



MEMORIA DE ACTIVIDADES 2021

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN AVANZADA EN CIENCIAS QUÍMICAS (IADCHEM)

FACULTAD DE CIENCIAS

UAM



Índice:

I. PUBLICACIONES

Artículos 2021 (111)	Pág. 3
Artículos por revista	Pág 13
Indicadores de calidad	Pág 13

II.PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN	Pág.14
-------------------------------	--------

III. TESIS DOCTORALES 2021	Pág.19
----------------------------	--------

IV. SEMINARIOS	Pág 20
----------------	--------

V. LISTADO DE INVESTIGADORES DOCTORES.	Pág 21
--	--------

I. PUBLICACIONES- 2021 (111)

- (1) Aguilar-Galindo, F.; Borisov, A. G.; Diaz-Tendero, S. Ultrafast Dynamics of Electronic Resonances in Molecules Adsorbed on Metal Surfaces: A Wave Packet Propagation Approach. *Journal of Chemical Theory and Computation* **2021**, *17* (2), 639-654. DOI: 10.1021/acs.jctc.0c01031.
- (2) Aguilar-Galindo, F.; Borisov, A. G.; Diaz-Tendero, S. Unveiling the anisotropic behavior of ultrafast electron transfer at the metal/organic interface. *Applied Surface Science* **2021**, *554*. DOI: 10.1016/j.apsusc.2021.149311.
- (3) Aguilar-Galindo, F.; Rodriguez, R. I.; Mollari, L.; Aleman, J.; Diaz-Tendero, S. Visible-Light Radical-Radical Coupling vs. Radical Addition: Disentangling a Mechanistic Knot. *Catalysts* **2021**, *11* (8). DOI: 10.3390/catal11080922.
- (4) Aleman, J.; Mas-Balleste, R. Photocatalytic Oxidation Reactions Mediated by Covalent Organic Frameworks and Related Extended Organic Materials. *Frontiers in Chemistry* **2021**, *9*. DOI: 10.3389/fchem.2021.708312.
- (5) Almeida-Marrero, V.; Mascaraque, M.; Jesus Vicente-Arana, M.; Juarranz, A.; Torres, T.; de la Escosura, A. Tuning the Nanoaggregates of Sialylated Biohybrid Photosensitizers for Intracellular Activation of the Photodynamic Response. *Chemistry-a European Journal* **2021**, *27* (37), 9634-9642. DOI: 10.1002/chem.202100681.
- (6) Alvaro-Martins, M. J.; Sanchez, J. G.; Lavarda, G.; Molina, D.; Pallares, J.; Torres, T.; Marsal, L. F.; Sastre-Santos, A. Subphthalocyanine-Diketopyrrolopyrrole Conjugates: 3D Star-Shaped Systems as Non-Fullerene Acceptors in Polymer Solar Cells with High Open-Circuit Voltage. *Chempluschem* **2021**, *86* (10), 1360-1361. DOI: 10.1002/cplu.202100316.
- (7) Ares, P.; Pakdel, S.; Palacio, I.; Paz, W. S.; Rassekh, M.; Rodriguez-San Miguel, D.; Aballe, L.; Foerster, M.; Ruiz del Arbol, N.; Angel Martin-Gago, J.; et al. Few-layer antimonene electrical properties. *Applied Materials Today* **2021**, *24*. DOI: 10.1016/j.apmt.2021.101132.
- (8) Ares, P.; Santos, H.; Lazic, S.; Gibaja, C.; Torres, I.; Pinilla, S.; Gomez-Herrero, J.; van der Meulen, H. P.; Garcia-Gonzalez, P.; Zamora, F. Direct Visualization and Effects of Atomic-Scale Defects on the Optoelectronic Properties of Hexagonal Boron Nitride. *Advanced Electronic Materials* **2021**, *7* (7). DOI: 10.1002/aelm.202001177.
- (9) Arqueros, C.; Zamora, F.; Montoro, C. A Perspective on the Application of Covalent Organic Frameworks for Detection and Water Treatment. *Nanomaterials* **2021**, *11* (7). DOI: 10.3390/nano11071651.
- (10) Asha, H.; Green, J. A.; Martinez-Fernandez, L.; Esposito, L.; Improta, R. Electronic Circular Dichroism Spectra of DNA Quadruple Helices Studied by Molecular Dynamics Simulations and Excitonic Calculations Including Charge Transfer States. *Molecules* **2021**, *26* (16). DOI: 10.3390/molecules26164789.
- (11) Balanikas, E.; Martinez-Fernandez, L.; Improta, R.; Podbevsek, P.; Baldacchino, G.; Markovitsi, D. The Structural Duality of Nucleobases in Guanine Quadruplexes Controls Their Low-Energy Photoionization. *Journal of Physical Chemistry Letters* **2021**, *12* (34), 8309-8313. DOI:

10.1021/acs.jpcllett.1c01846.

(12) Baptista, F. A.; Krizsan, D.; Stitch, M.; Sazanovich, I. V.; Clark, I. P.; Towrie, M.; Long, C.; Martinez-Fernandez, L.; Improta, R.; Kane-Maguire, N. A. P.; et al. Adenine Radical Cation Formation by a Ligand-Centered Excited State of an Intercalated Chromium Polypyridyl Complex Leads to Enhanced DNA Photo-oxidation. *Journal of the American Chemical Society* **2021**, *143* (36), 14766-14779. DOI: 10.1021/jacs.1c06658.

(13) Barreiro-Lage, D.; Bolognesi, P.; Chiarinelli, J.; Richter, R.; Zettergren, H.; Stockett, M. H.; Carlini, L.; Diaz-Tendero, S.; Avaldi, L. "Smart Decomposition" of Cyclic Alanine-Alanine Dipeptide by VUV Radiation: A Seed for the Synthesis of Biologically Relevant Species. *Journal of Physical Chemistry Letters* **2021**, *12* (30), 7379-7386. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.1c01788.

(14) Barreiro-Lage, D.; Nicolafrancesco, C.; Kocisek, J.; Luna, A.; Kopyra, J.; Alcamí, M.; Huber, B. A.; Martin, F.; Domaracka, A.; Rousseau, P.; et al. Controlling the diversity of ion-induced fragmentation pathways by N-methylation of amino acids. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2022**, *24* (2), 941-954. DOI: 10.1039/d1cp04097a.

(15) Barrio, J.; Barzilai, S.; Karjule, N.; Amo-Ochoa, P.; Zamora, F.; Shalom, M. Fluorescent Carbon Nitride Macrostructures Derived from Triazine-Based Cocrystals. *Advanced Optical Materials* **2021**, *9* (19). DOI: 10.1002/adom.202100683.

(16) Barzaga, R.; Leston-Sanchez, L.; Aguilar-Galindo, F.; Estevez-Hernandez, O.; Diaz-Tendero, S. Synergy Effects in Heavy Metal Ion Chelation with Aryl- and Aroyl-Substituted Thiourea Derivatives. *Inorganic Chemistry* **2021**, *60* (16), 11984-12000. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.1c01068.

(17) Bello, R. Y.; Martin, F.; Palacios, A. Attosecond laser control of photoelectron angular distributions in XUV-induced ionization of H-2. *Faraday Discussions* **2021**, *228*, 378-393. DOI: 10.1039/d0fd00114g.

(18) Blanco, M.; Cembellin, S.; Agnoli, S.; Aleman, J. Ruthenium-p-cymene Complex Side-Wall Covalently Bonded to Carbon Nanotubes as Efficient Hybrid Transfer Hydrogenation Catalyst. *Chemcatchem* **2021**, *13* (24), 5156-5165. DOI: 10.1002/cctc.202101442.

(19) Borzecka, W.; Pereira, P. M. R.; Fernandes, R.; Trindade, T.; Torres, T.; Tome, J. P. C. Encapsulation of glycosylated porphyrins in silica nanoparticles to enhance the efficacy of cancer photodynamic therapy. *Materials Advances* **2021**, *2* (5). DOI: 10.1039/d0ma00830c.

(20) Bottari, G.; de la Torre, G.; Guldi, D. M.; Torres, T. An exciting twenty-year journey exploring porphyrinoid-based photo- and electro-active systems. *Coordination Chemistry Reviews* **2021**, *428*. DOI: 10.1016/j.ccr.2020.213605.

(21) Bujalance, C.; Estesó, V.; Calio, L.; Lavarda, G.; Torres, T.; Feist, J.; Jose Garcia-Vidal, F.; Bottari, G.; Miguez, H. Ultrastrong Exciton-Photon Coupling in Broadband Solar Absorbers. *Journal of Physical Chemistry Letters* **2021**, *12* (43), 10706-10712. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.1c02898.

(22) Cardenas, G.; Perez-Barcia, A.; Mandado, M.; Nogueira, J. J. Characterization of cisplatin/membrane interactions by QM/MM energy decomposition analysis. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2021**, *23* (36), 20533-20540. DOI: 10.1039/d1cp03382d.

