

**I.1.2. Acuerdo 2/Pleno 280 de 20-06-16 por el que se aprueba la creación del Instituto de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas.**

**Memoria para la constitución del  
Instituto de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas  
(INSTITUTE FOR ADVANCED RESEARCH IN CHEMICAL SCIENCES)**

**IAdChem**  
de la Universidad Autónoma de Madrid

**ÍNDICE:**

I. Introducción:

1.1 Presentación

1.2 La investigación en Química en la UAM

2 Objetivos del Instituto

3 Principales líneas de investigación del Instituto.

Anexo I: Propuesta de Reglamento de Régimen Interno

Anexo II: Conformidad de los Profesores de la Facultad de Ciencias para crear el instituto

## I. Introducción

### 1.1 Presentación

La creación del Instituto parte de la iniciativa de un grupo de profesores de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid pertenecientes a diversas áreas de la Química, con el objetivo de integrar esfuerzos para la consolidación de una investigación de excelencia en Química en la Universidad. Se trata de una estructura creada en el seno de la UAM, en el marco del artículo 17 de los Estatutos de la Universidad Autónoma de Madrid, con naturaleza de **Centro propio de investigación** que, a diferencia de los institutos universitarios, carece de competencias para organizar e impartir programas de doctorado ni posgrado.

Además del núcleo mayoritario de profesores pertenecientes al Departamento de Química Orgánica, el Instituto de Investigación Avanzada en Química también aglutinaría a profesores de los Departamentos de Química, Química Inorgánica y Química Analítica. Todos los miembros constituyentes tienen en común la probada excelencia investigadora, además de existir colaboraciones previas entre ellos. Se pretende potenciar la investigación en líneas punteras, en la frontera de la Química, aunando esfuerzos, potenciando las colaboraciones y definiendo la estrategia de futuro de la investigación en Química en nuestra Universidad. Además de la búsqueda de mayores niveles de excelencia en la investigación en química, la consecución de estos objetivos redundaría en una mejora de la calidad de la docencia impartida en la Facultad de Ciencias, especialmente en lo referente a los programas de posgrado.

### 1.2 La investigación en Química en la UAM

La investigación en Química en nuestra Universidad se encuentra estructurada básicamente en torno a grupos de investigación bien establecidos y de tamaño bastante heterogéneo. Sin embargo, en las circunstancias actuales de alta competitividad, especialmente en las líneas prioritarias de la Química, resulta de gran interés la potenciación de la colaboración entre diferentes grupos especializados con objeto de aunar esfuerzos y acometer proyectos en la frontera del conocimiento con mayor componente interdisciplinar, lo que debería también redundar en una mejora de la transferencia de los resultados e impacto social. Este refuerzo del tamaño de las unidades de investigación debería facilitar igualmente el acceso a nuevos recursos.

En la UAM existen grupos de investigación de consolidada trayectoria y prestigio en tres dimensiones complementarias del conocimiento integral en química: a) el desarrollo de proyectos con orientación mayoritaria de tipo experimental y sintético, b) proyectos en el área de la química computacional y cálculos teóricos, y c) proyectos orientados a la síntesis de compuestos innovadores de gran interés e impacto en ciencia de materiales. En líneas generales, el ámbito de investigación de los grupos promotores de esta iniciativa se enmarca en las áreas de catálisis, química supramolecular y química de materiales moleculares, dedicándose tanto a aspectos de desarrollo experimental básico y aplicado como a aspectos teóricos. La potenciación de la colaboración sinérgica entre estos grupos permitiría acometer objetivos más ambiciosos que no serían fácilmente realizables desde una única óptica investigadora.

La investigación en Química Orgánica tiene un papel preponderante en la resolución de problemas que se plantean en la sociedad moderna, ya que la mayor parte de las sustancias químicas conocidas, entre ellas la práctica totalidad de los compuestos que forman parte de los

seres vivos, presentan carbono en su estructura (compuestos orgánicos). Los compuestos orgánicos exhiben un amplísimo repertorio de propiedades químicas, físicas y biológicas que les confieren un extraordinario interés en muy diversos campos de aplicación e impacto en la vida cotidiana (fármacos, plásticos, fibras textiles, combustibles, cosméticos, compuestos agroquímicos, nanomateriales, etc.). El Departamento de Química Orgánica está considerado como un centro de referencia dentro de la investigación en este área en España y se pretende seguir trabajando y progresando para alcanzar un nivel de excelencia comparable al de las mejores universidades europeas y americanas.

La calidad científica y la masa crítica de más de 40 profesores [ver Apéndice I] trabajando en el área de la Química Orgánica y áreas afines es muy destacable. Se pueden identificar varias líneas de investigación de primer nivel que se relacionan más abajo. Los miembros del departamento han disfrutado en los últimos años de más de treinta proyectos Europeos e Internacionales, entre los que cabe destacar la reciente concesión de tres proyectos ERC a investigadores jóvenes (un proyecto Consolidator y dos Starting Grants). Es de destacar asimismo el elevado número de Proyectos Nacionales dirigidos y en curso. Estos proyectos del máximo prestigio se han unido a los indicadores de la relevancia de la investigación en Química Orgánica en la Universidad Autónoma de Madrid. Asimismo varios miembros del Departamento han sido galardonados con la Medalla de Oro (Tomás Torres) y otros premios de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) que confirman esta calidad científica. Así, Juan Carlos Carretero posee el Premio de Investigación en Química Orgánica, y los José Alemán, Mariola Tortosa y Diego J. Cárdenas han sido galardonados en diferentes ediciones de los Premios a Investigadores Noveles de la RSEQ.

Por otra parte, la investigación de los profesores del Departamento de Química se centra en la modelización molecular tanto de la reactividad química como de procesos en la frontera entre la química y la física. Varios de los investigadores de este Departamento han sido pioneros en el campo del estudio de las dinámicas ultrarrápidas: procesos que ocurren en la escala de los femto o incluso attosegundo y que suponen el estudio conjunto de los movimientos electrónicos y nucleares. También han sido pioneros en el estudio de la interacción de moléculas con radiación sincrotron o interacciones con iones altamente cargados y acelerados, manteniendo una altísimo número de colaboraciones con los principales grupos experimentales europeos en este campo y de hecho investigadores del Departamento han coordinado ya dos acciones COST en esta temática en los últimos años. Además se aplica la modelización a otras áreas como la fotodinámica y la fototerapia, la modelización de clusters y nanoestructuras de carbono (fullerenos, nanotubos y grafeno), las interacciones de moléculas con superficies y sus implicaciones en nanotecnología contemplando aspectos como la creación de sistemas autoensamblados, la mejora de catalizadores o el diseño de dispositivos fotovoltaicos orgánicos, y el diseño de nuevos materiales moleculares aprovechando la modulación de propiedades intrínsecas a través de interacciones no-covalentes, en particular de los enlaces berilio, caracterizados por primera vez por investigadores de este Departamento. El impacto de la actividad investigadora en todos estos campos se refleja con claridad en el nivel y número de proyectos altamente competitivos que lidera el departamento de Química a nivel europeo, que incluyen un proyecto ERC, XChem focalizado en la dinámica de la reactividad química en la escala de attosegundos, un Master Erasmus Mundus, que fue recientemente renovado como Master Erasmus+, liderado por Manuel Yáñez y Otilia Mó, un proyecto ITN-EJD on Theoretical Chemistry, and Computational Modelling (TCCM) liderado por Manuel Yáñez, una Cost Action, XLIC, cuya temática es *XUV/X-ray light and fast ions for ultrafast chemistry*, liderada por Manuel

Alcamí. Además se mantiene proyectos con empresas en la modelización de nuevos materiales. Manuel Yáñez es Premio de Investigación Betancourt-Perronet que concede Francia, Premio de Investigación en Química Física de la Real Sociedad Española de Química, Académico de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales.

Asimismo, los profesores integrantes del Departamento de Química Inorgánica son referente internacional en las líneas de investigación que se describen más adelante, y que se enmarcan en la frontera de la Química Inorgánica con la ciencia de materiales y la nanociencia. Recientemente Félix Zamora ha sido galardonado con el Premio de Excelencia en Investigación BASF 2015 de la Real Sociedad Española de Química. Estos grupos han participado y/o desarrollan diversos proyectos internacionales en el marco de la EU y con otros países extracomunitarios. Además, estos grupos de investigación mantienen colaboración activa a través del desarrollo de diversos proyectos con empresas nacionales e internacionales. Algunos de sus desarrollos se han consolidado en la creación de una empresa spin-off de la UAM.

