Investigación Científica (CSIC) de la Universidad de Zaragoza, celebró el día 27 de noviembre de 2017, un foro de encuentro entre investigadores y empresarios en el ámbito de la síntesis química homogénea y catálisis.

El foro se celebró en el aula magna del edificio de la Facultad de Ciencias Exactas e Ingeniería de la Universidad de Zaragoza, con la participación de más de 50 personas, entre ellas representantes de la industria química y de la investigación científica.

El foro se centró en el intercambio de experiencias y conocimientos entre investigadores y empresarios, así como en la identificación de oportunidades de colaboración y financiación.

El foro se abrió con una presentación por parte del director del ISOQCH, el profesor Dr. Pedro Cerbuna, quien destacó la importancia de la colaboración entre la investigación y la industria para el desarrollo de nuevas tecnologías y productos.

El foro contó con la participación de expertos en el campo de la síntesis química homogénea y catálisis, así como de representantes de la industria química.

El foro se cerró con una sesión de preguntas y respuestas, en la que se abordaron algunas de las cuestiones más relevantes planteadas por los asistentes.

El reto consistió en la síntesis de un compuesto orgánico a partir de reactivos sencillos. El reto fue resuelto por un equipo de investigadores del ISOQCH.

El reto se celebró en un ambiente de colaboración y diálogo, en el que se abordaron algunas de las cuestiones más relevantes planteadas por los asistentes.

El reto se cerró con una sesión de preguntas y respuestas, en la que se abordaron algunas de las cuestiones más relevantes planteadas por los asistentes.

Ana Artázcoz promueve la resiliencia en Huesca

El reto consistió en la síntesis de un compuesto orgánico a partir de reactivos sencillos. El reto fue resuelto por un equipo de investigadores del ISOQCH.

El reto se celebró en un ambiente de colaboración y diálogo, en el que se abordaron algunas de las cuestiones más relevantes planteadas por los asistentes.

El reto se cerró con una sesión de preguntas y respuestas, en la que se abordaron algunas de las cuestiones más relevantes planteadas por los asistentes.

'Cristales, un mundo por descubrir', en el Espacio 0.42 del Planetario

La exposición, fruto del IV Concurso de Cristalización en la Escuela, se puede visitar en la capital altoaragonesa hasta el próximo 10 de diciembre



Algunos de los cristales que se pueden ver en el Espacio 0.42

Esta exposición recoge una selección de los trabajos más destacados preparados en los laboratorios de distintos centros educativos aragoneses por alumnos de secundaria durante el desarrollo del IV Concurso de Cristalización en la Escuela, que tuvo lugar en el pasado curso académico 2016-2017. Esta

exposición se complementa con un vídeo de experimentos cristales realizados (preparados) con el apoyo de padres educadores que incluye de la geometría y el estudio de los cristales en su estructura cristalina y sus propiedades físicas y químicas. El vídeo se proyectará en el Espacio 0.42 hasta el próximo 10 de diciembre, cuando tendrá lugar la inauguración.



6 | ARAGÓN

La zaragozana que soñaba con ser Marie Curie

REPORTAJE

La aragonesa Concepción Gimeno, investigadora del CSIC y de la Universidad de Zaragoza, premiada como una de las 12 mejores químicas del mundo.

La niña Concepción Gimeno soñaba con ser Marie Curie. Ahora, a los 54 años, esta investigadora zaragozana acaba de ser elegida como una de las mejores químicas del mundo por la Unión de Química Pura y Aplicada. Cada dos años, esta asociación reconoce a 12 mujeres destacadas en este sector, y la científica del Instituto de Investigación de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (centro mixto de la Universidad de Zaragoza y el CSIC) ha sido una de las elegidas. Recibirá el premio en verano, en el Congreso mundial de Química en Sao Paulo, junto a dos científicas americanas, dos chinas, una japonesa, una alemana, una rusa, una brasileña, una sudafricana, una portorriqueña y una australiana.

«Desde pequeña me encantaba investigar, descubrir, inventar, hacer cosas nuevas que pudieran ayudar a otros», recuerda Concepción. En su familia no habla otros químicos: su padre trabajaba en una fábrica y su madre, en casa. Ella estudió Química en la Universidad de Zaragoza (UZ) y después siguió formándose en universidades de Reino Unido y Alemania. En 1989 volvió al campus de la plaza de San Francisco.