- (23) Cardenas, G.; Trentin, I.; Schwiedrzik, L.; Hernandez-Castillo, D.; Lowe, G. A.; Kund, J.; Kranz, C.; Klingler, S.; Stach, R.; Mizaikoff, B.; et al. Activation by oxidation and ligand exchange in a molecular manganese vanadium oxide water oxidation catalyst. *Chemical Science* **2021**, *12* (39), 12918-12927. DOI: 10.1039/d1sc03239a.
- (24) Casellas, N. M.; Albertazzi, L.; Pujals, S.; Torres, T.; Garcia-Iglesias, M. Unveiling Polymerization Mechanism in pH-regulated Supramolecular Fibers in Aqueous Media. *Chemistry-a European Journal* **2021**, *27* (43), 11056-11060. DOI: 10.1002/chem.202101660.
- (25) Casellas, N. M.; Dai, G.; Xue, E. Y.; Fonseca, A.; Ng, D. K. P.; Garcia-Iglesias, M.; Torres, T. A self-assembled subphthalocyanine-based nanophotosensitizer for photodynamic therapy. *Chemical Communications* **2021**. DOI: 10.1039/d1cc05977g.
- (26) Chamorro, P. B.; Aparicio, F.; Chamorro, R.; Bilbao, N.; Casado, S.; Gonzalez-Rodriguez, D. Exploring the tubular self-assembly landscape of dinucleobase amphiphiles in water. *Organic Chemistry Frontiers* **2021**, *8* (4), 686-696. DOI: 10.1039/d0qo01110j.
- (27) Corpas, J.; Mauleon, P.; Gomez Arrayas, R.; Carretero, J. C. Transition-Metal-Catalyzed Functionalization of Alkynes with Organoboron Reagents: New Trends, Mechanistic Insights, and Applications. *Acs Catalysis* **2021**, *11* (12), 7513-7551. DOI: 10.1021/acscatal.1c01421.
- (28) del Rio-Rodriguez, R.; Laina-Martin, V.; Fernandez-Salas, J. A.; Aleman, J. Enantioselective vinylogous Mukaiyama aldol reaction of alpha-ketoesters under bifunctional organocatalysis. *Chemical Communications* **2021**, *57* (88), 11665-11668. DOI: 10.1039/d1cc04263g.
- (29) Delgado, J.; Lara-Astiaso, M.; Gonzalez-Vazquez, J.; Decleva, P.; Palacios, A.; Martin, F. Molecular fragmentation as a way to reveal early electron dynamics induced by attosecond pulses. *Faraday Discussions* **2021**, *228*, 349-377. DOI: 10.1039/d0fd00121j.
- (30) Erdmann, E.; Aguirre, N. F.; Indrajith, S.; Chiarinelli, J.; Domaracka, A.; Rousseau, P.; Huber, B. A.; Bolognesi, P.; Richter, R.; Avaldi, L.; et al. A general approach to study molecular fragmentation and energy redistribution after an ionizing event. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2021**, *23* (3), 1859-1867. DOI: 10.1039/d0cp04890a.
- (31) Estes, V.; Calio, L.; Espinos, H.; Lavarda, G.; Torres, T.; Feist, J.; Garcia-Vidal, F. J.; Bottari, G.; Miguez, H. Light-Harvesting Properties of a Subphthalocyanine Solar Absorber Coupled to an Optical Cavity. *Solar Rrl* **2021**, *5* (8). DOI: 10.1002/solr.202100308.
- (32) Fabra, D.; Matesanz, A. I.; Herrero, J. M.; Alvarez, C.; Balsa, L. M.; Leon, I. E.; Quiroga, A. G. Two Different Thiosemicarbazone Tauto-Conformers Coordinate to Palladium (II). Stability and Biological Studies of the Final Complexes. *European Journal of Inorganic Chemistry* **2021**, *2021* (11), 1041-1049. DOI: 10.1002/ejic.202001066.
- (33) Ferreira, J. T.; Pina, J.; Ribeiro, C. A. F.; Fernandes, R.; Tome, J. P. C.; Torres, T.; Salome Rodriguez-Morgade, M. A ruthenium phthalocyanine functionalized with a folic acid unit as a photosensitizer for photodynamic therapy: Synthesis, characterization and in vitro evaluation. *Journal of Porphyrins and Phthalocyanines* **2021**, *25* (10N12), 1193-1202. DOI: 10.1142/s1088424621501224.

- (34) Franco, M.; Sainz, R.; Lamsabhi, A. M.; Diaz, C.; Tortosa, M.; Cid, M. B. Evaluation of the role of graphene-based Cu(i) catalysts in borylation reactions. *Catalysis Science & Technology* **2021**, *11* (10), 3501-3513. DOI: 10.1039/d1cy00104c.
- (35) Franco, M.; Vargas, E. L.; Tortosa, M.; Belen Cid, M. Coupling of thiols and aromatic halides promoted by diboron derived super electron donors. *Chemical Communications* **2021**, *57* (88), 11653-11656. DOI: 10.1039/d1cc05294b.
- (36) Gal, J.-F.; Maria, P.-C.; Yanez, M.; Mo, O. Enthalpies of Adduct Formation between Boron Trifluoride and Selected Organic Bases in Solution: Toward an Accurate Theoretical Entry to Lewis Basicity. *Molecules* **2021**, *26* (21). DOI: 10.3390/molecules26216659.
- (37) Gibaja, C.; Rodriguez-San-Miguel, D.; Paz, W. S.; Torres, I.; Salagre, E.; Segovia, P.; Michel, E. G.; Assebban, M.; Ares, P.; Hernandez-Maldonado, D.; et al. Exfoliation of Alpha-Germanium: A Covalent Diamond-Like Structure. *Advanced Materials* **2021**, *33* (10). DOI: 10.1002/adma.202006826.
- (38) Gonzalez-Munoz, D.; Martin-Somer, A.; Strobl, K.; Cabrera, S.; De Pablo, P. J.; Diaz-Tendero, S.; Blanco, M.; Aleman, J. Enhancing Visible-Light Photocatalysis via Endohedral Functionalization of Single-Walled Carbon Nanotubes with Organic Dyes. *Acs Applied Materials & Interfaces* **2021**, *13* (21), 24877-24886. DOI: 10.1021/acsami.1c04679.
- (39) Granato, A. S.; Amarante, G. W.; Adrio, J. Metal-Free Solvent Promoted Oxidation of Benzylic Secondary Amines to Nitrones with H₂O₂. *Journal of Organic Chemistry* **2021**, *86* (19), 13817-13823. DOI: 10.1021/acs.joc.1c01888.
- (40) Granato, A. S.; Carvalho, G. S. G. d.; Fonseca, C. G.; Adrio, J.; Leita, A. A.; Amarante, G. W. On the mixed oxides-supported niobium catalyst towards benzylamine oxidation. *Catalysis Today* **2021**, *381*, 118-125. DOI: 10.1016/j.cattod.2020.08.011.
- (41) Grifoni, F.; Bonomo, M.; Naim, W.; Barbero, N.; Alnasser, T.; Dzeba, I.; Giordano, M.; Tsaturyan, A.; Urbani, M.; Torres, T.; et al. Toward Sustainable, Colorless, and Transparent Photovoltaics: State of the Art and Perspectives for the Development of Selective Near-Infrared Dye-Sensitized Solar Cells. *Advanced Energy Materials* **2021**, *11* (43). DOI: 10.1002/aenm.202101598.
- (42) Guerra, C.; Kumar, S.; Aguilar-Galindo, F.; Diaz-Tendero, S.; Lozano, A. I.; Mendes, M.; Limao-Vieira, P.; Garcia, G. Unexpected benzene oxidation in collisions with superoxide anions. *Scientific Reports* **2021**, *11* (1). DOI: 10.1038/s41598-021-02408-7.
- (43) Guerrero-Corella, A.; Valle-Amores, M. A.; Fraile, A.; Aleman, J. Enantioselective Organocatalyzed aza-Michael Addition Reaction of 2-Hydroxybenzophenone Imines to Nitroolefins under Batch and Flow Conditions. *Advanced Synthesis & Catalysis* **2021**, *363* (15), 3845-3851. DOI: 10.1002/adsc.202100635.
- (44) Guerrero-Esteban, T.; Gutierrez-Sanchez, C.; Garcia-Mendiola, T.; Revenga-Parra, M.; Pariente, F.; Lorenzo, E. Bifunctional carbon nanodots for highly sensitive HER2 determination based on electrochemiluminescence. *Sensors and Actuators B-Chemical* **2021**, *343*. DOI: 10.1016/j.snb.2021.130096.
- (45) Guerrero-Esteban, T.; Gutierrez-Sanchez, C.; Martinez-Perinan, E.; Revenga-Parra, M.; Pariente, F.;

Lorenzo, E. Sensitive glyphosate electrochemiluminescence immunosensor based on electrografted carbon nanodots. *Sensors and Actuators B-Chemical* **2021**, 330. DOI: 10.1016/j.snb.2020.129389.