Por último, la investigación del grupo del Departamento de Química Analítica tiene carácter multidisciplinar y está encaminada al desarrollo, caracterización y aplicación de nuevos materiales con propiedades electrocatalíticas y ópticas; para el desarrollo de sensores y biosensores. En el desarrollo de estas investigaciones se han utilizado distintas técnicas electroquímicas, ópticas y de análisis de superficies. En la actualidad además de estas técnicas se están introduciendo técnicas combinadas como la espectroelectroquímica y espectroscopía Raman asociada a microscopía para caracterizar mejor las superficies transductoras diseñadas. Los dispositivos que se han ido desarrollando están enfocados a distintos campos, como electrocatálisis, diseño de células de combustible, baterías y determinación de biomarcadores en distintos modelos experimentales como análisis clínico y agroalimentario.

## 2 Objetivos del Instituto.

Los indicadores de calidad que hacen referencia a la investigación desarrollada actualmente son muy positivos, sin embargo es notoria la necesidad de articular herramientas para fomentar la colaboración entre grupos de investigación que permitan dinamizar la creación de nuevas líneas de trabajo. Por lo tanto, es patente la necesidad de crear mecanismos para impulsar la investigación en Química en la UAM, para consolidar el alto nivel alcanzado en la actualidad y aumentar su visibilidad internacional, así como la transferencia de resultados al sector productivo.

Con la creación del Instituto se pretende aumentar la competitividad de la investigación en diversas áreas de la Química, con el objetivo manifiesto de concurrir en las mejores condiciones a futuras convocatorias de excelencia, tanto nacionales como europeas, para la financiación de Centros de Excelencia. En este sentido cabe mencionar que se tiene la intención de concurrir a la próxima convocatoria de Unidades de Excelencia "María de Maetzu".

Los objetivos específicos del Instituto se indican a continuación:

- Aumentar la masa crítica de investigadores con un interés común en diferentes áreas de la Química con el factor común de trabajar en la frontera del conocimiento, aunando esfuerzos entre los diferentes grupos de modo que se pueda abordar conjuntamente proyectos ambiciosos.
- Promover la colaboración entre grupos de investigación.
- Estimular la creación de nuevas líneas de investigación
- Incentivar la excelencia investigadora en el área, con la intención explícita de concurrir a convocatorias competitivas nacionales e internacionales

- Aumentar la internalización de la investigación en el área y su visibilidad.
- Apoyar la transferencia de resultados de la investigación y promover las relaciones con el sector industrial y tecnológico.
- Promover una evaluación eficaz de los resultados mediante comités externos
- Contribuir a la divulgación Química en la sociedad

### 3 Líneas de investigación

A continuación se describen brevemente las líneas de investigación que se están desarrollando, junto con los investigadores responsables y la bibliografía más reciente y significativa.

#### **Nanociencia y Materiales Moleculares (Prof. Tomás Torres Cebada)**

El trabajo que se desarrolla en nuestro grupo de investigación se centra en la generación de conocimientos científicos que puedan contribuir al desarrollo de materiales moleculares basados en ftalocianinas (Pcs) y sus aplicaciones como fotosensibilizadores (PSs), principalmente para fotovoltaica molecular y terapia fotodinámica. La fotovoltaica molecular tiene un gran potencial en la producción de energía solar eficiente y de bajo coste. En este contexto, las Pcs, homólogos inferiores de las porfirinas, son moléculas adecuadas para su integración en fotovoltaica, debido a sus propiedades como captadores de luz en las regiones del visible y el infrarrojo cercano y a su robustez. Además, poseen sobresalientes propiedades electrónicas y ópticas, con múltiples aplicaciones en diferentes campos de la química y de la física. Nuestro objetivo, por tanto, es el diseño y preparación de nuevos materiales basados en Pcs y nanoestructuras de carbono (fullerenos endohedricos, nanotubos, grafeno) para su aplicación en fotovoltaica molecular, tanto en células solares todo-orgánicas (OPVs) como en células solares híbridas sensibilizadas por colorante (DSSCs). Por otra parte, la terapia fotodinámica (PDT) es un tratamiento prometedor para enfermedades oncológicas, cardiovasculares y dermatológicas. La PDT se basa en el concepto de que una molécula sensible a la luz, un PS, se acumula preferentemente en las células diana y, tras la subsiguiente irradiación con luz en el IR cercano, en presencia de oxígeno, induce efectos citotóxicos que llevan a la destrucción de dichas células. Entre las especies citotóxicas el oxígeno singlete es la más importante. Las Pcs, son una de las familias más prometedoras para la tercera generación de PSs de carácter porfirinoide, con fluorescencia intrínseca. Uno de nuestros objetivos es el uso de las Pcs para el tratamiento de enfermedades arterioescleróticas de las arterias coronarias (ACD), la terapia fotodinámica del cáncer (PCT) y la inactivación fotodinámica (PDI) de microorganismos. En este sentido, nuestro objetivo específico es desarrollar procesos sintéticos para la preparación de Pcs con grupos funcionales adecuados para su incorporación en diferentes nanotransportadores (por ejemplo, liposomas, nanopartículas de óxido de hierro, micelas poliméricas y dendrímeros de tipo PAMAM).

*Chem Rev.* **2014**, 114, 2192. *Adv. Energy Mater.* **2014**, 4, 1301413. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 12914. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 2543. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2015**, 54, 7688. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 8991. *Nano Lett.* **2015**, 15, 1245. *ACS Nano* **2016**, 10, 1565. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, 55, doi: 10.1002/anie.201601258.

**Sólidos Organo-inorgánicos y Sondas Luminiscentes (Profs. Juan Carlos Rodríguez Ubis y Ernesto Brunet)**

El ensamblaje ordenado de moléculas orgánicas sobre sales laminares de metales tetravalentes da lugar a materiales estables, sólidos e insolubles (películas, fases meso y microporosas, etc.) con nuevas propiedades, que pueden seleccionarse mediante la elección de los restos orgánicos apropiados y el control de su deposición sobre la fase inorgánica adecuada. Mediante este tipo de procesos se han desarrollado materiales nanoestructurados con nuevas propiedades:

- i) el almacenamiento eficiente de hidrógeno y otros gases (combustibles, CO<sub>2</sub>, etc)
- ii) la separación fotoinducida de cargas (materiales fotónicos)
- iii) la construcción de redes con propiedades de quiralidad supramolecular (encaminados a su uso en catálisis enantioselectiva y procesos de memoria quiral)
- iv) la generación de luminiscencia (emisión sensibilizada de iones lantánidos y “up-conversion”)

Esta última aplicación basada en la luminiscencia de los iones lantánidos es un proceso bien conocido y con un gran número de aplicaciones que abarcan desde su empleo como marcadores en procesos biológicos hasta el desarrollo de materiales fotónicos. Las exclusivas características de emisión de estos iones (excitación vía ligandos orgánicos, largos tiempos de vida, elevados desplazamientos de Stokes, etc.) los hacen especialmente interesantes en muchos nuevos procesos. En este sentido se desarrollan en esta línea complejos de iones lantánidos sustitutos con grandes ventajas de los fluoróforos tradicionales en un buen número de aplicaciones bioanalíticas. En esta área se desarrollan, por ejemplo, marcadores de oligonucleótidos para la detección de secuencias de ADN mediante hibridación de fragmentos complementarios desarrollando interruptores luminosos para la detección de secuencias específicas de ácidos nucleicos. La versatilidad de las estructuras empleadas para estas aplicaciones y las propiedades de emisión de sus complejos con iones lantánidos permiten asimismo la ampliación de su estudio para la generación de numerosos complejos con interesantes propiedades catalíticas, fotoquímicas, o redox, y la generación de materiales metalo orgánicos de tipo MOFs luminiscentes y geles con aplicaciones en diagnóstico médica, optoelectrónica etc.

“Layered  $\gamma$ -zirconium phosphate as novel semiconductor for dye sensitized solar cells: Improvement of photovoltaic efficiency by intercalation of a ruthenium complex-viologen dyad” P. Atienzar, M. de Victoria-Rodríguez, O. Juanes, J. C. Rodríguez-Ubis, E. Brunet and H. García, *Energy & Environmental Science*, **2011**, 4, 4718-4726

“Lanthanide Ions as Luminescent Probes, J. C. Rodríguez-Ubis, E. Brunet, O. Juanes” *Encyclopedia of Metalloproteins*, V.N. Uversky, R.H. Kretsinger, E.A. Permyakov (eds.), **2012**, DOI 10.1007/978-1-4614-1533-6

“The use of lanthanide luminescence as a reporter in the solid state: Desymmetrization of the prochiral layers of  $\gamma$ -zirconium phosphate/phosphonate and circularly polarized luminescence” E. Brunet, M. de Victoria-Rodríguez, V. Luu, G. Muller, O. Juanes, J. C. Rodríguez-Ubis, *Microporous and Mesoporous Materials*, **2013**, 169, 222-234.