Concepción Gimeno investiga, da clases y dirige tesis. Es experta en el estudio de nuevos compuestos a partir de metales nobles como el oro o la plata. De su laboratorio han salido nuevos materiales con propiedades ópticas muy especiales, como dispositivos LED. También está ensayando con compuestos de oro como agentes antitumorales, que



Gimeno, fotografiada en la Universidad de Zaragoza.

sirven como transportadores de fármacos de modo selectivo hacia las células cancerígenas. «Me gustaría descubrir un compuesto que curase el cáncer sin efectos secundarios», asegura esta admiradora de Marie Curie. «Es un referente para cualquier científico, sea hombre o mujer. Fue la primera persona que recibió dos premios Nobel en distintas especialidades (Física y Química). Pero es una pena que cuando preguntamos por mujeres científicas sea prácticamente la única conocida», reflexiona Concepción, que reivindica la visibilización de la mujer en la ciencia.

En el grado de Química de la UZ hay ahora más alumnas que alumnos: 322 mujeres y 290 hombres. En las universidades españolas ya se doctoran tantas mujeres como hombres pero, conforme avanza la carrera académica,

disminuye la presencia femenina.

Recientemente se celebró el Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia (11 de febrero) para visibilizar a las mujeres científicas. Y Concepción coincide en que queda mucho por hacer. «A partir del doctorado, muchas científicas no continúan su carrera. Encuentran muchos obstáculos y es una lástima. Hay que apoyar más a las mujeres», afirma Concepción, que no tiene hijos «por decisión personal».

Un día normal, esta química pasa su jornada en la Universidad, de 9:00 a 21:00. «La ciencia es complicada, pero apasionante», dice. Y cuando no está en el laboratorio, puede estar leyendo (ahora, a Dolores Redondo), en el cine o en un viaje (el último, a Groenlandia).

P. FIGOLS

ciencia y tecnología

Una trayectoria de 'oro' impulsada desde Aragón

FECHA DE NACIMIENTO: 11 DE FEBRERO. ACTIVIDAD: PROFESORA DE UZ. INVESTIGADORA DEL INSTITUTO DE INVESTIGACIONES DE SÍNTESIS QUÍMICA Y CATALISIS HOMOGÉNEA (CSIC) Y UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA. PREMIO: UNO DE LAS 12 MEJORES QUÍMICAS DEL MUNDO.

La investigadora aragonesa Concepción Gimeno es una de las 12 mejores químicas del mundo por la Unión de Química Pura y Aplicada. Cada dos años, esta asociación reconoce a 12 mujeres destacadas en este sector, y la científica del Instituto de Investigación de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (centro mixto de la Universidad de Zaragoza y el CSIC) ha sido una de las elegidas. Recibirá el premio en verano, en el Congreso mundial de Química en Sao Paulo, junto a dos científicas americanas, dos chinas, una japonesa, una alemana, una rusa, una brasileña, una sudafricana, una portorriqueña y una australiana.



Gimeno es experta en el estudio de nuevos compuestos con metales como el oro o la plata.

Gimeno es experta en el estudio de nuevos compuestos con metales como el oro o la plata.

Concepción Gimeno es una de las 12 mejores químicas del mundo por la Unión de Química Pura y Aplicada. Cada dos años, esta asociación reconoce a 12 mujeres destacadas en este sector, y la científica del Instituto de Investigación de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (centro mixto de la Universidad de Zaragoza y el CSIC) ha sido una de las elegidas. Recibirá el premio en verano, en el Congreso mundial de Química en Sao Paulo, junto a dos científicas americanas, dos chinas, una japonesa, una alemana, una rusa, una brasileña, una sudafricana, una portorriqueña y una australiana.

TERCERA EDICIÓN

PREMIOS TERCER MILENIO > DIVULGADORES, INVESTIGADORES E INNOVADORES DE PRIMERA FILA

DIVULGACIÓN



INVESTIGACIÓN EN ARAGÓN

Niños y niñas de colegios de primaria de Zaragoza capital y del medio rural aragonés han conocido de la mano de las propias ingenieras que esta profesión puede ser una opción de futuro para ellos. María Villarroya, presidenta de Amicit-Aragón, recibió el premio Tercer Milenio a la Divulgación en Aragón. La Asociación de Mujeres Investigadoras y Tecnólogas lleva más de diez años trabajando por acercar la ciencia y la tecnología a las mujeres. Obtuvieron acceso a la app Hi Score Science, del Icmi y el Isqch, y el proyecto 'Descubre la ciencia con el Centro Universitario de la Defensa de Zaragoza'.