(46) Gutierrez-Galvez, L.; Garcia-Mendiola, T.; Gutierrez-Sanchez, C.; Guerrero-Esteban, T.; Garcia-Diego, C.; Buendia, I.; Laura Garcia-Bermejo, M.; Pariente, F.; Lorenzo, E. Carbon nanodot-based electrogenerated chemiluminescence biosensor for miRNA-21 detection. *Microchimica Acta* **2021**, 188 (11). DOI: 10.1007/s00604-021-05038-y.

(47) Guzel, E.; Medina, D.-P.; Medel, M.; Kandaz, M.; Torres, T.; Rodriguez-Morgade, M. S. A versatile, divergent route for the synthesis of ABAC tetraazaporphyrins: molecularly engineered, push-pull phthalocyanine-type dyes. *Journal of Materials Chemistry C* **2021**, 9 (33), 10802-10810. DOI: 10.1039/d1tc00990g.

(48) Halaskova, M.; Rahali, A.; Almeida-Marrero, V.; Machacek, M.; Kucera, R.; Jamoussi, B.; Torres, T.; Novakova, V.; de la Escosura, A.; Zimcik, P. Peripherally Crowded Cationic Phthalocyanines as Efficient Photosensitizers for Photodynamic Therapy. *ACS Medicinal Chemistry Letters* **2021**, 12 (3), 502-507. DOI: 10.1021/acsmchemlett.1c00045.

(49) I-Ting, T.; Montero-Campillo, M. M.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Yanez, M. Large Stabilization Effects by Intramolecular Beryllium Bonds in Ortho-Benzene Derivatives. *Molecules* **2021**, 26 (11). DOI: 10.3390/molecules26113401.

(50) Ibrahimova, V.; Gonzalez-Delgado, J. A.; Leveque, M.; Torres, T.; Garanger, E.; Lecommandoux, S. Photooxidation Responsive Elastin-Like Polypeptide Conjugates for Photodynamic Therapy Application. *Bioconjugate Chemistry* **2021**, 32 (8), 1719-1728. DOI: 10.1021/acs.bioconjchem.1c00251.

(51) Ince, M.; Kuboi, R.; Ince, T.; Yoshimura, K.; Motoyoshi, D.; Sonobe, M.; Kudo, R.; Mori, S.; Kimura, M.; Torres, T. The effect of bulky electron-donating thioether substituents on the performances of phthalocyanine based dye sensitized solar cells. *Sustainable Energy & Fuels* **2021**, 5 (2), 584-589. DOI: 10.1039/d0se01277g.

(52) Jimenez-Almarza, A.; Lopez-Magano, A.; Cano, R.; Ortin-Rubio, B.; Diaz-Garcia, D.; Gomez-Ruiz, S.; Imaz, I.; Maspoch, D.; Mas-Balleste, R.; Aleman, J. Engineering covalent organic frameworks in the modulation of photocatalytic degradation of pollutants under visible light conditions. *Materials Today Chemistry* **2021**, 22. DOI: 10.1016/j.mtchem.2021.100548.

(53) Kamel, E. M.; Lamsabhi, A. M. Water biocatalytic effect attenuates cytochrome P450-mediated carcinogenicity of diethylnitrosamine: A computational insight. *Organic & Biomolecular Chemistry* **2021**, 19 (41), 9031-9042. DOI: 10.1039/d1ob01439k.

(54) Kaur, K.; Humbrias-Martin, J.; Hoppmann, L.; Fernandez-Salas, J. A.; Daniliuc, C. G.; Aleman, J.; Garcia Mancheno, O. Enantioselective vinylogous-Mukaiyama-type dearomatisation by anion-binding catalysis. *Chemical Communications* **2021**, 57 (73), 9244-9247. DOI: 10.1039/d1cc03514b.

(55) Kim-Lee, S.-H.; Mauleon, P.; Gomez Arrayas, R.; Carretero, J. C. Dynamic multiligand catalysis: A polar to radical crossover strategy expands alkyne carboboration to unactivated secondary alkyl halides. *Chem* **2021**, 7 (8), 2212-2226. DOI: 10.1016/j.chempr.2021.06.002.

- (56) Labella, J.; Momblona, C.; Klipfel, N.; Kanda, H.; Kinge, S.; Nazeeruddin, M. K.; Torres, T. Subphthalocyanine-based electron-transport materials for perovskite solar cells. *Journal of Materials Chemistry C* **2021**, *9* (45), 16298-16303. DOI: 10.1039/d1tc02600c.
- (57) Laina-Martin, V.; Fernandez-Salas, J. A.; Aleman, J. Organocatalytic Strategies for the Development of the Enantioselective Inverse-electron-demand Hetero-Diels-Alder Reaction. *Chemistry-a European Journal* **2021**, *27* (49), 12509-12520. DOI: 10.1002/chem.202101696.
- (58) Laina-Martin, V.; Humbrias-Martin, J.; Mas-Balleste, R.; Fernandez-Salas, J. A.; Aleman, J. Enantioselective Inverse-Electron Demand Aza-Diels-Alder Reaction: ipso, α -Selectivity of Silyl Dienol Ethers. *Acs Catalysis* **2021**, *11* (19), 12133-12145. DOI: 10.1021/acscatal.1c03390.
- (59) Lamsabhi, A. M.; Mo, O.; Yanez, M. Perturbating Intramolecular Hydrogen Bonds through Substituent Effects or Non-Covalent Interactions. *Molecules* **2021**, *26* (12). DOI: 10.3390/molecules26123556.
- (60) Lazaro-Milla, C.; Quiros, M. T.; Cardenas, D. J.; Almendros, P. Pd-catalyzed C(sp³)-C(sp) bond formation in iodocyclobutenes. *Chemical Communications* **2021**, *57* (68), 8456-8459. DOI: 10.1039/d1cc03087f.
- (61) Lopez, J.; Gonzalez Platas, J.; Ruyman Rodriguez-Mendoza, U.; Martinez, J. I.; Delgado, S.; Lifante-Pedrola, G.; Cantelar, E.; Guerrero-Lemus, R.; Hernandez-Rodriguez, C.; Amo-Ochoa, P. Cu(I)-1,2,4-diaminopyrimidine Coordination Polymers with Optoelectronic Properties as a Proof of Concept for Solar Cells. *Inorganic Chemistry* **2021**, *60* (2), 1209-1220. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.0c03347.
- (62) Lopez, J.; Murillo, M.; Lifante-Pedrola, G.; Cantelar, E.; Gonzalez-Platas, J.; Rodriguez-Mendoza, U. R.; Amo-Ochoa, P. Multi-stimulus semiconductor Cu(i)-1-pyrimidine coordination polymer with thermo- and mechanochromic sensing. *Crystengcomm* **2022**, *24* (2), 341-349. DOI: 10.1039/d1ce01315g.
- (63) Lopez-Magano, A.; Mas-Balleste, R.; Aleman, J. Predesigned Covalent Organic Frameworks as Effective Platforms for Pd(II) Coordination Enabling Cross-Coupling Reactions under Sustainable Conditions. *Advanced Sustainable Systems* **2021**. DOI: 10.1002/adsu.202100409.
- (64) Lopez-Magano, A.; Ortin-Rubio, B.; Imaz, I.; Maspoch, D.; Aleman, J.; Mas-Balleste, R. Photoredox Heterobimetallic Dual Catalysis Using Engineered Covalent Organic Frameworks. *Acs Catalysis* **2021**, *11* (19), 12344-12354. DOI: 10.1021/acscatal.1c03634.
- (65) Maldonado, N.; Amo-Ochoa, P. Advances and Novel Perspectives on Colloids, Hydrogels, and Aerogels Based on Coordination Bonds with Biological Interest Ligands. *Nanomaterials* **2021**, *11* (7). DOI: 10.3390/nano11071865.
- (66) Maldonado, N.; Amo-Ochoa, P. The role of coordination compounds in virus research. Different approaches and trends. *Dalton Transactions* **2021**, *50* (7), 2310-2323. DOI: 10.1039/d0dt04066e.
- (67) Martin-Arroyo, M.; Castells-Gil, J.; Bilbao, N.; Almora-Barrios, N.; Marti-Gastaldo, C.; Gonzalez-Rodriguez, D. Crystalline supramolecular organic frameworks via hydrogen-bonding between nucleobases. *Chemical Communications* **2021**, *57* (13), 1659-1662. DOI: 10.1039/d0cc07707k.