“Switchable lanthanide luminescent binary probes in efficient single nucleotide mismatch discrimination” E. Malmi, E. Brunet, J. C. Rodríguez-Ubis, T. Soukka, U. Karhunen, *Sensors and Actuators B*, **2015**, 211, 297-302.

**Química Organometálica aplicada a Síntesis (Prof. Diego J. Cárdenas)**

La síntesis de compuestos es un tema central dentro de la química. Los condicionantes económicos y medioambientales requieren el descubrimiento de nuevos métodos. Esta línea de investigación se ocupa de desarrollar métodos de síntesis de compuestos con alta eficacia basados en la química de los metales de transición para poder optimizar el uso de las materias primas y disminuir la generación de residuos. La catálisis ocupa una posición central dentro de este objetivo general, dado que permite reacciones que requieren menos energía y empleando reactivos cada vez menos elaborados. En este sentido, se han desarrollado recientemente nuevos métodos para la formación de enlaces carbono-carbono y carbono-boro basados tanto en la química del Pd como de metales de la primera serie de transición (Ni y Fe). Estos métodos destacan por la capacidad de formar varios enlaces en una sola operación sintética, por su elevada generalidad, compatibilidad con grupos funcionales y por el empleo de condiciones de reacción suaves.

“Fe-catalysed Kumada-type alkyl-alkyl cross-coupling. Evidence for the intermediacy of Fe(I) complexes” Guisan-Ceinos, M.; Tato, F.; Buñuel, E.; Calle, P.; Cardenas, D. J. *Chem. Sci.* **2013**, 4, 1098 -1104 DOI:10.1039/c2sc21754f.

“Ni-catalyzed cascade formation of C(sp<sup>3</sup>)-C(sp<sup>3</sup>) bonds by cyclization and cross-coupling reactions of iodoalkanes with alkyl zinc halides” Phapale, V.B.; Buñuel, E.; Garcia-Iglesias, M.; Cardenas, D. J. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, 46, 8790 -8795. DOI:10.1002/anie.200702528.

“Pd-Catalyzed Borylative Cyclization of 1,6-Enynes” Marco-Martínez, J.; López-Carrillo, V.; Buñuel, E.; Simancas, R.; Cárdenas, D. J. *J. Am. Chem. Soc.*, **2007**, 129, 1874. DOI: 10.1021/ja0685598.

### Síntesis de productos naturales y poliarenos helicoidales (Prof. Carmen Carreño)

La síntesis estereoselectiva de moléculas que presentan actividad biológica es un área de enorme interés aplicado ya que permite el acceso no sólo a productos naturales sino a nuevas estructuras con propiedades mejoradas. También permite la construcción de materiales quirales cuya utilidad se basa en las propiedades quirópticas que presentan. Esta línea de investigación, centrada en estos dos ejes, ha conducido a la síntesis total de distintos grupos de productos naturales de naturaleza quinónica, como las Anguciclinonas así como derivados de p-quinol. Asimismo, se han descrito nuevas estructuras policíclicas enantiopuras que incorporan fragmentos con quiralidad planar, central y helicoidal, aplicando metodología sintética desarrollada en el grupo. La obtención de nuevos azocompuestos quirales, ha permitido demostrar que estos productos se comportan como interruptores moleculares cuya fotoisomerización se puede seguir por técnicas quirópticas.

“Enantiopure Helical Ferrocene-triazole-quinone triads: Synthesis and Properties” Del Hoyo, A. M.; Latorre, A.; Díaz, R.; Urbano, A.; Carreño, M. C. *Adv. Synth. Cat.* **2015**, 357, 1154-1166. DOI:10.1002/adsc.201400998

“Control of the Helical Chirality of Enantiopure Sulfinyl Z-Azobenzene-based Photoswitches”. Núñez, I.; Merino, E.; Lecea, M.; Pieraccini, S.; Spada, G. P.; Rosini, C.; Mazzeo, G.; Ribagorda, M.; Carreño, M. C. *Chem. Eur. J.* **2013**, 19, 3397-3406. DOI: 10.1002/chem.201203243

“Total Synthesis of Natural p-Quinol Cochinchinenone” Barradas, S.; Hernández-Torres, G.; Urbano, A. Carreño, M. C. *Org. Lett.* **2012**, 14, 5952-5955. DOI: 10.1021/ol302858r.

### Desarrollo de Métodos en Catálisis Asimétrica (Prof. Juan Carlos Carretero)

El desarrollo de métodos catalíticos más eficientes, efectivos y selectivos se encuentra en la vanguardia de la síntesis orgánica actual por su gran trascendencia fundamental y práctica en la elaboración de nuevos compuestos químicos, incluidos aquéllos con propiedades físicas o farmacológicas innovadoras. En este ámbito la catálisis metálica viene demostrando una extraordinaria versatilidad debido a la diversidad mecanística de la química de los metales de transición y el múltiple efecto ejercido por ligandos y aditivos. . Nuestro grupo investigador ha desarrollado nuevos métodos catalizados por metales de transición (preferentemente paladio, cobre, rodio y plata), basados en el diseño de nuevos sistemas catalíticos y grupos directores, que proporcionan soluciones eficaces a retos sintéticos que no se encontraban resueltos, especialmente en procesos de funcionalización directa C(sp<sup>2</sup>)-H y C(sp<sup>3</sup>)-H y en reacciones de funcionalización regioselectiva de enlaces múltiples C-C (por ejemplo borilaciones y sililaciones de alquinos). Igualmente se han desarrollado nuevas alternativas en catálisis asimétrica, especialmente en el contexto de las cicloadiciones 1,3-dipolares con iluros de azometino y su aplicación a la síntesis enantioselectiva de pirrolidinas y heterociclos relacionados con múltiples patrones de sustitución.

“Cu-Catalyzed Silylation of Alkynes: A Traceless 2-Pyridylsulfonyl Controller Allows Access to Either Regioisomer on Demand” García-Rubia, A.; Romero-Revilla, J. A.; Mauleón, P.; Gómez-Arrayás, R.; Carretero, J. C. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 6857-6865. DOI: 10.1021/jacs.5b02667.

a) “Rh<sup>I</sup>/Rh<sup>III</sup> Catalyst-Controlled Divergent Aryl/Heteroaryl C-H Bond Functionalization of Picolinamides with Alkynes” Martínez, A. M.; Echavarren, J.; Alonso, I.; Rodríguez, N.; Gómez Arrayás, R.; Carretero, J. C. *Chem. Sci.* **2015**, 6, 5802-5814. DOI: 10.1039/c5sc01885d

b) “Catalytic Asymmetric Synthesis of  $\beta$ -Quaternary Proline Derivatives by 1,3-Dipolar Cycloaddition of  $\beta$ -Silylimines” Hernández-Toribio, J.; Padilla, S.; Adrio, J.; Carretero, J. C. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, 51, 8854-8858. DOI: 10.1002/anie.201203828.

### Química Bio-Orgánica (Prof. Ángel Rumero Sánchez)

Las moléculas bioorgánicas estudiadas pueden agruparse en:

*Productos Naturales:* Actualmente se están desarrollando nuevos compuestos bioactivos, cabeza de serie, procedentes de cianobacterias extremófilas. El estudio abarca desde la purificación y determinación estructural, hasta la biosíntesis y síntesis total de productos naturales.

*Macromoléculas:* Se preparan diferentes macroestructuras para su utilización en reconocimiento molecular y como soportes en la preparación de biorreactores para su aplicación en síntesis química.

“Functional analysis of filipin tailoring genes from *Streptomyces filipinensis* reveals alternative routes in filipin III biosynthesis and yields bioactive derivatives” Payero, Tamara D.; Vicente,



Claudia M.; Rumbero, Angel; Barreales, Eva G.; Santos-Aberturas, Javier; de Pedro, Antonio; Aparicio, Jesus, *Microbial Cell Factories* (2015), 14, 1-14.

Preparation of an Immobilized Lipase-Palladium Artificial Metalloenzyme as Catalyst in the Heck Reaction: Role of the Solid Phase, Filice, Marco; Romero, Oscar; Aires, Antonio; Guisan, Jose M.; Rumbero, Angel; Palomo, Jose M. *Advanced Synthesis & Catalysis* (2015), 357(12), 2687-2696.

Sustainable synthesis of N-acetylglucosamine using an immobilized  $\beta$ -galactosidase on a tailor made porous polymer, Aires-Trapote, Antonio; Tamayo, Aitana; Rubio, Juan; Rumbero, Angel; Hernaiz, Maria J., *RSC Advances* (2015), 5(50), 40375-40383.