Ciencia y Sociedad La Fundación Científica de la Asociación Española contra el Cáncer se hizo con este premio por su labor

acercando la investigación oncológica a los ciudadanos. Los accesits fueron para los institutos de Nanociencia de Aragón Laboratorio de Microscopios Avanzados y de Bloque Computación y Física de Sistemas Complejos.



JÓVEN TALENTO INNOVADOR

La ganadora en esta categoría fue Rosa María Monte Prieto, investigadora en el Instituto Universitario de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A), y cofundadora y responsable de I-D en Beonchip. Obtuvieron accesit Scott G. Mitchell, investigador Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (centro mixto CSIC-Universidad de Zaragoza), y Antonio Agudo Martínez, del Instituto de Biotética e Informática Industrial (CSIC-Universidad Politécnica de Cataluña).

INVESTIGACIÓN

TRANSFERENCIA DE CONOCIMIENTO

UNIVERSIDAD-EMPRESA La candidatura ganadora fue Hello para todos hello 'verde', presentada por el grupo multidisciplinar Hello, con investigadores del Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón y el Instituto de Nanociencia de Aragón. Lograron accesit dos candidaturas del IMA: la del Grupo de Procesos Termoquímicos y la de M2BE (Multiscale in Mechanical and Biological Engineering).

INVESTIGACIÓN Y FUTURO Investigar las aplicaciones de Compuestos de Oro en Fotofísica es el objetivo del proyecto ganador. Su investigadora responsable es M.ª Concepción Gimeno Floría, del Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea, y recogió el premio el profesor emérito Antonio Laguna.

Los accesits fueron para los proyectos T-REX, que desarrolla cámaras para la búsqueda de astropartículas y el proyecto europeo Life-BioWind, que integra energías renovables en las actividades agropecuarias.

El mundo de la investigación, la innovación y la divulgación hechas en Aragón se reunió el pasado jueves en el Paraninfo en torno al acto de entrega de la tercera edición de los Premios Tercer Milenio. Ganadores y accesits recibieron el aprecio social a su labor



Foto de familia con ganadores y accesits. MARCELO QUINONES



Los monologuitas de Researchers armenizaron la velada. En la imagen, Jesús Santamaría.



Un animado cóctel siguió a la ceremonia de entrega de premios.

INNOVACIÓN



INNOVACIÓN TECNOLÓGICA

La impresión 3D protagonizó esta categoría de los Premios Tercer Milenio. Las impresoras 3D para la joven empresa Dynamical Tools se alzaron con el premio Innovación Tecnológica. Los accesits correspondieron a las innovaciones y tratamientos personalizados impresos en 3D presentados por Visumex, filial de biotecnología de Prodoctivos, y a la innovación tecnológica en herramientas y procedimientos médicos en tele-rehabilitación, e-health y m-Health (salud en soporte móvil), presentada por Exovite.

INNOVACIÓN EMERGENTE Una 'spin-off' de la Universidad de Zaragoza, Epic Power, es el Premio Innovación Emergente 2017. Se dedica a diseñar, producir y vender soluciones de almacenamiento de energía para la mejora de la eficiencia energética de los ascensores.

Uno de los accesits fue a parar a otra 'spin-off', en este caso nacida del grupo de investigación

GEMM-EIA de la Universidad de la Zaragoza. Se trata de Beonchip, que se dedica a la creación de dispositivos microfluidicos para cultivo celular en ambiente biomimético. El otro accesit correspondió a Soluciones Luminiscentes S.L., que proponen una señalización vial eficiente basada en áridos ultraluminiscentes.

TERCER MILENIO



La gala de Tercer Milenio siempre es una ocasión de encuentro.

En este link se puede descargar una tabla con todas las apariciones en medios de comunicación de miembros del ISQCH, 603 entradas en 2017, dónde se detalla el título de la intervención, la fecha, el medio de publicación y la URL dónde pueden reproducirse:

[ISQCH Medios de Comunicación 2017](#)