- (68) Martin-Illan, J. A.; Rodriguez-San-Miguel, D.; Castillo, O.; Beobide, G.; Perez-Carvajal, J.; Imaz, I.; Maspoch, D.; Zamora, F. Macroscopic Ultralight Aerogel Monoliths of Imine-based Covalent Organic Frameworks. *Angewandte Chemie-International Edition* **2021**, *60* (25), 13969-13977. DOI: 10.1002/anie.202100881.
- (69) Martinez Mingo, M.; Rodriguez, N.; Gomez Arrayas, R.; Carretero, J. C. Remote C(sp³)-H functionalization via catalytic cyclometallation: beyond five-membered ring metallacycle intermediates. *Organic Chemistry Frontiers* **2021**, *8* (17), 4914-4946. DOI: 10.1039/d1qo00389e.
- (70) Martinez-Edo, G.; Xue, E. Y.; Ha, S. Y. Y.; Ponton, I.; Antonio Gonzalez-Delgado, J.; Borros, S.; Torres, T.; Ng, D. K. P.; Sanchez-Garcia, D. Nanoparticles for Triple Drug Release for Combined Chemo- and Photodynamic Therapy. *Chemistry-a European Journal* **2021**, *27* (59), 14610-14618. DOI: 10.1002/chem.202101842.
- (71) Martinez-Gualda, A. M.; Domingo-Legarda, P.; Rigotti, T.; Diaz-Tendero, S.; Fraile, A.; Aleman, J. Asymmetric 2+2 photocycloaddition via charge transfer complex for the synthesis of tricyclic chiral ethers. *Chemical Communications* **2021**, *57* (24), 3046-3049. DOI: 10.1039/d1cc00035g.
- (72) Martinez-Mingo, M.; Alonso, I.; Rodriguez, N.; Gomez Arrayas, R.; Carretero, J. C. Mechanistic understanding enables chemoselective sp³ over sp² C-H activation in Pd-catalyzed carbonylative cyclization of amino acids. *Catalysis Science & Technology* **2021**, *11* (4), 1590-1601. DOI: 10.1039/d0cy02328k.
- (73) Martinez-Mingo, M.; Garcia-Viada, A.; Alonso, I.; Rodriguez, N.; Arrayas, R. G.; Carretero, J. C. Overcoming the Necessity of gamma-Substitution in (delta-C(sp³))-H Arylation: Pd-Catalyzed Derivatization of alpha-Amino Acids. *Acs Catalysis* **2021**, *11* (9), 5310-5317. DOI: 10.1021/acscatal.1c00250.
- (74) Martinez-Perinan, E.; Garcia-Mendiola, T.; Enebral-Romero, E.; del Cano, R.; Vera-Hidalgo, M.; Vazquez Sulleiro, M.; Navio, C.; Pariente, F.; Perez, E. M.; Lorenzo, E. A MoS₂ platform and thionine-carbon nanodots for sensitive and selective detection of pathogens. *Biosensors & Bioelectronics* **2021**, *189*. DOI: 10.1016/j.bios.2021.113375.
- (75) Martini, L.; Boll, D. I. R.; Palacios, A.; Fojon, O. A. Different approximations in the polarization control of two-color water molecule ionization. *Journal of Physics B-Atomic Molecular and Optical Physics* **2021**, *54* (13). DOI: 10.1088/1361-6455/abfc67.
- (76) Mateo, L. M.; Sagresti, L.; Luo, Y.; Guldi, D. M.; Torres, T.; Brancato, G.; Bottari, G. Expanding the Chemical Space of Tetracyanobuta-1,3-diene (TCBD) through a Cyano-Diels-Alder Reaction: Synthesis, Structure, and Physicochemical Properties of an Anthryl-fused-TCBD Derivative. *Chemistry-a European Journal* **2021**, *27* (64), 16049-16055. DOI: 10.1002/chem.202103079.
- (77) Mateo, L. M.; Sun, Q.; Eimre, K.; Pignedoli, C. A.; Torres, T.; Fasel, R.; Bottari, G. On-surface synthesis of singly and doubly porphyrin-capped graphene nanoribbon segments. *Chemical Science* **2021**, *12* (1), 247-252. DOI: 10.1039/d0sc04316h.
- (78) Matesanz, A. I.; Herrero, J. M.; Quiroga, A. G. Chemical and Biological Evaluation of

Thiosemicarbazone-Bearing Heterocyclic Metal Complexes. *Current Topics in Medicinal Chemistry* **2021**, *21* (1), 59-72. DOI: 10.2174/1568026620666201022144004.

(79) Merced Montero-Campillo, M.; Alkorta, I.; Mo, O.; Elguero, J.; Yanez, M. Clustering of Electron Deficient B- and Be-Containing Analogues: In the Fight for Tetracoordination, Beryllium Takes the Lead. *European Journal of Inorganic Chemistry* **2021**, *2021* (42), 4393-4401. DOI: 10.1002/ejic.202100737.

(80) Mishra, D.; Reino-Gonzalez, J.; Obaid, R.; LaForge, A. C.; Diaz-Tendero, S.; Martin, F.; Berrah, N. Ultrafast molecular dynamics in ionized 1-and 2-propanol: from simple fragmentation to complex isomerization and roaming mechanisms. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2021**, *24* (1), 433-443. DOI: 10.1039/d1cp04011a.

(81) Nazarov, D. I.; Islyaikin, M. K.; Ivanov, E. N.; Koifman, O. I.; Batov, M. S.; Zorina, L. V.; Khasanov, S. S.; Shestakov, A. F.; Yudanova, E. I.; Zhabanov, Y. A.; et al. Dianionic States of Trithiadodecaazahexaphyrin Complexes with Homotrinary (M3O)-O-II Clusters (M = Ni and Cu): Crystal Structures, Metal- Or Macrocyclic-Centered Reduction, and Doublet-Quartet Transitions in the Dianions. *Inorganic Chemistry* **2021**, *60* (13), 9857-9868. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.1c01132.

(82) Novoa, L.; Trulli, L.; Fernandez, I.; Parra, A.; Tortosa, M. Regioselective Monoborylation of Spirocyclobutenes. *Organic Letters* **2021**, *23* (19), 7434-7438. DOI: 10.1021/acs.orglett.1c02645.

(83) Novoa, L.; Trulli, L.; Parra, A.; Tortosa, M. Stereoselective Diboration of Spirocyclobutenes: A Platform for the Synthesis of Spirocycles with Orthogonal Exit Vectors. *Angewandte Chemie-International Edition* **2021**, *60* (21), 11763-11768. DOI: 10.1002/anie.202101445.

(84) Ota, F.; Abe, S.; Hatada, K.; Ueda, K.; Diaz-Tendero, S.; Martin, F. Imaging intramolecular hydrogen migration with time- and momentum-resolved photoelectron diffraction. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2021**, *23* (36), 20174-20182. DOI: 10.1039/d1cp02055b.

(85) Palmisano, V. F.; Gomez-Rodellar, C.; Pollak, H.; Cardenas, G.; Corry, B.; Faraji, S.; Nogueira, J. J. Binding of azobenzene and p-diaminoazobenzene to the human voltage-gated sodium channel Na(v)1.4. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2021**, *23* (5), 3552-3564. DOI: 10.1039/d0cp06140a.

(86) Paramio, I.; Torres, T.; de la Torre, G. Self-Assembled Porphyrinoids: One-Component Nanostructured Photomedicines. *Chemmedchem* **2021**, *16* (16), 2441-2451. DOI: 10.1002/cmdc.202100201.

(87) Pascual-Escudero, A.; Ortiz-Rojano, L.; Simon-Fuente, S.; Adrio, J.; Ribagorda, M. Aldehydes as Photoremovable Directing Groups: Synthesis of Pyrazoles by a Photocatalyzed 3+2 Cycloaddition/Norrish Type Fragmentation Sequence. *Organic Letters* **2021**, *23* (12), 4903-4908. DOI: 10.1021/acs.orglett.1c01665.

(88) Pizarra, M.; Diaz, C.; Martin, F. Theoretical study of structural and electronic properties of 2H-phase transition metal dichalcogenides. *Physical Review B* **2021**, *103* (19). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.195416.

(89) Pla, P.; Dubosq, C.; Rapacioli, M.; Posenitskiy, E.; Alcami, M.; Simon, A. Hydrogenation of C-24 Carbon Clusters: Structural Diversity and Energetic Properties. *Journal of Physical Chemistry A* **2021**, *125* (24), 5273-5288. DOI: 10.1021/acs.jpca.1c02359.