“Covalent Immobilization of *Pseudomonas stutzeri* Lipase on a Porous Polymer: An Efficient Biocatalyst for a Scalable Production of Enantiopure Benzoin Esters under Sustainable Conditions”, Aires-Trapote, Antonio; Hoyos, Pilar; Alcantara, Andres R.; Tamayo, Aitana; Rubio, Juan; Rumbero, Angel; Hernaiz, Maria J., *Organic Process Research & Development* (2015), 19(7), 687-694.

“Electrogenerated Conductive Polymers from Triphenylamine End-Capped Dendrimers”, Mangione, Maria I.; Spanevello, Rolando A.; Rumbero, Angel; Heredia, Daniel; Marzari, Gabriela; Fernandez, Luciana; Otero, Luis; Fungo, Fernando, *Macromolecules* (Washington, DC, United States) (2013), 46(12), 4754-4763.

“Versatile strategy for the synthesis of biotin-labelled glycans, their immobilization to establish a bioactive surface and interaction studies with a lectin on a biochip”, Munoz, F. Javier; Rumbero, Angel; Sinisterra, Jose V.; Santos, J. Ignacio; Andre, Sabine; Gabius, Hans-J.; Jimenez-Barbero, Jesus; Hernaiz, Maria J., *Glycoconjugate Journal* (2008), 25(7), 633-646.

“PI factor, a novel type quorum-sensing inducer elicits pimarcin production in *Streptomyces natalensis*”, Recio, Eliseo; Colinas, Angel; Rumbero, Angel; Aparicio, Jesus F.; Martin, Juan F., *Journal of Biological Chemistry* (2004), 279(40), 41586-41593.

### **Materiales y Sistemas Moleculares Nanoestructurados (Prof. David González)**

La naturaleza ofrece multitud de ejemplos en los que se utiliza el *autoensamblaje molecular* para crear una amplia diversidad de sistemas moleculares organizados con funciones específicas. Tomando estos sistemas biológicos como fuente de inspiración, esta línea de investigación se centra en mejorar o crear nuevas funciones en materiales y sistemas moleculares mediante el control de la organización molecular a escala nanométrica. En analogía a la síntesis covalente, en la que átomos o fragmentos moleculares se enlazan para crear moléculas más complejas, la herramienta que se utiliza en esta línea es la *síntesis no covalente*, donde se parte de moléculas “programadas” con grupos funcionales adecuados de forma que se ensamblen espontáneamente, a través de una combinación de interacciones no covalentes, en arquitecturas supramoleculares dotadas de una estructura y función prediseñada. La investigación en esta línea abarca desde el estudio de los fundamentos básicos de la síntesis no covalente (refs. 1 y 2) hasta el desarrollo de nanoestructuras moleculares con potencial aplicación en nanotecnología (ref. 3), (opto)electrónica molecular (ref. 4), catálisis o biomedicina.

“High-fidelity Noncovalent Synthesis of Hydrogen-bonded Macrocyclic Assemblies”. Montoro-García, C.; Camacho-García, J.; López-Pérez, A. M.; Bilbao, N.; Romero-Pérez, S.; Mayoral, M. J.; González-Rodríguez, D. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 6780-6784. DOI: 10.1002/anie.201501321. (VIP Paper).

“Role of the Symmetry of Multipoint Hydrogen Bonding on Chelate Cooperativity in Supramolecular Macrocyclization Processes”. Montoro-García, C.; Camacho-García, J.; López-Pérez, A. M.; Mayoral, M. J.; Bilbao, N.; González-Rodríguez, D. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 223–227. DOI: 10.1002/anie.201508854.

“Two-Dimensional Nanoporous Networks Formed by Liquid-to-Solid Transfer of Hydrogen-Bonded Macrocycles Built from DNA Bases”. Bilbao, N.; Destoop, I.; De Feyter, S.; González-Rodríguez, D. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 659–663. DOI: 10.1002/anie.201509233. (Hot Paper).

“Polar Switching in a Lyotropic Columnar Nematic Liquid Crystal made of Bowl-shaped Molecules”. Guilleme, J.; Cavero, E.; Sierra, T.; Ortega, J.; Folcia, C. L.; Etxebarria, J.; Torres, T.; González-Rodríguez, D. *Adv. Mater.* **2015**, *27*, 4280–4284. DOI: 10.1002/adma.201500238.

#### **Frontiers in Catalysis (FRONTCAT) (Prof. José Alemán)**

El desarrollo de procesos químicos sostenibles es una de las características más importantes de la Química moderna. Así, ésta se ha convertido en un área clave de investigación a nivel mundial, ya que proporciona soluciones a las demandas sociales más importantes, mediante la optimización y uso de los recursos naturales, minimizando el número de residuos y por tanto su impacto ambiental. De entre todas las soluciones posibles, la catálisis representa la aproximación más directa y central. El objetivo principal de este grupo de investigación es la búsqueda de nuevos catalizadores con mayor eficacia, que requieran menos consumo energético o que utilicen la luz solar como fuente de energía y que minimicen la generación de residuos, siendo la organo- y la foto-catálisis sus dos principales áreas de trabajo. Para ello se trabaja tanto en sistemas homogéneos como también se plantea el diseño de nuevos materiales orgánicos porosos heterogéneos que contengan en su estructura organo- o foto-catalizadores para mejorar la actividad, selectividad y reciclabilidad en distintos procesos de relevancia industrial.

“Oxidative C-H Bond Functionalization-Ring Expansion Reaction with TMSCHN<sub>2</sub>: A Novel Cu(I)-Catalyzed Approach to Dibenzoxe- and Dibenzoazepines”. Stopka, T.; Marzo, L.; Zurro, M.; Janich, S.; Würthwein, E.-U.; Daniliuc, C. G.; Alemán, J.; García Mancheño, O. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 5049

“A Highly Enantioselective Construction of Tricyclic Derivatives via Desymmetrization of Cyclohexadienones” Martín-Santos, C.; Jarava-Barrera, C.; del Pozo, S.; Parra, A.; Díaz-Tendero, S.; Mas-Ballesté, R.; Cabrera, S.; Alemán, J. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 8184.

#### **Catálisis Dirigida a la Síntesis Orgánica (Prof. Mariola Tortosa)**

La catálisis ocupa un lugar clave en el desarrollo de una química sostenible, que permita generar compuestos de interés de forma más eficiente y minimizando la generación de residuos. Nuestro grupo de investigación está interesado en el desarrollo de nuevos métodos catalíticos que faciliten la construcción de moléculas complejas con propiedades bioactivas. Los productos

naturales son a menudo nuestra fuente de inspiración para el desarrollo de estos métodos, buscando siempre dar respuesta a problemas sintéticos no resueltos. Estamos especialmente interesados en la química de los organoborados por ser compuestos muy versátiles y por el creciente interés de estos derivados como posibles fármacos en la industria farmacéutica. Recientemente, nuestra línea de investigación principal se ha centrado en el desarrollo de métodos no convencionales, catalizados por metales, para la formación de enlaces carbono-boro y la utilización de los organoborados generados en la síntesis de productos de interés biológico.

“Synthesis of *Syn* and *Anti* 1,4-Diols by Copper Catalyzed Boration of Allylic Epoxides” Tortosa, M. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 3950.

“Copper(I)-Catalyzed Formal Carboboration of Alkynes: Synthesis of Tri- and Tetrasubstituted Vinylboronates” Alfaro, R.; Parra, A.; Alemán, J.; Garcia Ruano, J. L.; Tortosa, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 15165.

“Copper-catalyzed diastereo- and enantioselective desymmetrization of cyclopropenes: synthesis of cyclopropylboronates” Parra, A.; Amenós, L.; Guisan-Ceinos M.; López, A.; Garcia-Ruano, J. L.; Tortosa, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 15833.

“Copper-Catalyzed Silylation of *p*-Quinone Methides: New Entry to Dibenzyllic Silanes” Lopez, A.; Parra, A.; Jarava-Barrera, C.; Tortosa, M. *ChemComm* **2015**, *51*, 17684.

“Copper-Catalyzed Borylative Aromatization of *p*-Quinone Methides: Enantioselective Synthesis of Dibenzyllic Boronates” Jarava-Barrera, C.; Parra, A.; López, A.; Cruz-Acosta, F.; Collado-Sanz, D.; Cardenas, D. J.; Tortosa M. *ACS Cat.* **2016**, *6*, 442.

### **Diseño de Nanomateriales Multifuncionales (Prof. Félix Zamora)**

El control de los parámetros de formación en los procesos de síntesis de moléculas y polímeros, así como el uso de las herramientas que permiten realizar un diseño racional, facilitan la preparación de materiales en la nanoescala con distintas arquitecturas y funcionalidades químicas y físicas. Nuestro objetivo se centra en la preparación de nuevos nanomateriales que presenten propiedades físicas de interés, tales como conductividad eléctrica y/o iónica, luminiscencia y magnetismo, etc, junto con reconocimiento molecular. Estos materiales pueden cubrir distintas necesidades en campos tales como electrónica molecular, opto-electrónica, sensores, membranas, nanotransportadores. Para ello utilizamos principalmente herramientas de la química de coordinación centrándonos en la síntesis y estudio de polímeros de coordinación en la nanoescala, así como de polímeros cristalinos covalentes (tipo COFs, covalent organic frameworks). En este sentido hemos generado diversos tipos de nanomateriales de distintos tipos: i) “hilos moleculares” con excelentes valores de conductividad en la nanoescala y a nivel de molécula individual; ii) láminas de espesor monomolecular o de pocas moléculas tanto de polímeros de coordinación como COFs con interesantes propiedades ópticas; iii) nanoparticular de materiales inteligentes (estimulo-respuesta) que son selectivos al anclaje de secuencias específicas de ADN, no citotóxicos y con permeabilidad a la membrana celular.

Así mismo una parte de nuestro equipo está dedicada a la fabricación de materiales bidimensionales haciendo uso de técnicas de exfoliación para generar grafeno, nitruro de boro, antimonene,... y estudiar sus propiedades opto-electrónicas.

Zamora, F. *et al.* Direct On-Surface Patterning of a Crystalline Lamina Covalent Organic Framework Synthesized at Room Temperature. *Chem.-Eur. J.* 21, 10666-10670, (2015).

Zamora, F. *et al.* Mechanical and optical properties of ultralarge flakes of a metal-organic framework with molecular thickness. *Chemical Science* 6, 2553-2558, (2015).

Zamora, F. *et al.* Hermosa, C. *et al.* Intrinsic electrical conductivity of nanostructured metal-organic polymer chains. *Nat Commun* 4, Artn 1709, (2013).

Zamora, F. *et al.* Highly conductive nanoribbons of coordination polymers. *Nature Nanotech* 5, 110-115, (2010).

### **Macromoléculas Organometálicas Electroactivas y Bioactivas (Prof. Isabel Cuadrado Sánchez)**

La Química Organometálica constituye una de las áreas más dinámicas y versátiles de la Química. Esta línea de investigación está orientada a desarrollar macromoléculas organometálicas basadas en átomos de silicio, con diferentes esqueletos estructurales (cíclicos, poliméricos, dendríticos y cúbicos), funcionalizadas con metalocenos electroactivos, en particular, con ferroceno. La versatilidad de las estrategias de síntesis que se utilizan facilita que las unidades organometálicas se sitúen en posiciones definidas del esqueleto molecular, separadas por distancias predeterminadas, con el fin de que las metalomoléculas presenten un comportamiento electroquímico de interés (buscando principalmente la existencia de comunicación electrónica entre los centros metálicos). La investigación también se centra en preparar moléculas heterometálicas con ferroceno y platino(II), con objeto de evaluar su actividad antitumoral y analizar las consecuencias que deriven de esta interesante combinación entre diferentes especies metálicas potencialmente citotóxicas. Además de estudiar en detalle los procesos de transferencia electrónica, se evalúa la capacidad que poseen las moléculas organometálicas para modificar superficies de electrodos y su potencial para participar en fenómenos de reconocimiento molecular, en concreto, como sensores redox y en la formación de agregados supramoleculares de inclusión.

“Ferrocene and Silicon-Containing Oxathiacrown Macrocycles and Linear Oligo-Oxathioethers Obtained via Thiol-Ene Chemistry of a Redox-Active Bifunctional Vinyl-disiloxane” S. Bruña, I. Martínez, A. M. González-Vadillo, C. Martín-Fernández, M. M. Montero-Campillo, O. Mó, I. Cuadrado, *Macromolecules*, **2015**, 48, 6955–696. DOI: 10.1021/acs.macromol.5b01683

“Cubic Octasilsesquioxanes, Cyclotetrasiloxanes, and Disiloxanes Maximally Functionalized with Silicon-Bridged Interacting Triferrocenyl Units” S. Bruña, D. Nieto, A.M. González-Vadillo, J. Perles, I. Cuadrado *Organometallics*, **2012**, 31, 3248–3258. DOI: 10.1021/om300101w

“Pt(II)- Activated Coupling of Aminoethylferrocene with Benzonitrile. A Facile Access Route to a New Redox-Active Bis(ferrocenyl-amidine) Anion Sensor” D. Nieto, A. M. González-Vadillo, S. Bruña, C. Pastor, A. E. Kaifer, I. Cuadrado *Chemical Communications*, **2011**, 47, 10398-10400. DOI: 10.1039/c1cc13704b.

“Catalytically Generated Ferrocene-Containing Guanidines as Efficient Precursors for New Redox-Active Heterometallic Platinum(II) Complexes with Anticancer Activity”. D. Nieto, S. Bruña, A. M<sup>a</sup> González-Vadillo, J. Perles, F. Carrillo-Hermosilla, A. Antiñolo, J. M. Padrón, G. Plata, I. Cuadrado, *Organometallics*, **2015**, *34*, 5407–5417. DOI: 10.1021/acs.organomet.5b00751.

### **Diseño de agregados moleculares a través de interacciones no-covalentes (Prof. Manuel Yáñez)**

La perturbación producida en la distribución electrónica de los compuestos que forman parte de agregados moleculares, a través de interacciones no-covalentes típicamente presentes en lo que se viene denominando "*soft-matter*" y *MOFs* (metal-organic-frameworks), abre la puerta a una modulación, a la carta, de las propiedades moleculares de los sistemas interactuantes. Estos efectos son particularmente llamativos a través de la formación de enlaces de berilio, con resultados altamente sorprendentes, como es el convertir típicas bases convencionales, en agregados moleculares, que por el contrario, son ácidos más fuertes que los oxiácidos más fuertes hasta ahora conocidos. Dichas interacciones son también capaces de inducir la formación espontánea de pares iónicos, de radicales o de actuar como esponjas de aniones. Permiten, igualmente generar sistemas ditópicos capaces de polimerizarse dando lugar, por auto-ensamblado, a polímeros cíclicos y lineales de alta estabilidad. Igualmente la incorporación de metales como el Be en la estructura de sistemas organometálicos como subftalocianinas les confiere interesantes propiedades para su aplicación en dispositivos fotovoltaicos todo-orgánicos.

M. Yáñez et al. Can conventional bases and unsaturated hydrocarbons be changed into gas-phase superacids stronger than most of the known oxyacids? The role of Beryllium bonds, *Chem. Eur. J.* **2013**, *35*, 11637.

M. Yáñez et al. "Using beryllium bonds to change halogen bonds from traditional to chlorine-shared to ion-pair bond"s, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 2259.

M. Yáñez et al. "Cooperativity in Beryllium Bonds", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16*, 4305.

M. Yáñez et al. "An Insight into the Mechanism of the Axial Ligand Exchange Reaction in Boron Subphthalocyanine Macrocycles", *J. Am. Chem. Soc.*, **2014**, *136*, 14289.

### **Simulación de sistemas moleculares complejos (Prof Manuel Alcamí)**

La simulación teórica permite el estudio de moléculas y clusters se encuentran altamente ionizados o excitados, o forman parte de un material híbrido. Se trata de áreas en la frontera entre la Química y la Física, donde se están encontrando nuevos fenómenos y cuya correcta interpretación requiere del uso de simulaciones de alto nivel que describan de forma precisa las propiedades de los sistemas y los procesos dinámicos implicados. En particular nuestro interés está centrado en el estudio de la fragmentación de moléculas con relevancia en biología, altamente ionizadas y excitadas, procesos que ocurren en la escala los femtosegundos y que son claves para entender el daño causado por radiaciones ionizantes. Derivados de compuestos basados en carbono (fullerenos, PAHs, nanotubos y grafeno). Adsorción de moléculas orgánicas,

clusters y nuevos materiales 2D en superficies metálicas cubiertas con capas atómicas ultrafinas con el fin de comprender fenómenos como la transferencia de carga en las interfases con el fin de diseñar nanodispositivos electrónicos de base orgánica y el diseño de nuevos materiales moleculares para la catálisis.