- (90) Quiros, M. T.; Collado-Sanz, D.; Bunuel, E.; Cardenas, D. J. On the mechanism of the formation of alkyl-Ni(i) catalysts. *Chemical Communications* **2021**, 57 (19), 2424-2427. DOI: 10.1039/d1cc00203a.
- (91) Rahali, A.; Shaukat, A.; Almeida-Marrero, V.; Jamoussi, B.; de la Escosura, A.; Torres, T.; Kostianen, M. A.; Anaya-Plaza, E. A Janus-Type Phthalocyanine for the Assembly of Photoactive DNA Origami Coatings. *Bioconjugate Chemistry* **2021**, 32 (6), 1123-1129. DOI: 10.1021/acs.bioconjchem.1c00176.
- (92) Revuelta-Maza, M. A.; de las Heras, E.; Agut, M.; Nonell, S.; Torres, T.; de la Torre, G. Self-Assembled Binaphthyl-Bridged Amphiphilic AABB Phthalocyanines: Nanostructures for Efficient Antimicrobial Photodynamic Therapy. *Chemistry-a European Journal* **2021**, 27 (15), 4955-4963. DOI: 10.1002/chem.202005060.
- (93) Romeo-Gella, F.; Corral, I.; Faraji, S. Theoretical investigation of a novel xylene-based light-driven unidirectional molecular motor. *Journal of Chemical Physics* **2021**, 154 (6). DOI: 10.1063/5.0038281.
- (94) Romeo-Gella, F.; Arpa, E. M.; Corral, I. A molecular insight into the photophysics of barbituric acid, a candidate for canonical nucleobases' ancestor. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2021**. DOI: 10.1039/d1cp04987a.
- (95) Rousseau, P.; Gonzalez-Vazquez, J.; Piekarski, D. G.; Kopyra, J.; Domaracka, A.; Alcamí, M.; Adoui, L.; Huber, B. A.; Diaz-Tendero, S.; Martin, F. Timing of charge migration in betaine by impact of fast atomic ions. *Science Advances* **2021**, 7 (40). DOI: 10.1126/sciadv.abg9080.
- (96) Ruano, L.; Cardenas, G.; Nogueira, J. J. The Permeation Mechanism of Cisplatin through a Dioleoylphosphocholine Bilayer**. *Chemphyschem* **2021**, 22 (12), 1251-1261. DOI: 10.1002/cphc.202100059.
- (97) Santoro, F.; Green, J. A.; Martinez-Fernandez, L.; Cerezo, J.; Improta, R. Quantum and semiclassical dynamical studies of nonadiabatic processes in solution: achievements and perspectives. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2021**, 23 (14), 8181-8199. DOI: 10.1039/d0cp05907b.
- (98) Sicignano, M.; Rodriguez, R. I.; Aleman, J. Recent Visible Light and Metal Free Strategies in 2+2 and 4+2 Photocycloadditions. *European Journal of Organic Chemistry* **2021**, 2021 (22), 3303-3321. DOI: 10.1002/ejoc.202100518.
- (99) Sopena, A.; Bachau, H.; Catoire, F.; Martin, F.; Palacios, A. Selecting two-photon sequential ionization pathways in H-2 through harmonic filtering. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2021**, 23 (39), 22395-22403. DOI: 10.1039/d1cp03449a.
- (100) Sopena, A.; Palacios, A.; Catoire, F.; Bachau, H.; Martin, F. Angle-dependent interferences in electron emission accompanying stimulated Compton scattering from molecules. *Communications Physics* **2021**, 4 (1). DOI: 10.1038/s42005-021-00749-3.
- (101) Sun, Q.; Mateo, L. M.; Robles, R.; Lorente, N.; Ruffieux, P.; Bottari, G.; Torres, T.; Fasel, R. Bottom-up Fabrication and Atomic-Scale Characterization of Triply Linked, Laterally pi-Extended Porphyrin Nanotapes**. *Angewandte Chemie-International Edition* **2021**, 60 (29), 16208-16214. DOI: 10.1002/anie.202105350.

- (102) Szabo, P. B.; Sabanes Zariquiey, F.; Nogueira, J. J. Cosolvent and Dynamic Effects in Binding Pocket Search by Docking Simulations. *Journal of chemical information and modeling* **2021**, *61* (11), 5508-5523. DOI: 10.1021/acs.jcim.1c00924.
- (103) Tejerina, L.; Labella, J.; Martinez-Fernandez, L.; Corral, I.; Victoria Martinez-Diaz, M.; Torres, T. Subphthalocyaninato Boron(III) Hydride: Synthesis, Structure and Reactivity. *Chemistry-a European Journal* **2021**, *27* (47), 12058-12062. DOI: 10.1002/chem.202101991.
- (104) Teresa Gonzalez, M.; Ismael, A. K.; Garcia-Iglesias, M.; Leary, E.; Rubio-Bollinger, G.; Grace, I.; Gonzalez-Rodriguez, D.; Torres, T.; Lambert, C. J.; Agrait, N. Interference Controls Conductance in Phthalocyanine Molecular Junctions. *Journal of Physical Chemistry C* **2021**, *125* (27), 15035-15043. DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c03290.
- (105) Torres, I.; Alcaraz, M.; Sanchis-Gual, R.; Carrasco, J. A.; Fickert, M.; Assebhan, M.; Gibaja, C.; Dolle, C.; Aldave, D. A.; Gomez-Navarro, C.; et al. Continuous-Flow Synthesis of High-Quality Few-Layer Antimonene Hexagons. *Advanced Functional Materials* **2021**, *31* (28). DOI: 10.1002/adfm.202101616.
- (106) Vazquez-Gonzalez, V.; Mayoral, M. J.; Aparicio, F.; Martinez-Arjona, P.; Gonzalez-Rodriguez, D. The Role of Peripheral Amide Groups as Hydrogen-Bonding Directors in the Tubular Self-Assembly of Dinucleobase Monomers. *Chempluschem* **2021**, *86* (8), 1087-1096. DOI: 10.1002/cplu.202100255.
- (107) Villa-Manso, A. M.; Revenga-Parra, M.; Vera-Hidalgo, M.; Vazquez Sulleiro, M.; Perez, E. M.; Lorenzo, E.; Pariente, F. 2D MoS₂ nanosheets and hematein complexes deposited on screen-printed graphene electrodes as an efficient electrocatalytic sensor for detecting hydrazine. *Sensors and Actuators B-Chemical* **2021**, *345*. DOI: 10.1016/j.snb.2021.130385.
- (108) Vos, E.; Corral, I.; Montero-Campillo, M. M.; Mo, O. Significant bonding rearrangements triggered by Mg-4 clusters. *Journal of Chemical Physics* **2021**, *154* (4). DOI: 10.1063/5.0038047.
- (109) Vos, E.; Corral, I.; Montero-Campillo, M. M.; Mo, O.; Elguero, J.; Alkorta, I.; Yanez, M. Spontaneous bond dissociation cascades induced by Be-n clusters (n=2,4). *Physical Chemistry Chemical Physics* **2021**, *23* (11), 6448-6454. DOI: 10.1039/d0cp06009g.
- (110) Wang, X.; Martinez-Fernandez, L.; Zhang, Y.; Zhang, K.; Improta, R.; Kohler, B.; Xu, J.; Chen, J. Solvent-Dependent Stabilization of a Charge Transfer State is the Key to Ultrafast Triplet State Formation in an Epigenetic DNA Nucleoside. *Chemistry-a European Journal* **2021**, *27* (42), 10932-10940. DOI: 10.1002/chem.202100787.
- (111) Zettergren, H.; Domaracka, A.; Schlathoelter, T.; Bolognesi, P.; Diaz-Tendero, S.; Labuda, M.; Tomic, S.; Maclot, S.; Johnsson, P.; Steber, A.; et al. Roadmap on dynamics of molecules and clusters in the gas phase. *European Physical Journal D* **2021**, *75* (5). DOI: 10.1140/epjd/s10053-021-00155-y.

Artículos por revista y cuartil

CHEMISTRY A EUROPEAN JOURNAL	9	Q1
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	7	Q1
CHEMICAL COMMUNICATIONS	7	Q1
ANGEWANDTE CHEMIE INTERNATIONAL ED IN ENGLISH	5	Q1
ACS CATALYSIS	4	Q1
MOLECULES	4	Q1
INORGANIC CHEMISTRY	3	Q1
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS	3	Q1
SENSORS AND ACTUATORS B CHEMICAL	3	Q1
BIOCONJUGATE CHEMISTRY	2	Q1
CATALYSTS	2	Q3
CATALYSIS SCIENCE TECHNOLOGY	2	Q1
CHEMICAL SCIENCE	2	Q1
CHEMPLUSCHEM	2	Q1
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY	2	Q2
FARADAY DISCUSSIONS	2	Q1
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS	2	Q1
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY C	2	Q1
NANOMATERIALS	2	Q1
ORGANIC CHEMISTRY FRONTIERS	2	Q1
ORGANIC LETTERS	2	Q1
ACS APPLIED MATERIALS INTERFACES	1	Q1
ACS MEDICINAL CHEMISTRY LETTERS	1	Q1
ACS PHOTONICS	1	Q1
ADVANCED ELECTRONIC MATERIALS	1	Q1
ADVANCED ENERGY MATERIALS	1	Q1
ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS	1	Q1
ADVANCED MATERIALS	1	Q1
ADVANCED OPTICAL MATERIALS	1	Q1
ADVANCED SUSTAINABLE SYSTEMS	1	Q1
ADV SYNTH CATAL	1	Q1
APPLIED MATERIALS TODAY	1	Q1
APPLIED SURFACE SCIENCE	1	Q1
BIOSENSORS BIOELECTRONICS	1	Q1
CATALYSIS TODAY	1	Q1
CHEM	1	Q1
CHEMICAL RECORD	1	Q1
CHEMCATCHEM	1	Q1
CHEMMEDCHEM	1	Q2
CHEMPHYSICHEM	1	Q1
COMMUNICATIONS PHYSICS	1	Q1
COORDINATION CHEMISTRY REVIEWS	1	Q1
CRYSTENGCOMM	1	Q1