“Charge Transfer-induced Structural Rearrangements at Both Sides of Organic/Metal Interfaces” T-C. Tseng, C. Urban, Y. Wang, R. Otero, S.L. Tait, M. Alcamí, D. Ecija, M. Trelka, J.M. Gallego, N. Lin, M. Konuma, U. Starke, M.A. Herranz, F. Martín, N. Martín, K. Kern and R. Miranda. *Nature Chemistry* **2010**, 2, 374-379 (2010)

“Ultrafast Damage Following Radiation-Induced Oxidation of Uracil in Aqueous Solution” P. López-Tarifa, M.-P. Gaigeot, R. Vuilleumier, I. Tavernelli, M. Alcamí, F. Martín, M.A. Herve du Penhoat and M.-F. Politis, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, 52, 3160-3163.

“Elastic Response of Graphene Nanodomes”, S. Koch, D. Stradi,, E. Gnecco, S. Barja, S. Kawai, C. Díaz, M. Alcamí, F. Martín, A.L. Vázquez de Parga, R. Miranda, T. Glatzel and E. Meyer, *ACS Nano* **2013** 7, 2927–2934.

“Long-range magnetic order in a purely organic 2D layer adsorbed on epitaxial graphene”, M. Garnica, D. Stradi, S. Barja, F. Calleja, C. Díaz, M. Alcamí, N. Martín, A.L. Vázquez de Parga, F. Martín and R. Miranda, *Nature Physics* **2013**, 9, 368–374.

“Probing the Site-Dependent Kondo Response of Nanostructured Graphene with Organic Molecules”, M. Garnica, D. Stradi, F. Calleja, S. Barja, C. Díaz, M. Alcamí, A. Arnau, A.L. Vázquez de Parga, F. Martín and R. Miranda, *Nano Letters* **2014**, 14 , 4560–4567.

“Cage connectivity and frontier  $\pi$  orbitals govern isomer relative stability of fullerene anions and cations”, Y. Wang, S. Díaz-Tendero M. Alcamí and F. Martín, *Nature Chemistry* **2015**, 7, 927-934.

“Key Structural Motifs to Predict the Cage Topology in Endohedral Metallofullerenes”, Y. Wang, S. Díaz-Tendero, F. Martín and M. Alcamí, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, 138, 1551-1560.

### **Sensores y biosensores (Prof. María Encarnación Lorenzo y Prof. Félix Pariente)**

Este grupo desde los primeros años noventa se ha dedicado a investigar la modificación de superficies conductoras convencionales (electrodos) como fuente de investigación en el desarrollo de electrodos modificados con propiedades nuevas y utilizables en un buen número de aplicaciones, entre ellas el diseño de sensores y biosensores. Estos sistemas electroquímicos sencillos han sido también útiles para estudiar procesos de transferencia de carga en distintos enzimas con propiedades redox. En los últimos el empleo de distintos tipos de nanomateriales (Grafenos, nanotubos de carbono, nanopartículas metálicas, nanopartículas de carbono y muy recientemente *carbon dots*) ha incentivado el desarrollo e nuevas líneas de investigación focalizadas en el estudio de estos nanomateriales y sus derivados en el diseño de nuevos sensores y biosensores. Recientemente, la preparación de materiales supramoleculares basados en complejos de metales de transición se ha utilizado con éxito en la modificación de transductores convencionales dando lugar a superficies conductoras con interesantes propiedades catalíticas y útiles para la construcción de nuevos micro y nano sensores. La

modificación de electrodos con distintos tipos de nanomateriales ha permitido obtener nuevas superficies nanoestructuradas que pueden ser utilizadas como nuevas plataformas para análisis (bio)analítico.

“Multi-tasking Schiff base ligand: a new concept of AuNPs synthesis. Abad, Jose Maria; Bravo, Iria; Pariente, Felix; Lorenzo, Encarnacion”. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* **2016**, 408(9), 2329-2338. DOI:10.1007/s00216-016-9329-y

“Diamond nanoparticles as a way to improve electron transfer in sol-gel L-lactate biosensing platforms” Briones, M.; Casero, E.; Vazquez, L.; Pariente, F.; Lorenzo, E.; Petit-Dominguez, M. D.; *Analytica Chimica Acta* **2016**, 908, 141-149. DOI:10.1016/j.aca.2015.12.029

“Insulin sensor based on nanoparticle-decorated multiwalled carbon nanotubes modified electrodes. Martinez-Periñán, Emiliano; Revenga-Parra, Monica; Gennari, Marcello; Pariente, Felix; Mas-Balleste, Ruben; Zamora, Felix; Lorenzo, Encarnacion. *Sensors and Actuators, B: Chemical* **2016**, 222, 331-338. DOI:10.1016/j.snb.2015.08.033

“Scaffold electrodes based on thioctic acid-capped gold nanoparticles coordinated Alcohol Dehydrogenase and Azure A films for high performance biosensor”. Gomez-Anquela, C.; Garcia-Mendiola, T.; Abad, Jose M.; Pita, M.; Pariente, F.; Lorenzo, E. *Bioelectrochemistry* **2015**, 106(Part\_B), 335-342. , DOI:10.1016/j.bioelechem.2015.06.009

“Highly dense nickel hydroxide nanoparticles catalyst electrodeposited from a novel Ni(II) paddle-wheel complex”. Martinez-Periñán, Emiliano; Gennari, Marcello; Revenga-Parra, Monica; Abad, Jose M.; Mateo-Marti, Eva; Pariente, Felix; Castillo, Oscar; Mas-Balleste, Ruben; Zamora, Felix; Lorenzo, Encarnacion. *Journal of Catalysis* **2015**, 329, 22-31. DOI:10.1016/j.jcat.2015.04.010

“Diazonium salt click chemistry based multiwall carbon nanotube electrocatalytic platforms”. Bravo, I.; Garcia-Mendiola, T.; Revenga-Parra, M.; Pariente, F.; Lorenzo, E. *Sensors and Actuators, B: Chemical* **2015**, 211, 559-568. DOI:10.1016/j.snb.2015.01.076

“Diamond nanoparticles based biosensors for efficient glucose and lactate determination”. Briones, M.; Casero, E.; Petit-Dominguez, M. D.; Ruiz, M. A.; Parra-Alfambra, A. M.; Pariente, F.; Lorenzo, E.; Vazquez, L.; *Biosensors & Bioelectronics* **2015**, 68, 521-528. DOI:10.1016/j.bios.2015.01.044

## Anexo I:

### Propuesta de Reglamento de Régimen Interno

#### Preámbulo

La creación del Instituto parte de la iniciativa de un grupo de profesores de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid pertenecientes a diversas áreas de la Química, con el objetivo de integrar esfuerzos para la consolidación de una investigación de excelencia en Química en la Universidad. Se trata de una estructura creada en el seno de la UAM, en el marco del artículo 17 de los Estatutos de la Universidad Autónoma de Madrid, con naturaleza de **Centro propio de investigación** que, a diferencia de los institutos universitarios, carece de competencias para organizar e impartir programas de doctorado ni posgrado.

#### Capítulo Primero. Estructura y personal

##### Artículo 1. Estructura

El Instituto de Química **Investigación Avanzada en Ciencias Químicas** se estructurará en Secciones y Unidades de Servicio. Las Secciones son las unidades encargadas de desarrollar y coordinar la investigación dentro de sus respectivos ámbitos de conocimiento. Existirá la figura de Director de Sección que será nombrado por el Director del Centro entre el personal de investigación para períodos de cuatro años, no pudiendo desempeñar este cargo más de dos períodos consecutivos. Los Directores de Sección ejercerán sus funciones de acuerdo con la misión principal de las Secciones. Coordinarán y supervisarán las actividades dentro de las mismas, velarán por el buen uso y distribución de los recursos que tengan asignados y por el cumplimiento de las obligaciones y derechos de su personal. Todo ello sin perjuicio de las funciones que competen a los investigadores principales en la ejecución de sus respectivos proyectos de investigación. Las Unidades de Servicio prestarán el apoyo técnico y de gestión necesario para el correcto desarrollo de las tareas encomendadas a las Secciones. Podrán existir Comisiones especiales para resolver problemas específicos.

##### Artículo 2. Personal

###### 1. Podrán ser miembros del Instituto

a) Los profesores permanentes de la UAM con título de Doctor que se adscriban al centro. La adscripción se hará mediante propuesta razonada de alguno de los miembros del instituto. Dicha propuesta, acompañada del preceptivo informe de la Comisión de Asesoramiento Científico, deberá ser aprobada por la Comisión de Dirección. La adscripción será por períodos de cinco años renovables y deberá contar con el visto bueno del Departamento universitario al que pertenezca el profesor. Para la renovación, cada investigador presentará a la Comisión de Dirección una memoria científica de la actividad desempeñada hasta ese momento y sus planes para el siguiente periodo.

b) Personal investigador con contrato temporal (no permanente). La adscripción se hará mediante propuesta razonada de alguno de los miembros del Centro. Dicha propuesta deberá ser aprobada por la Comisión de Dirección. La adscripción tendrá la duración del contrato con un máximo de cinco años.



c) Personal de apoyo a la investigación adscrito al Centro.

d) Miembros honorarios. Podrán ser miembros honorarios los profesores o investigadores de reconocido prestigio en alguna de las áreas o ámbitos de trabajo del Centro, en régimen de sabático, emérito o jubilado.

## **2. Obligaciones del personal del Instituto**

a) Todo el personal del Instituto, de acuerdo con su categoría o capacidad, deberá estar incluido en alguna de las Secciones o Unidades de Servicio existentes en el Centro, sin perjuicio de su adscripción a los Departamentos universitarios correspondientes. El Instituto contará con el personal científico y una Unidad de Servicios de Apoyo.

b) Los investigadores del Instituto colaborarán en las posibles tareas de organización o gestión asignadas por la Comisión de Dirección o los Directores de su Sección.

c) Los investigadores se comprometen a participar con el Instituto en aquellas convocatorias competitivas de proyectos de investigación, tanto nacionales como europeas, a las que el Instituto concurra como tal. El incumplimiento de este compromiso causará el cese inmediato como miembro del Centro.

d) En todas las publicaciones de los investigadores adscritos al Instituto deberá figurar el Instituto dentro de los datos correspondientes a la afiliación.

## **Capítulo Segundo. Órganos de gobierno y asesoramiento**

El Instituto se crea con los siguientes órganos directivos:

a) Órganos de Dirección y Gestión: la Comisión de Dirección, el Consejo de Centro, el Director y el Subdirector.

b) Órganos de Asesoramiento: la Comisión de Asesoramiento Científico.

## **Artículo 3. La Comisión de Dirección**

### **1. La Comisión de Dirección del Instituto estará constituida por:**

a) El Director del Instituto, que actuará como Presidente.

b) El Subdirector del Instituto, que actuará como secretario.

c) Los Directores de Sección.

d) Un número de representantes del personal igual a un tercio del total de los miembros de la Comisión, redondeándose por defecto el cociente no exacto. De ellos, el personal de apoyo tendrá un representante, siendo el resto representantes del personal investigador.

Tanto los representantes del personal investigador como el del personal de apoyo serán elegidos por votación entre sus respectivos colectivos, por un periodo de cuatro años pudiendo renovar solo por un periodo consecutivo.

**2. Son funciones de la Comisión de Dirección del Instituto:**

- a) Elaborar el Plan de Actuación del Centro.
- b) Proponer la creación, supresión o cambio de denominación de Secciones.
- c) Elaborar la Memoria anual de actividades.
- d) Elaborar el anteproyecto de Presupuesto del Centro.
- e) Decidir sobre renovaciones de los miembros del Centro y sobre nuevas adscripciones.
- f) Proponer las modificaciones del Reglamento de Régimen Interior cuando proceda.
- g) Proponer, en el marco de lo previsto en la normativa general de aplicación, iniciativas e intercambios de colaboración con universidades y otros organismos.
- h) Informar sobre los convenios, contratos y proyectos de investigación que se desarrollen en el seno del Centro.
- i) Decidir sobre la adecuada inversión en el Instituto de los recursos generados por los proyectos de investigación de sus miembros.
- j) Designar las comisiones pertinentes para resolver problemas específicos.

La Comisión de Dirección se reunirá cuando la convoque el Director y al menos dos vez al año. Sus actas serán públicas y estarán a disposición de todos los miembros del Instituto.

**Artículo 4. El Consejo de Centro**

El Consejo de Centro estará presidido por el Director del Instituto. El Subdirector actuará como Secretario, dará fe de los acuerdos adoptados y levantará acta de cada reunión.

El Consejo estará integrado por:

- a) Todos los miembros doctores del Centro, que constituirán como mínimo el 80% del Consejo.
- b) Una representación de los miembros no doctores, que constituirá como máximo el 15% del Consejo.
- c) Una representación del personal de apoyo a la investigación del Centro, que constituirá como máximo el 5% del Consejo.

**1. Son funciones del Consejo del Centro:**

- a) Aprobar el Plan de Actuación a propuesta de la Comisión de Dirección.
- b) Proponer y aprobar la firma de contratos con personas o entidades públicas o privadas para la realización de proyectos de investigación.

- c) Aprobar el presupuesto anual y su liquidación.
- d) Promover y aprobar los vínculos del Centro con otras Instituciones.
- e) Proponer los gastos y pagos dentro de los límites presupuestarios.
- f) Modificar el reglamento del Régimen Interno del Centro.
- g) Aquellas que puedan serle encomendadas por la Comisión de Dirección.

El Consejo se reunirá al menos una vez al año, cuando lo convoque el Director del Centro o lo solicite un 20% de sus miembros.

#### **Artículo 5. El Director del Instituto**

El Director será elegido por el Consejo de Centro, de entre los doctores adscritos al Centro, correspondiendo al Rector su nombramiento.

Funciones del Director:

- a) Ejercer la representación del Centro.
- b) Dirigir, coordinar y supervisar todos los servicios y actividades del Instituto, responsabilizándose de la gestión económica del mismo con independencia de las competencias reservadas a los investigadores principales en la dirección de sus respectivos proyectos de investigación.
- c) Coordinar la ejecución del Plan de Actuación del Centro.
- d) Velar por el cumplimiento de las obligaciones y derechos del personal adscrito.
- e) Velar para que las instalaciones y medios del Centro sean las apropiadas para el eficaz desarrollo de las actividades dentro del mismo.
- f) Velar por el debido acceso y correcto uso de las instalaciones y medios del Centro por parte de todas las personas que, con conocimiento y, en su caso, autorización hagan uso de los mismos.
- g) Velar por el correcto cumplimiento de la normativa sobre seguridad, prevención de riesgos laborales e higiene en el trabajo dentro del Centro.
- h) Distribuir entre las distintas secciones y grupos de trabajo los recursos disponibles de todo tipo y velar por su óptima utilización para el desarrollo de las actividades.
- i) Suscribir contratos de investigación y convenios de colaboración.
- j) Iniciar, de acuerdo con las competencias que puedan serle delegadas la tramitación de contratos de obras, de gestión de servicios públicos o de suministro.
- k) Coordinar anualmente la elaboración de la Memoria de actividades del Centro.

l) Elaborar el Orden del Día de la Comisión de Dirección del Centro y convocar y presidir sus reuniones.

m) Elaborar el Orden del Día del Consejo de Centro y convocar y presidir sus reuniones.

El mandato del Director tendrá una duración de cuatro años y podrá ser renovado una sola vez consecutivamente. Quien haya sido elegido por segunda vez no podrá presentarse a una nueva elección para el mismo cargo en los cuatro años siguientes a su cese, sea cual sea el motivo de éste.

El Director cesará en su cargo por fin de su mandato, a petición propia elevada al Rector o a causa de una moción de censura.

#### **Artículo 6. El Subdirector del Instituto**

El Subdirector será nombrado por el Rector y designado por el Consejo de Centro a propuesta del Director.

Funciones del Subdirector:

El Subdirector asistirá al Director en sus funciones desempeñando las que éste le delegue. En todo caso, sustituirá al Director en sus funciones en caso de ausencia o enfermedad.

El cargo de Subdirector tendrá una duración de cuatro años y podrá ser renovado una sola vez consecutivamente.

El Subdirector actuará como Secretario de la Comisión de Dirección y del Consejo de Centro, levantando Acta de todas sus actuaciones.

El Subdirector cesará en el cargo a petición propia, por decisión del Director o cuando concluya el mandato de éste.

#### **Artículo 7. La Comisión de Asesoramiento Científico.**

La Comisión de Asesoramiento Científico será nombrada por la UAM a propuesta de la Comisión de Dirección y estará formada por científicos externos de alto prestigio internacional en las líneas de investigación del Centro, que no pertenezcan a la UAM.

##### **1. Funciones de la Comisión de Asesoramiento Científico:**

a) Asesorar, a solicitud del Director, en el desarrollo de las líneas y proyectos de investigación.

b) Asesorar a la Comisión de Dirección, a solicitud de la misma en cualquier aspecto del trabajo de investigación del Centro.

c) Informar a la Comisión de Dirección en la incorporación de nuevos miembros permanentes del Centro.

d) Evaluar los planes de actuación periódicos del Centro que proponga la Comisión de Dirección.