CURRENT TOPICS IN MEDICINAL CHEMISTRY	1	Q2
DALTON TRANSACTIONS	1	Q1
EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY	1	Q2
EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL D	1	Q3
JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND MODELING	1	Q1
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION	1	Q1
JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY	1	Q1
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A	1	Q2
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C	1	Q1
JOURNAL OF PHYSICS B ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS	1	Q2
JOURNAL OF PORPHYRINS AND PHTHALOCYANINES	1	Q3
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY	1	Q1
MATERIALS TODAY CHEMISTRY	1	Q1
ORGANIC BIOMOLECULAR CHEMISTRY	1	Q1
NANORESEARCH	1	Q1
NANOMATERIALS	1	Q1
SCIENCE ADVANCES	1	Q1
SCIENTIFIC REPORTS	1	Q1
SOLAR RRL	1	Q1
SUSTAINABLE ENERGY FUELS	1	Q1

Indicadores de calidad (Scimago Journal & Country Rank)

111 publications

121 Citations

102 Q1, 91%

II.PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Proyectos activos (2021)

Plan Nacional

1. Título: “Fármacos metálicos con estructuras alternativas para explorar su potencial en química biológica e inducir daño mitocondrial y específico en células cancerígenas”.
Entidad financiadora: MINECO PID2019-106220RB-I00. Entidad: Universidad Autónoma de Madrid. Duración: 2019-2023. Cuantía: 96800€. Investigador responsable: **Adoración Gómez Quiroga e Isabel Sánchez Pérez**.
2. Título: Emergence of Cell-Like Behaviour from Constitutional Dynamic Chemistry: Toward Biologically Inspired Autonomous Functional Systems. *ENTIDAD FINANCIADORA:* MINECO *Ref.:* CTQ2017-89539-P. *DURACION DESDE:* 01/01/2018*HASTA:* 31/12/2021 *CUANTÍA:* 61.710 € + beca FPI, *INVESTIGADOR PRINCIPAL:* **Andrés de la Escosura**

3. Título: Compuestos bioactivos mediante des aromatización oxidante de fenoles y ferrocenos aromáticos orto-condensados con quiralidad planar: propiedades y aplicaciones. Ref.: CTQ2017-83309-P. MINISTERIO DE ECONOMÍA, INDUSTRIA Y COMPETITIVIDAD. INVESTIGADOR PRINCIPAL: **Antonio Urbano**. DESDE: 12/2019 HASTA: 12/2021 Cuantía 65.000
4. Título: Novel catalytic methods for carbon-boron bond formation and carbon-nitrogen bond cleavage (PID2019-107380GB-I00) Funding Agency: MINECO (181.500 EUR) From: 01-06-2020 to: 31-05-2023. Principal Investigators: **Prof. Mariola Tortosa and Prof. Alejandro Parra**
5. Título: Controlando procesos organocatalíticos y fotocatalíticos asimétricos para la síntesis de moléculas orgánicas (RTI2018-095038-B-I00). Ministerio de ciencia, innovación y universidades. Investigador responsable: **Jose Alemán** (302.500 €). 01/01/2019 – 31/12/2021
6. Título: Diseño de materiales 2d para aplicaciones de energía: membranas y baterías (PID2019-106268GB-C32). Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid Duración, desde: 2020 hasta: 2023 Investigador responsable: **Félix Zamora Abanades** (Investigador Principal) Número de investigadores participantes: 8. Cantidad subvencionada al subproyecto: 157.300 €.
7. Título: Nuevas plataformas biosensoras basadas en materiales de baja dimensionalidad. Aplicación a la detección de biomarcadores de cáncer de mama. Financiado: Ministerio de Ciencia e Innovación Duración: 2018-2021 P: **Dr. Encarnación Lorenzo Abad y Dr. Félix Pariente Alonso**. Cuantía de la subvención: 137.940,00€.
8. Título: catálisis con metales de la primera serie de transición: una oportunidad para desarrollar nuevos mecanismos de activación en reacciones útiles en síntesis” PID2019-109088GB-I00. Investigador principal: **Cardenas Morales, Diego Jesus** Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades. Fecha de inicio-fin: 01/06/2020 - 31/05/2023 210.000 euros
9. Título: “Ftalocianinas y Compuestos Relacionados: Sistemas Multicomponente, Química en Superficies, y Aplicaciones en Fotovoltaica Molecular y Terapia Fotodinamica” (Phthalophoto) entidad financiadora: ministerio de economía y competitividad (mineco), CTQ2017-85393-P. Investigador principal **Tomás Torres**, duracion desde: 2018 HASTA: 2021. 369.050 Euros
10. Título Efficient processes in metallic catalysis towards the generation of structural and stereochemical complexity (EFICATMET) PGC2018-098660-B-I00 Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades. Fecha de inicio-fin: 01/06/2019 - 31/05/2022. **IP1: Juan Carlos Carretero**. **IP2: Ramón Gómez Arrayás**. 380.953 €.
11. Título: photo and bioactive compounds, molecular switches and luminescent upconversion nanoparticles. Entidad financiadora: mec, ctq2017-85454-c2-2-p. duración desde: enero 2018 HASTA: Junio 2021. Cuantía de la subvención: 82.280 € investigador responsable: **María Ribagorda**

12. Título: Flujo de Carga y Energía en Procesos Químicos Complejos”
Funding agency: Spanish Ministerio de Ciencia e Innovación
Duración: 2020-2023. Research Project ID: PID2019-110091GB-I00
Principal Investigators: **Manuel Alcamí and Sergio Díaz-Tendero**. 130.000 euros
13. Título: Extendiendo los límites de la Física de los Attosegundos: Visualización y control de procesos de transferencia electrónica en sistemas de interés químico y biológico.
Ref. PID2019-105458RB-I00 Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación
Duración: 2020-2023. Financiación concedida: 194.000,00 €
Investigador Principal: **Alicia Palacios Cañas y Fernando Martín García**
14. Título: Descripción teórica precisa de procesos elementales moléculasuperficie relevantes para el desarrollo de nuevos materiales y nanodispositivos Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación Duración: 2020-2023. IP: Cristina Díaz Blanco Co-IP: **Jesús González Vázquez** Financiación: 65.340 €
15. Título: Nanosistemas auto-ensamblados multifuncionales para aplicaciones fototeranósticas síntesis y caracterización supramolecular (pid2020-115801rb-c21).
Entidad financiadora: MICINN. Duración: del 1-09-2021 al 31-08-2024 investigador principal: **Gema de la Torre**. Financiación: 121.00 euros €.
16. Título: Novel Functional Systems and Materials from Molecular Self-Assembly (FunAssembly) MICINN, Proyectos de Investigación Fundamental – Excelencia PID2020-116921GB-I00. PI: **David González Rodríguez**. Duración: 01/01/2021 – 31/12/2023. Financiación: 217.800 €
17. Título: *A Molecular Synthetic Nanorobot that Mimics Primary Virus Actions* (MolBot) **MICINN, Proyectos de Investigación Fundamental – JIQ** PID2020-116112RJ-I00 Investigador responsable: **Fatima Aparicio Hernández** 01/09/2021 – 31/08/2024. Financiación: 169.400 €
18. Título: Sistema Experto de Predicción del Impacto Ambiental de Pesticidas (SEPIA) Ministerio de Ciencia e Innovación. Prueba de Concepto PDC2021-121203-I00. DURACION DESDE: 1/12/2021 HASTA: 31/11/2023. PRESUPUESTO: 92.000 € INVESTIGADOR PRINCIPAL: **M. Alcamí**

Proyectos Europeos

- 1 Título: Design and Applications of Unconventional Borylation Reactions (**ERC-Stg**)
Funding Agency: European Research Council (1.495.200 EUR) From: 01-02-2015 To: 31-12-2020. Principal Investigator: **Prof. Mariola Tortosa**.
- 2 Título: Selective Pathways for Carbon-Nitrogen Bond Cleavage (**ERC-Consolidator Grant**)
Funding Agency: European Research Council (2.000.000 EUR) **From:** 01-09-2021 **To:** 31-08-2026. Principal Investigator: **Prof. Mariola Tortosa**.
3. Título: Unconventional bifunctional Catalysts”. ERC-2014-Consolidator Grant (1.987.750 €). Principal Investigator: **José Alemán**
4. Photocatalytic materials in flow chemistry. PhotMatFlow”. Proyecto ERC (proof of Concept) (150.000 €). Principal Investigator: **José Alemán**.
- 5 Título: Self-assembled Tubular Nanostructures with Functional Pores (793506_NanoSpace) Marie Skłodowska-Curie Individual Fellowships: H2020-MSCA-IF-