#### **Capítulo Tercero. Moción de censura**

### **Artículo 8. Moción de censura**

El Consejo de Centro podrá revocar al Director mediante la aprobación de una moción de censura.

La moción de censura tendrá que ser presentada formalmente por la quinta parte de los miembros del Consejo y deberá contener necesariamente la propuesta de un candidato a Director.

La moción será debatida y votada entre los quince y treinta días hábiles siguientes a su presentación.

A efectos de la aprobación de la moción de censura será necesario que la misma sea apoyada por la mayoría absoluta del total de los miembros del Consejo de Centro, en cuyo caso el candidato propuesto por los firmantes de la moción quedará automáticamente elegido como director.

### **Capítulo Cuarto. Financiación**

#### **Artículo 9. Financiación**

El Instituto se financiará mediante aportaciones de entidades públicas y privadas con las que se suscriban convenios de colaboración o contratos.

En el caso de que el Centro solicite personal de administración de la UAM para el desarrollo de sus actividades ordinarias, la aprobación de tales solicitudes estará en función de la política de personal de la Universidad y de los criterios generales que se establezcan.

#### **De los costes indirectos de los proyectos de Investigación.**

a) En el caso de proyectos de investigación, convenios o contratos presentados a través del Centro a título individual por alguno de sus miembros permanentes, el Instituto recibirá el 25% de los costes indirectos que generen, ingresándose otro 25% en el Departamento Universitario al que pertenezca el investigador principal. El otro 50% se ingresará en cualquier caso en la cuenta general que la Universidad tiene al efecto.

b) En el caso de proyectos de investigación a los que el Instituto haya concurrido como tal, de forma colectiva, el Centro recibirá el 50% de los costes indirectos mientras que el otro 50% revertirá a la Universidad.

### **Capítulo Cinco. Gestión**

#### **Artículo 10. Gestión del Instituto**

La gestión económica del Centro se regirá por las normas generales de la UAM.

La tramitación y gestión de los proyectos de investigación procedentes de convocatorias competitivas se realizará a través del servicio de Investigación de la UAM.

La contratación de personal se realizará de acuerdo con los criterios de la UAM.

**Capítulo Seis. Extinción del Instituto****Artículo 11. Extinción del Instituto****1. Serán causas de extinción del Instituto:**

a) Acuerdo adoptado por el Consejo de Centro, que deberá ser notificado al Vicerrectorado de Investigación

b) Resolución del Consejo de Gobierno de la Universidad, que podrá decidir la supresión del Centro por alguna de las siguientes causas:

- Por haber incumplido los objetivos o fines inicialmente propuestos

-Por considerar que el Centro de Investigación propio de la UAM ya no es la forma más adecuada para darles cumplimiento

-Por no presentar la Memoria anual durante dos años consecutivos

-Por la falta de fuentes de financiación adecuadas para el desarrollo de su actividad

**Disposición Final**

-El presente Reglamento, una vez aprobado por el Consejo de Gobierno de la Universidad, previo informe favorable del Consejo Social, entrará en vigor al día siguiente de su publicación en el Boletín Oficial de la Universidad Autónoma de Madrid.

**Anexo II:****Conformidad de los Profesores de la Facultad de Ciencias para crear el instituto**

Los profesores e investigadores de la UAM que aparecen en el siguiente listado, manifiestan su intención de participar en la creación Instituto, como un Centro de Investigación propio de la UAM, con el objetivo de fomentar la colaboración entre los diversos grupos e investigadores que trabajan actualmente en el área de Química dentro de la UAM con el objetivo común de promover la excelencia e impacto internacional de su investigación y docencia de postgrado.

De esta forma pretendemos aumentar la competitividad a la hora de concurrir a futuras convocatorias, tanto nacionales como europeas, para la financiación de Centros de Excelencia. Mencionamos en este sentido la intención de participar en la próxima convocatoria de Centros de Excelencia "María de Maetzu".

El objetivo prioritario de esta propuesta es aumentar la calidad de la investigación en la UAM y es por tanto nuestro deseo contar con un comité de asesoramiento externo, formado por científicos de reconocido prestigio internacional, que se ocupe de evaluar las actividades del Instituto, incluyendo las nuevas adscripciones, líneas de investigación y planes estratégicos, entre otras, así como de formular propuestas para su mejora y desarrollo futuro.

<b>Apellidos, Nombre</b>	<b>Categoría profesional</b>	<b>Departamento</b>
Adrio Sevilla, Javier	Profesor Titular de Universidad	Química Orgánica
Alcamí Pertejo, Manuel	Catedrático de Universidad	Química
Alemán Lara, José J.	Investigador Ramón y Cajal	Química Orgánica
Alonso Garrido, Beatriz	Profesora Titular de Universidad	Química Inorgánica
Alonso Montero, Inés	Profesora Titular de Universidad	Química Orgánica
Amo Ochoa, Pilar	Profesora Titular de Universidad	Química Inorgánica
Bottari, Giovanni	Profesor Contratado Doctor	Química Orgánica
Brunet Romero, Ernesto	Catedrático de Universidad	Química Orgánica
Bruña Fernández, Sonia	Ayudante Doctor	Química Inorgánica
Buñuel Magdalena, Elena	Profesora Titular de Universidad	Química Orgánica
Cabrera Herranz, Silvia	Profesora Contratada Doctora	Química Inorgánica
Cárdenas Morales, Diego J	Catedrático de Universidad	Química Orgánica
Carreño García, M <sup>a</sup> Carmen	Catedrática de Universidad	Química Orgánica
Carretero González, Juan Carlos	Catedrático de Universidad	Química Orgánica
Casado Santana, Carmen	Profesora Titular de Universidad	Química Inorgánica

Cid de la Plata, Belén	Profesora Titular de Universidad	Química Orgánica
Corral Pérez, Inés	Ayudante Doctor	Química
Cuadrado Sánchez, Isabel	Catedrática de Universidad	Química Inorgánica
Delgado Laita, Esther	Catedrática de Universidad	Química Inorgánica
Delgado Gil, Salome	Catedrática de Universidad	Química Inorgánica
Díaz Tendero, Sergio	Investigador Ramón y Cajal	Química
Escosura Navazo, Andrés de la	Investigador Ramón y Cajal	Química Orgánica
Fraile Carrasco, Alberto	Profesor Contratado Doctor	Química Orgánica
Gómez Arrayás, Ramón	Profesor Titular de Universidad	Química Orgánica
González Rodríguez, David	Profesor Titular de Universidad	Química Orgánica
González Vadillo, Ana M <sup>a</sup>	Profesora Contratada Doctora	Química Inorgánica
Henrich, Gunther	Profesor Titular de Universidad	Química Orgánica
Juanes Recio, Olga	Profesora Titular de Universidad	Química Orgánica
Lamsabhi, Al Mokhtar	Profesor Contratado Doctor	Química
Lorenzo Abades, Encarnación	Catedrática de Universidad	Química Analítica
Maestro Rubio, Carmen	Profesora Titular de Universidad	Química Orgánica
Marcos Laguna, María Luisa	Profesora Titular de Universidad	Química
Martín Castro, Ana M <sup>a</sup>	Profesor Titular de Universidad	Química Orgánica
Martínez Díaz, M <sup>a</sup> Victoria	Profesora Titular de Universidad	Química Orgánica
Mas Ballesté, Rubén	Profesor Contratado Doctor	Química Inorgánica
Mauleón Pérez, Pablo	Investigador Ramón y Cajal	Química Orgánica
Mo Romero, Otilia	Catedrática de Universidad	Química
Moreno Barahona, Consuelo	Profesora Titular de Universidad	Química Inorgánica
Pariente Alonso, Félix	Profesor Titular de Universidad	Química Analítica
Parra Sánchez, Alejandro	Ayudante Doctor	Química Orgánica
Ribagorda Lobera, María	Profesora Titular de Universidad	Química Orgánica
Rodríguez Fernández, Mercedes	Profesora Contratada Doctora	Química Orgánica
Rodríguez Garrido, Nuria	Investigadora Ramón y Cajal	Química Orgánica
Rodríguez Morgade, Salomé	Profesora Titular de Universidad	Química Orgánica
Rodríguez San Miguel, David	Ayudante	Química Inorgánica



Rodríguez Ubis, Juan Carlos	Catedrático de Universidad	Química Orgánica
Rumbero Sánchez, Ángel	Profesor Titular de Universidad	Química Orgánica
Tortosa Manzanares, Mariola	Investigadora Ramón y Cajal	Química Orgánica
Yáñez Montero, Manuel	Catedrático de Universidad	Química
Wang, Yang	Ayudante Doctor	Química
Zamora Abanades, Félix	Profesor Titular de Universidad	Química Inorgánica

/