2017 PI: **David González Rodríguez**, Fátima Aparicio 01/09/2019 – 31/08/2021.
170.122 €

- 6 Título: Enhancing Self-Healing Properties in Polymer Materials through Cooperative Supramolecular Interactions (843090-CoopHeal) Marie Skłodowska-Curie Individual Fellowships: H2020-MSCA-IF-2018 PI: **David González Rodríguez**, Anselmo del Prado 01/09/2019 – 31/08/2021 160.932 €
- 7 Título: "Carbon Based Perovskite Solar Cells with UNI-Directional Electron Bulk Transport: in the QUEst of a Short Time to Market" (UNIQUE)/ ENTIDAD FINANCIADORA: Solar ERA-NET/Cofund 2 Joint Call for the Solar Power Industry, Research and Innovation/Cofund scheme of the Horizon 2020 Research and Innovation Framework Programme of the European Commission /MINECO. Topic B – Emerging PV technologies. Joint Transnational Call For Proposals (2019)/PCI2019. PI: **Torres Tomás** DURACION: Desde: 2019 Hasta: 2022. 148.000 Euros
- 8 Título: "Temperature responsive polypeptide nanocarriers for abdominal therapies" (TEMPEAT)/ Nanotransportadores polipeptídicos sensibles a la temperatura para terapias abdominales (TEMPEAT) ENTIDAD FINANCIADORA: EuroNanoMed III/ERA-NET/Cofund scheme of the Horizon 2020 Research and Innovation Framework Programme of the European Commission/MINECO Joint Transnational Call For Proposals (2017) for "European Innovative Research & Technological Development Projects in Nanomedicine", Reference: EuroNanoMed2017-191/ PCIN-2017-042 DURACION: Desde: 2017 Hasta: 2021. 138.000 Euros. PI: **Torres Tomás**
- 9 *Nanostructured Supramolecular Polymers with Allosterically Regulated Catalytic Interstices Marie Skłodowska-Curie Individual Fellowships -2019 MSCA-IF 897507_SupAlloCat* PI: David González Rodríguez, Alberto de Juan 01/12/2021 30/11/2023. 160.932 €
- 10 *Analysis of the Market Possibilities of Novel Self-Healing Plastic Coatings (HealCoat)* **MICINN, Proyectos de Prueba de Concepto** PDC2021-121487-I00 PI: David González Rodríguez 01/12/2021 – 30/11/2023. 132.250 €
11. Complex Reaction Networks for Breakthrough Scalable Reservoir Computing ENTIDAD FINANCIADORA: Unión Europea Ref.: HORIZON-EIC-2021-PATHFINDER-101046294-CORENET. DURACIÓN DESDE: 04/2022 HASTA: 03/2023 CUANTÍA: 594.625 € (3.057.375 € a la red). COORDINADOR DE LA RED: Andrés de la Escosura INVESTIGADOR PRINCIPAL POR LA UAM: Andrés de la Escosura.

Acciones COST

12. Título: Attosecond Chemistry. COST Action 18222
Entidad Financiadora: European Science Foundation (ESF)
Action Chair and Vicechair: Fernando Martín y Francesca Calegari
Duración:2019-2023. Alicia Palacios Managment Committee

- 13 Título: Molecular Dynamics in the GAS pase CA18212 (Chair Henning Zettergren) **Sergio Díaz-Tendero** Working Group leader Manuel Alcamí Management Commiitee
Entidad Financiadora: European Science Foundation (ESF)
Action, Duración:2019-2023

Comunidad de Madrid

1. Título : Desarrollo de Foto-cartuchos y –micro-reactores con Sílice Nano-estructurada Aplicados Química de Flujo para Escala Industrial” (IND2019/AMB-17142). Proyecto CAM-Industrial (150.000 €) IP **José Aleman**.
2. Título : Nueva generación de materiales multifuncionales para fotosíntesis artificial (FotoArt-CM) (P2018/NMT-4367)”. Comunidad Autónoma de Madrid (1.083.374,00 €). Investigador responsable: **José Alemán**
3. Título : Doctorado Industrial CAM 2019. Entidad financiadora: Comunidad de Madrid. Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid Duración, desde: 2020 hasta: 2023 Investigador responsable: **Félix Zamora Abanades**. Cantidad subvencionada al subproyecto: 90.000 €.
5. Título : Doctorado Industrial CAM 2020. Entidad financiadora: Comunidad de Madrid. Entidades participantes: Universidad Autónoma de Madrid Duración, desde: 2021 hasta: 2024 Investigador responsable: **Félix Zamora Abanades**. Cantidad subvencionada al subproyecto: 90.000 €.
6. Título: plataformas nanoestructuradas de (bio)-sensado "sample-to-result" para aplicaciones de última generación en clínica y seguridad alimentaria Financiado: Comunidad Autónoma de Madrid (CAM). TRANSNANOAVANSENS-CM. Referencia: S2018/NMT-4349 **Duración: 2019-2022.IP subproyecto coordinado: María Encarnación Lorenzo Abad Cuantía de la subvención: 120000 Euros**
7. Título: red madrileña de nanomedicina en imagen molecular. entidad financiadora: comunidad de madrid (b2017/bmd-3867 renim-cm), cofinanciado con fondos estructurales de la unión europea duración desde: 2018 hasta: diciembre 2021. Cuantía de la subvención: total 358.303 €. asignación al grupo de fig-uam: 51939 €. investigador responsable: **Manuel Desco Menéndez**
8. Título: Sistema experto para identificación del riesgo de contaminantes emergentes provenientes de pesticidas (PRIES-CM). Comunidad de Madrid. Proyectos sinérgicos Y2020/EMT6290. DURACION DESDE: 1/6/2021. HASTA: 31/5/2024. PRESUPUESTO: 718.300 € en colabnoración con el CSIC-INIA, UAM 348.188 € - CSIC-INIA 370.111 € INVESTIGADOR PRINCIPAL: **M. Alcamí**

Otros proyectos Internacionales

Título: Covalent organic framework: synthesis and applications. Entidad financiadora: National Research Foundation of Singapore. Entidades participantes: National University of Singapore, Nanyang Technological University of Singapore, Universidad Autónoma de Madrid, UC Berkeley, Institute for Molecular Science/Japan. Duración, desde: 2016 hasta: 2020 Investigador Principal: Loh Kian Ping. Investigador responsable: **Félix Zamora**

Abanades. Número de investigadores participantes: 4. Cantidad subvencionada: 7.900.000 € (total)

Fuentes privadas

Título: *Diseño, síntesis y optimización de nuevos materiales con aplicación industrial*

Entidad financiadora: **Altenea Biotech**. Entidades participantes: UAM. Duración: desde: 08-02-2021 hasta: 31-12-2021. IP: **Ramón Gómez Arrayás**

Número de investigadores participantes: 4 Cuantía: 112,198.00 € + IVA

Título: Predicting the environmental impact of relevant pesticides

ENTIDAD FINANCIADORA: **ADAMA AGA Ltd.**

DURACION DESDE: 8/9/2020 HASTA: 31/12/2022

PRESUPUESTO: 42.500 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: **M. Alcamí**

III. TESIS DOCTORALES

22/01/2021 **Muñoz Casellas, Nicolas**, *Polímeros Supramoleculares multifuncionales: diseño, síntesis, caracterización y aplicaciones*. Directores: Torres Cebada, García Iglesias, Miguel.

22/01/2021 **Martínez Martín, Paloma**. *Diseño y síntesis de ligandos poliaza trisheterocíclicos para la obtención de materiales cristalinos de tipo MOFs con lantánidos. Estudio de aplicaciones basadas en su luminiscencia*. Director: Rodriguez Ubis, J. Carlos.

01-03-2021 **Pla Terrada, Paula**. *Estabilidad, reactividad y espectros infrarrojos de moléculas de carbono: de la química orgánica a la astrofísica*. Directores: Alcamí, Manuel, Wang, Yan.

11/03/2021 **Garrido Castro, Alberto Fernando**. *Estrategias Foto- y Organo-Catalíticas para la preparación de compuestos nitrogenados*. Directores: Aleman Lara, Jose Julian, Maestro, Carmen. Mención Doc. Internacional.

18/03/2021 **Mateo De Doni, Luis Manuel**. *Nuevos materiales aceptores de electrones y síntesis de nanoestructuras de porfirinas en superficies*. Directores: Torres Cebada, Tomas, Bottari Giovanni

09/04/2021 **Laina Martín, Víctor**. *Reactivos Organosililados en Síntesis Asimétrica: Desarrollo de Nuevas Estrategias y Modos de Activación*. Directores: Aleman Lara, Jose Julian; Fernandez Salas, Jose Antonio. Mención Doc. Internacional.

28/05/2021 **Serrano Molina, David**. *Macrociclos Funcionales Multicomponente Ensamblados mediante Enlace de Hidrógeno*. Directores Gonzalez Rodriguez, David; Mayoral Muñoz, Maria Jose

21/06/2021 **Jiménez Almarza, Alicia**. *Materiales orgánicos conjugados en fotocatalisis*. Directores: Aleman Lara, Jose Julian; Rubén Mas.

06/07/2021 **Lavarda, Giulia**. *Síntesis y propiedades de sistemas basados en subftalocianinas para conversión de energía solar*. Director: Torres Cebada. Mención Doc. Internacional.

16/07/2021 **García Vegas, Verónica** *Nanoscale Coordination Polymers with Molecular Recognition. From Nanocarriers and Selective Separations to Inks for 3D Printing*. Directores: Amo, Pilar; Zamora, Félix.

06/10/2021 **Martínez Mingo, Mario**. *Funcionalización de Enlaces C-H a Largo Alcance Catalizado por Pd en Derivados de Amina y Aminoácido Dirigido por el Grupo 2-Piridilsulfonilo*. Directores: Carretero Gonzalez, Juan Carlos, Rodriguez Garrido, Nuria. Mención Doc. Internacional.

10/11/2021 **Kim Lee, Shin-Ho** *Nuevos electrófilos en la carboboración de alquinos catalizada por cobre*. Directores: Gomez Arrayas, Ramon Jesus, Mauleon Pablo. Mención Doc. Internacional.

03/12/2021. **Guerrero Corella, Andrea** *Nuevas Estrategias para la Activación de Nucleófilos*. Directores: Aleman Lara, Jose Julian, Fraile Carrasco, Alberto. Mención Doc. Internacional.

IV. PROGRAMA DE SEMINARIOS (2021)

Fecha	Título	Ponente
21/1	Desde la Organo-y Foto-catálisis hasta los Materiales Catalíticos	Prof Jose Alemán Departamento Química Orgánica UAM
5/2	Functional Molecular Systems and Materials from Self-assembly	Prof. David González Rodríguez Departamento Química Orgánica UAM
5/3	Towards the design of efficient heterogeneous catalysts employing graphene materials	Dr. Matias Blanco Departamento Química Orgánica UAM
14/4	Reacciones de formación de enlaces C-C y C-B catalizadas por Ni	Prof Diego Cárdenas Morales Departamento Química Orgánica UAM
5/10	New Catalysts and Concepts for C-C and C-Heteroatom Bond Formation	Prof. Lukas J. Gooßen Ruhr-Universität Bochum

22/10	Prebiotic Systems Chemistry: New Perspectives for the Origin of Life	Prof. Andres de la Escosura Departamento Química Orgánica UAM
11/11	Taking a look at Cobalt(I): photocatalysis and organometallic complexes	Dr. Alicia Casitas Faculty of Chemistry at Philipps-Universität Marburg
1/12	Azo-based Fluorogenic Compounds for Theranosis	Prof. María Ribagorda Departamento Química Orgánica UAM

V. Listado de investigadores doctores de la unidad

Comisión de dirección

Director del Instituto: Tomás Torres Cebada

Subdirector del Instituto: Manuel Alcamí Pertejo

Secretario: F. Javier Adrio Sevilla

Directores de sección: Diego Cárdenas Morales, Encarnación Lorenzo Abad,

Representante personal del centro: Félix Zamora Abanades

Apellidos, Nombre	Nombre Publicaciones	Categoría	Author ID	ORCID
Adrio Sevilla, Javier	Javier Adrio	Profesor Titular de Universidad	6603703233	0000-0001-6238-6533
Alcamí Pertejo, Manuel	Manuel Alcamí	Catedrático de Universidad	7004549286	0000-0002-3752-5215
Alemán Lara, José	José Alemán	Profesor Titular de Universidad	7003277805	0000-0003-0164-1777
Alonso Montero, Inés	Inés Alonso	Profesor Titular de Universidad	7006334517	0000-0002-5556-5995
Amo Ochoa, Pilar	Pilar Amo.Ochoa	Profesor Titular de Universidad	6603051895	0000-0002-1952-1020
Bottari, Giovanni	Giovanni Botari	Profesor Titular de Universidad	6602742721	0000-0001-6141-7027
Bruña Fernandez, Sonia	Sonia Bruña	Ayudante Doctor	36163940800	0000-0001-6769-0649
Buñuel Magdalena, Elena	Elena Buñuel	Profesor Titular de Universidad	6701832541	0000-0001-9620-8305
Cabrera Herranz, Silvia	Silvia Cabrera	Profesor Contratado Doctor	7005181247	0000-0002-4907-2932
Cárdenas Morales, Diego J.	Diego J. Cárdenas	Catedrático de Universidad	7004841443	0000-0002-1707-6445
Carretero González, Juan Carlos	Juan C. Carretero	Catedrático de Universidad	54790569300	0000 0003, 4822 5447
Cerezo Javier	Javier Cerezo	Profesor Asociado		0000-0003-4820-4317
Cid de la Plata, Belén	M. Belén Cid	Profesor Titular de Universidad	7004969418	0000-0001-7713-3715
Corral Pérez, Inés	Inés Corral	Ayudante Doctor	7003632859	0000-0002-9455-4906
Cuadrado Sánchez,	Isabel	Catedrático de	56822266500	0000-0002-6539-6224

Isabel	Cuadrado	Universidad		
Delgado Gil, Salome	Salome Delgado	Catedrático de Universidad	7006506588	0000-0002-5068-416X
Díaz Blanco, Cristina	Cristina Díaz	Investigador Ramón y Cajal	7202447339	0000-0002-9318-5846
Díaz-Tendero Victoria, Sergio	Sergio Díaz-Tendero	Profesor Titular de Universidad	6507772206	0000-0001-6253-6343
Fernández Salas, Jose Antonio	J. A. Fernández-Salas	Investigador Ramón y Cajal		0000.0003-3158-9607
Escosura Navazo, Andrés de la	Andrés De la Escosura	Profesor Contratado Doctor	6507556528	0000-0002-0928-8317
Fraile Carrasco, Alberto	Alberto Fraile	Profesor Contratado Doctor	16230060700	0000-0002-7510-8521
García Mendiola, Tania	Tania García-Mendiola	Ayudante Doctor	55350877200	0000-0002-7634-5844
Gómez Arrayás, Ramón	Ramón Gómez Arrayás	Profesor Titular de Universidad	56566609900	0000-0002-5665-0905
Gómez Quiroga, Adoración	Adoración Gómez Quiroga	Profesor Titular de Universidad	6603944369	0000-0002-9261-9542
González Rodríguez, David	David González-Rodríguez	Profesor Titular de Universidad	6505988915	0000-0002-2651-4566
Gonzalez-Vázquez, Jesús	Jesus González-Vázquez	Ayudante Doctor	6507097448	0000-0003-2204-3549
Lamsabhi, Al Mokhtar	Al Mokhtar Lamsabhi,	Profesor Contratado Doctor	6602999857	0000-0002-1509-2513
Lorenzo Abad, Encarnación	Encarnación Lorenzo	Catedrático de Universidad	7004855368	0000-0001-8432-9652
Martín Castro, Ana María	Ana M. Martín-Castro	Profesor Titular de Universidad	6701385216	0000-0003-4253-8426
Martínez Díaz, M ^a Victoria	M. Victoria Martínez-Díaz	Profesor Titular de Universidad	6701743077	0000-0002-4566-4981
Martínez Fernández Lara	Lara Martínez Fernández	Ayudante Doctor		
Mas Ballesté, Rubén	Rubén Mas-Ballesté	Profesor Contratado Doctor	8639593100	0000-0003-1988-8700
Mauleón Pérez, Pablo	Pablo Mauleón	Investigador Ramón y Cajal	6701859567	0000-0002-3116-2534
Mo Romero, Otilia	Otilia Mo	Catedrático de Universidad	7004272900	0000-0003-2596-5987
Nogueira Juan José	Juan J. Nogueira	Atracción de Talentos de la CAM. Modalidad 1		0000-0001-7419-5670
Palacios Cañas, Alicia	Alicia Palacios	Profesor Contratado Doctor	8896352500	0000-0001-6531-9926
Pariente Alonso, Félix	Félix Pariente	Profesor Titular de Universidad	7004130268	0000-0002-5115-8516
Parra Sánchez, Alejandro	Alejandro Parra	Ayudante Doctor	57038215800	0000-0002-0097-2585

Revenga Parra, Mónica	Mónica Revenga	Profesor Contratado Doctor	8216702000	0000-0002-0699-7185
Ribagorda Lobera, María	María Ribagorda	Profesor Titular de Universidad	6602566796	0000-0001-7185-4095
Rodríguez Garrido, Nuria	Nuria Rodríguez	Profesor Contratado Doctor	7103138677	0000-0002-7174-4555
Rodríguez Morgade, M. Salomé	M. Salome Rodríguez-Morgade	Profesor Titular de Universidad	8779366200	0000-0002-0002-7049
Torre Ponce, Gema de la	Gema De la Torre	Profesor Titular de Universidad	6701362903	0000-0002-4585-9746
Torres Cebada, Tomás	Tomás Torres	Catedrático de Universidad	7007012322	0000-0001-9335-6935
Tortosa Manzanares, Mariola	Mariola Tortosa	Profesor Titular de Universidad	8734310100	0000-0002-5107-0549
Urbano Pujol, Antonio	Antonio Urbano	Profesor Titular de Universidad	7005068222	0000-0003-2563-1469
Wang, Yang	Yang Wang	Ayudante Doctor	56796155900	0000-0003-2540-2199
Yáñez Montero, Manuel	Manuel Yáñez	Catedrático de Universidad	7006911382	0000-0003-0854-585X
Zamora Abanades, Félix	Félix Zamora	Catedrático de Universidad	7004497060	0000-0001-7529-5120